

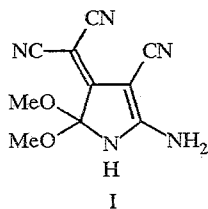
Л. Н. Кулешова, В. Н. Нестеров, В. Н. Хрусталева, О. Е. Насакин

**РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
2-АМИНО-5,5-ДИМЕТОКСИ-3-ЦИАНО-4-ДИЦИАНО-
МЕТИЛЕН-4,5-ДИГИДРОПИРРОЛА И ЕГО НАТРИЕВОЙ СОЛИ**

По данным РСА, в молекуле 2-амино-5,5-диметокси-3-циано-4-дицианометилен-4,5-дигидропиррола и анионе его натриевой соли благодаря плоскому строению реализуется система сопряжений, в которую включены как внутри-, так и экзоциклические связи, что находит отражение в их необычной длине. За счет развитой системы межмолекулярных водородных связей молекулы в кристаллах объединены в бесконечные трехмерные мотивы.

Строение некоторых гетероциклических соединений, содержащих один или более атомов азота в цикле, не удается удовлетворительно описать с помощью ковалентных или ионных формул [1—3]. Обычно это биполярные пяти- и шестичленные моно- и бициклические производные, имеющие в молекуле экзоциклические атомы N, O, S. Такие соединения называют мезоионными [4—6]. Их молекулы имеют сопряженную систему связей (как внутри-, так и экзоциклических) с нецелочисленными порядками. К настоящему времени достаточно полно изучены химия и строение сиднонов [7] и сиднониминов [8], производные которых обладают биологической активностью и благодаря высокой реакционной способности используются в синтезе новых гетероциклических соединений.

В продолжение работ по изучению строения замещенных гидрированных пятичленных гетероциклов [9] предпринято рентгеноструктурное исследование 2-амино-5,5-диметокси-3-циано-4-дицианометилен-4,5-дигидропиррола (I) и его натриевой соли (II).



Длины связей и значения валентных углов в двух симметрически независимых молекулах соединения I приведены в табл. 1 и 2; общий вид молекулы IA представлен на рис. 1. Независимые молекулы в кристалле I близки по строению: в них все атомы цикла и заместители, кроме метоксигрупп при атоме C(5), лежат в одной плоскости. Тетраэдрический валентный угол O(52)—C(5)—O(51) уменьшен до 100,6(1)° в молекуле А и до 101,2(2)° в молекуле Б. Отклонения экзоциклических атомов N(21), C(31), C(41) от средней плоскости гетероцикла, выполняющейся с точностью ±0,012 Å в молекуле А и ±0,015 Å в молекуле Б, в пределах 0,04...0,20 Å. Циановый и дициановый заместители в обеих молекулах располагаются по разные стороны от средней плоскости цикла; торсионный угол C(41)—C(4)—C(3)—C(31) составляет -12,7° в молекуле А и 8,2° в молекуле Б. Аминогруппа располагается по одну сторону от плоскости молекулы с дицианометиленовым заместителем. Отклонения атомов N(21), C(31), C(41) составляют соответственно -0,097, 0,198, -0,103 Å в молекуле А и -0,082, 0,113, -0,043 Å в молекуле Б. Несколько больше различаются значения торсионных углов

C(3)—C(4)—C(41)—C(43), характеризующих разворот плоской диганометиленовой группировки относительно плоскости гетероцикла: 175,4° в молекуле А и 168,6° в молекуле Б. По-видимому, этот разворот вызван стерическим отталкиванием между атомами C(31) и C(42), расстояние между которыми внутри молекулы составляет 3,121(2) Å в молекуле А и 3,222(2) Å в молекуле Б.

