

СТРУКТУРА ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

УДК 548.73;547.7

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОЕ КАРТИРОВАНИЕ В ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКОМ ДИЗАЙНЕ. 9. РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СОПРЯЖЕННЫХ АМИНОДИЕНОВ

© 2002 г. В. Б. Рыбаков¹, Е. В. Бабаев,
А. А. Цисевич, А. В. Аракчеева*, А. Шонлебер**

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,

** Институт металлургии и материаловедения РАН, Москва*

*** Институт кристаллографии Лозаннского университета, Швейцария*

Поступила в редакцию 12.03.2002 г.

Методом монокристалльной дифракции исследованы структуры двух аминодиенов 1-пиперидил-4-[5-(4-нитрофенил)-оксазол-2-ил]-бута-1,3-диена $C_{18}H_{19}N_3O_3$ (IIa) и 1-гексаметиленимин-4-[5-(4-нитрофенил)-оксазол-2-ил]-бута-1,3-диена $C_{19}H_{21}N_3O_3$ (IIb), содержащих оксазольный фрагмент. Структура IIa ($a = 16.181(6)$, $b = 5.939(3)$, $c = 17.337(9)$ Å, $\beta = 96.13(2)^\circ$, $Z = 4$, пр. гр. $P2_1$) и модель структуры IIb ($a = 7.4704(11)$, $b = 10.9904(19)$, $c = 43.434(6)$ Å, $\beta = 91.24(1)^\circ$, $Z = 8$, пр. гр. $P2_1/c$) определены прямыми методами и уточнены до $R = 0.060$ и $R = 0.238$ соответственно. Несмотря на различие между IIa и IIb, заключающееся в размере кольца циклического амина, дизайн этих двух структур одинаков. Каждая структура содержит две топологически идентичные, но кристаллографически независимые молекулы. В структуре IIa установлены внутримолекулярные Н-связи между атомом N оксазольного фрагмента и атомом Н диенового фрагмента; в IIb аналогичные Н-связи отсутствуют.

ВВЕДЕНИЕ

Данная работа является продолжением проводимых нами структурных исследований гетероциклических соединений, обладающих способностью легко вступать в различные перегруппировки и реакции трансформации циклов [1–20]. Как и в предыдущих наших сообщениях, методом рентгеноструктурного анализа (РСА) мы последовательно изучаем строение всех интермедиатов и конечных продуктов многоступенчатых реакций слож-

ных циклизаций и рециклизаций. Данные о строении молекул 1-пиперидил-4-[5-(4-нитрофенил)-оксазол-2-ил]-бута-1,3-диена $C_{18}H_{19}N_3O_3$ (IIa) и 1-гексаметиленимин-4-[5-(4-нитрофенил)-оксазол-2-ил]-бута-1,3-диена $C_{19}H_{21}N_3O_3$ (IIb), обсуждаемых в настоящей статье, в Кембриджском банке структурных данных (версия 11.01) [21] отсутствуют.

Синтез соединения IIa осуществлен по схеме 1²:

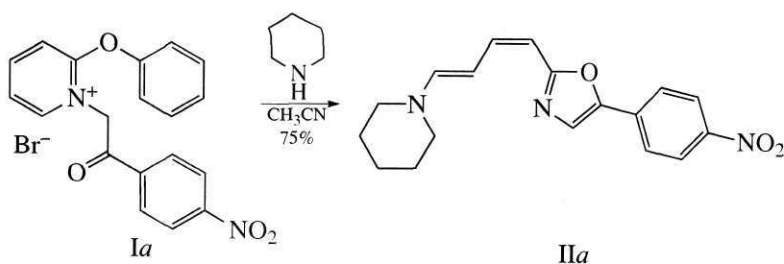


Схема 1

с использованием следующей методики: 1-(4-нитрофенил)-2-феноксипиридиний бромид 0.1 г (0.24 ммоль) растворяли в ацетонитриле. К образовавшемуся раствору светло-желтого цвета при перемешивании добавляли пиперидин 0.04 г

(0.48 ммоль) при комнатной температуре. Раствор приобрел темно-красный цвет. Смесь выдерживали в течение 2 суток при комнатной температуре, выпавшие игольчатые кристаллы фиолетового цвета отфильтровывали и промывали

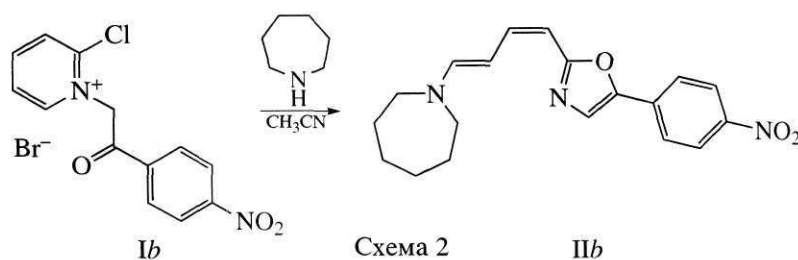
¹E-mail: rybakov@biocryst.phys.msu.su

² При участии Т.А. Смирновой.

эфиром. Дополнительное количество чистого продукта можно выделить путем разбавления фильтрата водой с последующим фильтрованием осадка. В результате было получено 0.06 г (75%) 1-[5-(4-нитрофенил)-оксазол-2-ил]-4-пипе-

ридил-бутадиена-1,3 (IIa). Синтез и другие превращения исходной пиридиниевой соли будут предметом отдельного сообщения.

Синтез соединения IIb описан ранее в [22] и осуществлен по схеме 2:



Согласно [23], указанные соединения обладают антимикробной активностью, что явилось причиной подробного исследования их кристаллических структур. Кроме того, получение структурных характеристик этих соединений представляло особый интерес с точки зрения концепции рентгеноструктурного картирования, поскольку ранее нами были изучены структуры ряда 2-замещенных *N*-фенацилпиридиниевых солей и структуры разнообразных продуктов их превращений, относящихся к различным классам гетероциклов, например, производным пиридона, оксазолопиридина [1, 2, 6], катионных производных тиазолопиридина [24], а также индолизина [4, 11].

Таблица 1. Кристаллографические характеристики, детали рентгендифракционного эксперимента и уточнения для структур IIa и IIb

Соединение	C ₁₈ H ₁₉ N ₃ O ₃ (IIa)	C ₁₉ H ₂₁ N ₃ O ₃ (IIb)
Сингония	Моноклинная	Моноклинная
Пространственная группа	<i>P2</i> ₁	<i>P2</i> ₁ / <i>c</i>
<i>a</i> , Å	16.181(6)	7.470(1)
<i>b</i> , Å	5.939(3)	10.990(2)
<i>c</i> , Å	17.337(9)	43.434(6)
β, град	96.13(2)	91.24(1)
<i>V</i> , Å ³	1656.5(13)	3565.2(10)
<i>Z</i>	4	8
ρ _{выч} , г/см ³	1.305	1.265
μ(МоKα), см ⁻¹	0.091	0.087
Размеры кристалла, мм	0.35 × 0.40 × 0.45	0.10 × 0.12 × 0.02
θ _{max} , град	28	30
Число рефлексов с <i>I</i> ≥ 2σ(<i>I</i>)/число параметров	4218/290	2131/177
<i>R</i> ₁ / <i>wR</i> ₂	0.062/0.130	0.238/0.462
Δρ _{max} /Δρ _{min} , э/Å ³	0.172/-0.130	0.322/-0.320

Таблица 2. Длины связей *d* (Å) в структуре IIa (молекулы *A*, *B*) и в структуре IIb (молекулы *A*, *B*)

Связь	<i>d</i>	
	IIa	IIb
N(1)–C(2)	1.486(8)	1.473(12)
N(1)–C(6)	1.403(8)	
N(1)–C(7)		1.473(12)
N(1)–C(8)	1.351(4)	1.43(2)
C(2)–C(3)	1.433(8)	1.436(10)
C(3)–C(4)	1.533(11)	1.436(10)
C(4)–C(5)	1.479(11)	1.436(10)
C(5)–C(6)	1.417(7)	1.436(10)
C(6)–C(7)		1.436(10)
C(8)–C(9)	1.335(4)	1.37(2)
C(9)–C(10)	1.409(4)	1.408(18)
C(10)–C(11)	1.345(4)	1.36(2)
C(11)–C(12)	1.421(4)	1.45(2)
C(12)–N(2)	1.309(3)	1.278(18)
C(12)–O(1)	1.372(3)	1.356(16)
C(13)–O(1)	1.380(3)	1.401(14)
C(13)–C(14)	1.350(4)	1.275(19)
C(13)–C(15)	1.441(4)	1.52(2)
C(14)–N(2)	1.360(4)	1.39(2)
C(15)–C(16)	1.407(7)	1.457(13)
C(15)–C(20)	1.380(7)	1.457(13)
C(16)–C(17)	1.359(10)	1.349(16)
C(17)–C(18)	1.344(7)	1.404(13)
C(18)–C(19)	1.400(7)	1.404(13)
C(18)–N(3)	1.458(4)	1.44(2)
C(19)–C(20)	1.356(11)	1.349(15)
N(3)–O(31)	1.214(2)	1.248(11)
N(3)–O(32)	1.214(2)	1.248(11)

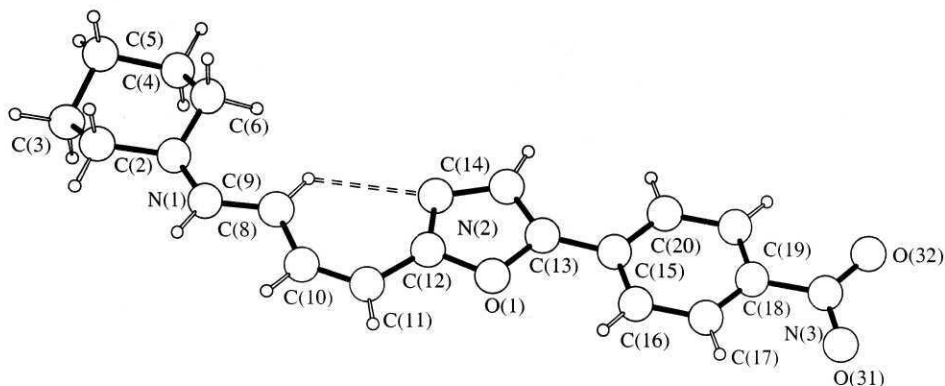


Рис. 1. Пространственное расположение атомов и их нумерация структуре в молекуле *Pa*.

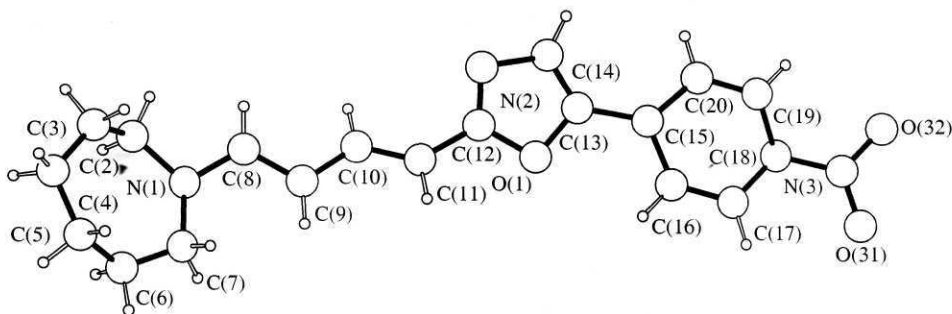


Рис. 2. Пространственное расположение атомов и их нумерация структуре в молекуле *Pb*.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Экспериментальные интенсивности дифракционных отражений для *Pa* получены при комнатной температуре на четырехкружном дифрактометре CAD-4 [25] (MoK_α – излучение, графитовый монохроматор, ω -сканирование). Сбор экспериментальных данных для *Pb* проводился при комнатной температуре на четырехкружном дифрактометре KM4-CCD в динамическом режиме [26] (MoK_α -излучение, графитовый монохроматор, CCD-детектор, расстояние кристалл-детектор 51.7 мм). Параметры элементарных ячеек для *Pa* определяли и уточняли по 25 рефлексам в интервале углов θ 14...16°, для *Pb* – использовалось 9640 отражений с $I > 6\sigma(I)$ из всей области регистрации рефлексов. Основные параметры экспериментов и кристаллографические характеристики соединений *Pa* и *Pb* приведены в табл. 1.

Поскольку кристаллы исследованных соединений имеют низкие линейные коэффициенты поглощения и малые размеры, поправка на поглощение не вводилась. Первичная обработка массивов экспериментальных данных для *Pa* проводилась по комплексу программ WinGX98 [27]. Интегральные интенсивности и их первичная обработка для *Pb* получены с помощью комплекса программ “KM4” [28]. Все последующие расчеты

выполнялись в рамках комплекса программ SHELX97 [29]. Кристаллические структуры определены прямыми методами с последующим уточнением позиционных и тепловых параметров в анизотропном приближении для всех неводородных атомов в структуре *Pa* и в изотропном приближении в структуре *Pb*. Для обозначения атомов была использована единая система нумерации атомов в обоих исследованных соединениях. Поскольку структуры соединений *Pa* и *Pb* содержат по две кристаллографически независимые молекулы (*A* и *B*), то при их уточнении полноматричным МНК на одноименные связи в этих молекулах в пределах каждого соединения накладывались условия их равенства между собой. Так же уравнивались и тепловые параметры одноименных атомов. Положения атомов водорода в обеих структурах определялись с использованием геометрических критериев и уточнялись в жесткой связке с соответствующими атомами углерода. Тепловые поправки атомов водорода рассчитывались из тепловых поправок соответствующих атомов углерода [$U_{\text{изо}}(\text{H}) = 1.2U_{\text{изо/экв}}(\text{C})$]. Структурная информация для *Pa* и *Pb* (CIF-файлы) депонирована в Кембриджском банке структурных данных [21], CCDC № 191971 и 191972. Межатомные расстояния в *Pa* и *Pb* систематизированы в табл. 2. Пространственное расположение атомов

Таблица 3. Параметры межатомных контактов в Па

<i>D</i> – <i>H</i>	<i>d</i> (<i>D</i> – <i>H</i>)	<i>d</i> (<i>D</i> … <i>A</i>)	<i>d</i> (<i>H</i> … <i>A</i>)	ω <i>DHA</i>	<i>A</i>	(операция симметрии)
C(9A)–H(9A)	0.93	3.07(1)	2.490(8)	120.8(5)	N(2A)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(16A)–H(16A)	0.93	2.88(1)	2.590(6)	98.7(5)	O(1A)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(17A)–H(17A)	0.93	2.71(1)	2.408(8)	98.4(6)	O(31A)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(19A)–H(19A)	0.93	2.71(1)	2.445(7)	96.5(5)	O(32A)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(9B)–H(9B)	0.93	3.10(1)	2.501(8)	122.4(5)	N(2B)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(17B)–H(17B)	0.93	2.72(1)	2.411(7)	99.1(5)	O(31B)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(19B)–H(19B)	0.93	2.74(1)	2.484(8)	96.0(6)	O(32B)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(20B)–H(20B)	0.93	2.84(1)	2.505(6)	101.1(6)	O(1B)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(3A)–H(3A1)	0.97	3.76(1)	2.975(6)	139.2(6)	N(3B)	[1 – <i>x</i> ; 1/2 + <i>y</i> ; 2 – <i>z</i>]
C(3A)–H(3A1)	0.97	3.71(1)	2.781(7)	160.6(6)	O(32B)	[1 – <i>x</i> ; 1/2 + <i>y</i> ; 2 – <i>z</i>]
C(3A)–H(3A2)	0.97	3.73(1)	2.786(8)	164.1(6)	O(32B)	[1 – <i>x</i> ; <i>y</i> – 1/2; 2 – <i>z</i>]
C(5A)–H(5A1)	0.97	3.61(1)	2.745(7)	148.6(6)	O(31B)	[1 – <i>x</i> ; <i>y</i> – 1/2; 2 – <i>z</i>]
C(11A)–H(11A)	0.93	3.33(1)	2.675(7)	128.3(5)	O(31A)	[2 – <i>x</i> ; <i>y</i> + 3/2; 2 – <i>z</i>]
C(10A)–H(10A)	0.93	3.38(1)	2.757(5)	125.4(5)	O(31A)	[2 – <i>x</i> ; <i>y</i> + 3/2; 2 – <i>z</i>]
C(17A)–H(17A)	0.93	3.62(1)	2.848(5)	140.6(5)	O(1A)	[2 – <i>x</i> ; <i>y</i> – 1/2; 2 – <i>z</i>]
C(19A)–H(19A)	0.93	3.36(1)	2.529(6)	148.8(5)	O(31B)	[<i>x</i> ; <i>y</i> – 2; <i>z</i>]
C(3B)–H(3B1)	0.97	3.61(1)	2.763(6)	146.1(6)	O(32A)	[2 – <i>x</i> ; <i>y</i> + 1/2; 1 – <i>z</i>]
C(5B)–H(5B2)	0.97	3.69(1)	2.959(8)	132.9(7)	O(31A)	[2 – <i>x</i> ; <i>y</i> – 1/2; 1 – <i>z</i>]
C(11B)–H(11B)	0.93	3.32(1)	2.694(7)	125.1(5)	O(32B)	[1 – <i>x</i> ; <i>y</i> – 3/2; 1 – <i>z</i>]
C(10B)–H(10B)	0.93	3.32(1)	2.704(5)	124.2(5)	O(32B)	[1 – <i>x</i> ; <i>y</i> – 3/2; 1 – <i>z</i>]
C(14B)–H(14B)	0.93	3.66(1)	2.988(6)	130.4(5)	O(32A)	[<i>x</i> ; 1 + <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(17B)–H(17B)	0.93	3.41(1)	2.561(6)	151.1(5)	O(32A)	[<i>x</i> ; <i>y</i> + 2; <i>z</i>]
C(19B)–H(19B)	0.93	3.59(1)	2.780(5)	145.6(5)	O(1B)	[1 – <i>x</i> ; <i>y</i> + 1/2; 1 – <i>z</i>]

Примечание. *D* – атом-донор; *A* – атом-акцептор; *H* – атом водорода; расстояния *d*, Å, угол ω , град.

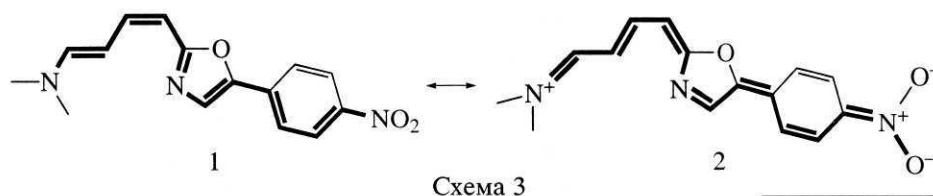
в молекулах соединений *Па* и *Пб* показано на рис. 1 и 2, полученных с использованием программы PLUTON96 [30]. Межатомные и межмолекулярные контакты с участием атомов водорода в структурах *Па* и *Пб* вычислены по программе PARST95 [31] и систематизированы в табл. 3 и 4 – соответственно.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Состав молекул исследованных соединений *Па* и *Пб* отличается друг от друга только размером кольца циклического амина – в *Па* это шестичленный пиперидин, а в *Пб* – семичленный гексаметиленмин. В то же время пространственное строение исследованных соединений отличается принципиально. Соединение *Па* представляет собой 1*E*, 3*Z*-изомер, тогда как соединение *Пб* имеет 1*E*, 3*E*-конфигурацию замещенного диенового фрагмента. Закономерности образования *E*-, *Z*- и *E*-, *E*-изомеров подробно обсуждались нами ранее [22].

Указанное строение молекул *Па*, во-первых, приводит к образованию внутримолекулярной

H-связи C(9)H(9)…N(2) (рис. 1, табл. 3), что в принципе невозможно в молекулах соединения *Пб* (рис. 2). Во-вторых, суммарная длина молекулы *Па* меньше длины молекулы *Пб* (между сопоставимыми фрагментами N(1)…N(3) на 0.836 Å). Совокупность этих факторов приводит к различным формам упаковки молекул в кристаллах, что отражается на их габитусе. Так, *Па* кристаллизуется в виде темно-красных, хорошо ограненных призм, *Пб* – в виде тончайших пластин темно-красного, почти черного цвета с металлическим отливом. Из-за чрезвычайно малых размеров кристалла *Пб*, относительно удовлетворительный набор интенсивностей, пригодный лишь для определения модели, удалось получить исключительно с использованием высокочувствительного CCD-детектора. Отмеченная интенсивная окраска кристаллов позволила ранее предположить [22] существование внутримолекулярного переноса заряда от аминогруппы к нитрогруппе через азаполиеновую систему в соответствии со схемой 3 (показано на примере 1*E*-, 3*Z*-изомера):



Данные РСА позволяют прояснить степень вклада структур с переносом заряда в строение изучаемых диенов. Сопоставим установленные в исследованных соединениях длины связей в цепи сопряжения от аминогруппы до нитрогруппы с гипотетическими резонансными структурами 1 и 2. Во-первых, рассмотрим нитрофенильную группу. Расстояния C–N от фенильного радикала до NO₂-группы, а также N–O в ней хотя несколько и отличаются друг от друга, но судя по величинам, соответствуют в большей степени структуре 1. Сам же фенильный цикл слегка деформирован и по своим геометрическим параметрам больше отвечает циклу в структуре 2, поскольку связи C(16)–C(17) и C(19)–C(20) (1.35(2) Å) существенно короче остальных связей в цикле (1.40(2)–1.46(2) Å). Во-вторых, рассмотрим оксазольный фрагмент. Пятичленный цикл по своей геометрии различен в мо-

лекулах *Pa* и *Pb*. Так, в молекуле *Pa* явно прослеживается делокализация двойных связей в азиadiеновом фрагменте C(12)N(2)C(14)C(13), поскольку расстояния C(12)–N(2), N(2)–C(14) и C(13)–C(14) выравниваются (1.31(1) – 1.36(1)–1.35(2) Å). Между тем, в том же азиadiеновом структурном фрагменте молекулы *Pb* можно отметить большее альтернирование длин тех же связей (1.28(2)–1.39(2)–1.28(2) Å), что свидетельствует в пользу вклада структуры 1 в строение пятичленного цикла для *Pb*. В-третьих, рассмотрим диеновый фрагмент. По величинам длин формально простых и формально двойных связей бутадиеновый фрагмент в обеих молекулах в большей степени можно отнести к структуре 1, но в соединении *Pa* альтернирование связей в обсуждаемом фрагменте более контрастно, нежели в *Pb*, где такое альтернирование выражено менее отчетливо. Бо-

Таблица 4. Параметры межатомных контактов в *Pb*

<i>D</i> –H	<i>d</i> (<i>D</i> –H)	<i>d</i> (<i>D</i> ⋯ <i>A</i>)	<i>d</i> (H⋯ <i>A</i>)	ω <i>DHA</i>	<i>A</i>	(операция симметрии)
C(7A)–H(7A2)	0.97	3.82(6)	2.89(1)	161(3)	O(31B)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(10A)–H(10A)	0.93	3.13(3)	2.93(2)	94(1)	N(2A)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(16A)–H(16A)	0.93	2.91(2)	2.59(1)	101(1)	O(1A)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(17A)–H(17A)	0.93	2.75(2)	2.48(2)	97(1)	O(31A)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(19A)–H(19A)	0.93	2.73(2)	2.43(2)	99(1)	O(32A)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(3B)–H(3B1)	0.97	3.65(4)	2.75(3)	154(2)	O(32A)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(7B)–H(7B2)	0.97	3.85(6)	2.93(3)	158(2)	O(31A)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(10B)–H(10B)	0.93	3.09(2)	2.85(2)	96(1)	N(2B)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(16B)–H(16B)	0.93	2.97(2)	2.65(1)	101(1)	O(1B)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(17B)–H(17B)	0.93	2.70(2)	2.40(2)	98(1)	O(31B)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(19B)–H(19B)	0.93	2.78(3)	2.51(2)	97(1)	O(32B)	[<i>x</i> ; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(2A)–H(2A1)	0.97	3.54(2)	2.63(1)	157(1)	O(31A)	[1 – <i>x</i> ; <i>y</i> – 1/2; 1/2 – <i>z</i>]
C(8A)–H(8A)	0.93	3.52(3)	2.72(2)	145(1)	O(31A)	[1 – <i>x</i> ; <i>y</i> – 1/2; 1/2 – <i>z</i>]
C(2A)–H(2A2)	0.97	3.71(4)	2.94(3)	137(2)	O(32B)	[<i>x</i> – 1; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(6A)–H(6A2)	0.97	3.51(2)	2.73(2)	138(1)	O(32A)	[<i>x</i> – 1; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(16A)–H(16A)	0.93	3.64(3)	2.86(2)	142(1)	N(2A)	[<i>x</i> – 1; <i>y</i> ; <i>z</i>]
C(2B)–H(2B1)	0.97	3.34(2)	2.51(2)	144(1)	O(31B)	[2 – <i>x</i> ; <i>y</i> – 1/2; 1/2 – <i>z</i>]
C(8B)–H(8B)	0.93	3.50(3)	2.64(1)	155(1)	O(31B)	[2 – <i>x</i> ; <i>y</i> – 1/2; 1/2 – <i>z</i>]
C(14A)–H(14A)	0.93	3.74(3)	2.93(2)	146(1)	O(1B)	[2 – <i>x</i> ; <i>y</i> – 1/2; 1/2 – <i>z</i>]
C(16B)–H(16B)	0.93	3.57(2)	2.69(2)	159(1)	N(2B)	[2 – <i>x</i> ; <i>y</i> + 1/2; 1/2 – <i>z</i>]
C(11B)–H(11B)	0.93	3.81(3)	2.98(2)	150(1)	N(2A)	[2 – <i>x</i> ; <i>y</i> + 1/2; 1/2 – <i>z</i>]
C(6B)–H(6B2)	0.97	3.54(3)	2.73(1)	142(1)	O(32B)	[2 – <i>x</i> ; <i>y</i> + 1/2; 1/2 – <i>z</i>]

Примечание. *D* – атом-донор; *A* – атом-акцептор; H – атом водорода; расстояния *d*, Å, угол ω, град.

лее определенное заключение о вкладе структур 1 и 2 в геометрию молекул лишь на основании анализа диенового фрагмента затрудняется вследствие низкого качества экспериментальных данных Пб.

Тем не менее, из совокупности полученных данных следует, что вклад структуры 2 с переносом заряда действительно имеет место для обоих рассмотренных соединений, однако истинное строение молекул является промежуточным между резонансными структурами 1 и 2.

Анализ конформаций циклических аминов не являлся целью данного исследования, однако, параметры складчатости циклов могут быть рассчитаны по имеющимся координатам атомов.

Авторы признательны профессору Института кристаллографии университета Лозанны Ж.Шапуи за любезно предоставленную возможность проведения дифрактометрического эксперимента, а также выражают благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований за финансовую поддержку в оплате лицензии на пользование Кембриджским банком структурных данных (грант 99-07-90133).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Babaev E.V., Bozhenko S.V., Maiboroda D.A. et al.* // Bull. Soc. Chim. Belg. 1997. V. 106 (9-10). P. 631.
2. *Zhukov S.G., Rybakov V.B., Babaev E.V. et al.* // Acta Cryst. C. 1997. V. 53. P. 1909.
3. *Бабаев Е.В., Боженко С.В., Жуков С.Г., Рыбаков В.Б.* // Химия гетероцикл. соединений. 1997. № 8. С. 1105.
4. *Бабаев Е.В., Ефимов А.В., Жуков С.Г., Рыбаков В.Б.* // Химия гетероцикл. соединений. 1998. № 7. С. 983.
5. *Рыбаков В.Б., Жуков С.Г., Бабаев Е.В. и др.* // Кристаллография. 1999. Т. 44. № 6. С. 1067.
6. *Бабаев Е.В., Рыбаков В.Б., Жуков С.Г., Орлова И.А.* // Химия гетероцикл. соединений. 1999. № 4. С. 542.
7. *Рыбаков В.Б., Жуков С.Г., Бабаев Е.В. и др.* // Кристаллография. 2000. Т. 45. № 1. С. 108.
8. *Рыбаков В.Б., Жуков С.Г., Бабаев Е.В. и др.* // Кристаллография. 2000. Т. 45. № 2. С. 292.
9. *Zhukov S.G., Babaev E.V., Chernyshev V.V. et al.* // Z. Kristallogr. 2000. B. 215. S. 306.
10. *Рыбаков В.Б., Жуков С.Г., Пасичниченко К.Ю., Бабаев Е.В.* // Координационная химия. 2000. Т. 26. № 9. С. 714.
11. *Бабаев Е.В., Ефимов А.В., Рыбаков В.Б., Жуков С.Г.* // Химия гетероцикл. соединений. 2000. № 3. С. 401.
12. *Бабаев Е.В., Пасичниченко К.Ю., Рыбаков В.Б. и др.* // Химия гетероцикл. соединений. 2000. № 9. С. 1245.
13. *Бабаев Е.В., Пасичниченко К.Ю., Рыбаков В.Б., Жуков С.Г.* // Химия гетероцикл. соединений. 2000. № 10. С. 1378.
14. *Rybakov V.B., Babaev E.V., Dlinnykh Y.V.* // Acta Cryst. E. 2001. V. 57. P. o814.
15. *Рыбаков В.Б., Жуков С.Г., Бабаев Е.В., Зонневельд Э.* // Кристаллография. 2001. Т. 46. № 3. С. 435.
16. *Рыбаков В.Б., Троянов С.И., Бабаев Е.В. и др.* // Кристаллография. 2001. Т. 46. № 5. С. 1069.
17. *Рыбаков В.Б., Бабаев Е.В., Пасичниченко К.Ю., Зонневельд Э.* // Кристаллография. 2002. Т. 47. № 1. С. 76.
18. *Рыбаков В.Б., Бабаев Е.В., Чернышев В.В.* // Кристаллография. 2002. Т. 47. № 3. С. 473.
19. *Рыбаков В.Б., Бабаев Е.В., Пасичниченко К.Ю.* // Кристаллография. 2002. Т. 47. № 4. С. 678.
20. *Rybakov V.B., Babaev E.V., Belykh E.N.* // Acta Cryst. E. 2002. V. 58. P. o126.
21. *Allen F.H., Kennard O.* // Chem. Des. Automat. News. 1993. V. 8. № 1. P. 31.
22. *Babaev E.V., Tsisevich A.A.* // J. Chem. Soc., Perkin Trans. 1999. V. 1. № 4. P. 399.
23. *Майборода Д.А., Бабаев Е.В., Гончаренко Л.В.* // Хим.-фармац. журн. 1998. № 6. С. 24.
24. *Babaev E.V., Bush A.A., Orlova I.A. et al.* // Tetrahedron Lett. 1999. V. 40. № 42. P. 7553.
25. Enraf-Nonius CAD-4 Software. Version 5.0. Enraf-Nonius, Delft. The Netherlands, 1989.
26. Oxford Diffraction Ltd, 2001. CrysAlis Software System. Version 1.166. Oxford, U.K.
27. *Farrugia L.J.* WinGX98. X-Ray Crystallographic Programs for Windows. University of Glasgow, U.K., 1998.
28. Oxford Diffraction Ltd, 2000. KM4 Software. Version 1.164. Oxford, U.K.
29. *Sheldrick G.M.* SHELX97. Program for the Solution and Refinement of Crystal Structures. University of Gottingen, Germany, 1997.
30. *Spek A.L.* PLUTON96. Molecular Graphics Program. University of Utrecht, The Netherlands, 1996.
31. *Nardelli M.* // J. Appl. Cryst. 1995. V. 28. P. 659.