Таблица 1

Длины связей (d) в молекуле соединения I

Связь	d , Å	Связь	d , Å
Молекула А		Молекула Б	
O(51)—C(5)	1,400(2)	O(51')—C(5')	1,392(3)
O(51)—C(51)	1,442(3)	O(51')—C(51')	1,436(3)
O(52)—C(5)	1,394(2)	O(52')—C(5')	1,391(2)
O(52)—C(52)	1,444(3)	O(52')—C(52')	1,442(3)
N(1)—C(2)	1,333(2)	N(1')—C(2')	1,331(2)
N(1)—C(5)	1,447(2)	N(1')—C(5')	1,446(2)
N(21)—C(2)	1,303(2)	N(21')—C(2')	1,304(2)
N(31)—C(31)	1,160(2)	N(31')—C(31')	1,155(2)
N(42)—C(42)	1,156(2)	N(42')—C(42')	1,156(2)
N(43)—C(43)	1,150(2)	N(43')—C(43')	1,152(2)
C(2)—C(3)	1,434(2)	C(2')—C(3')	1,430(2)
C(3)—C(4)	1,387(2)	C(3')—C(4')	1,400(2)
C(3)—C(31)	1,416(3)	C(3')—C(31')	1,412(3)
C(4)—C(41)	1,383(2)	C(4')—C(41')	1,376(2)
C(4)—C(5)	1,536(2)	C(4')—C(5')	1,537(3)
C(41)—C(42)	1,421(3)	C(41')—C(42')	1,429(3)
C(41)—C(43)	1,426(3)	C(41')—C(43')	1,430(3)

Длины внутрициклической связи C(2)—N(1) (1,333(2) Å) и экзоциклической C(2)—N(21) (1,303(2) Å) фактически выравнены и укорочены по сравнению со среднестатистической длиной связи C_{sp2}—N_{sp2} (1,41 Å) [10], что свидетельствует о сопряжении в цепи атомов N(21)—C(2)—N(1), на которых делокализован положительный заряд молекулы. Другая цепь

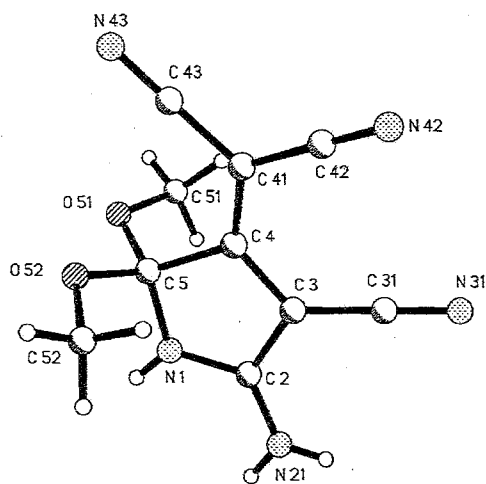


Рис. 1. Общий вид независимой молекулы IA

Валентные углы (ω) в молекуле соединения I

Угол	ω , град.	Угол	ω , град.
Молекула А		Молекула Б	
C(5)—O(51)—C(51)	115,8(1)	C(5')—O(51')—C(51')	115,6(2)
C(5)—O(52)—C(52)	115,4(1)	C(5')—O(52')—C(52')	115,2(2)
C(2)—N(1)—C(5)	112,6(2)	C(2')—N(1')—C(5')	112,8(2)
N(21)—C(2)—N(1)	124,2(2)	N(21')—C(2')—N(1')	124,1(2)
N(21)—C(2)—C(3)	126,5(2)	N(21')—C(2')—C(3')	126,4(2)
N(1)—C(2)—C(3)	109,3(2)	N(1')—C(2')—C(3')	109,5(2)
C(4)—C(3)—C(31)	128,5(2)	C(4')—C(3')—C(31')	129,9(2)
C(4)—C(3)—C(2)	108,5(1)	C(4')—C(3')—C(2')	108,3(2)
C(31)—C(3)—C(2)	122,7(2)	C(31')—C(3')—C(2')	121,4(2)
C(41)—C(4)—C(3)	131,5(2)	C(41')—C(4')—C(3')	131,5(2)
C(41)—C(4)—C(5)	120,6(1)	C(41')—C(4')—C(5')	121,0(2)
C(3)—C(4)—C(5)	107,8(1)	C(3')—C(4')—C(5')	107,5(1)
O(52)—C(5)—O(51)	100,6(1)	O(52')—C(5')—O(51')	101,2(2)
O(52)—C(5)—N(1)	113,4(1)	O(52')—C(5')—N(1')	113,3(2)
O(51)—C(5)—N(1)	112,7(2)	O(51')—C(5')—N(1')	113,4(2)
O(52)—C(5)—C(4)	113,9(2)	O(52')—C(5')—C(4')	114,1(2)
O(51)—C(5)—C(4)	114,9(1)	O(51')—C(5')—C(4')	113,6(2)
N(1)—C(5)—C(4)	101,8(1)	N(1')—C(5')—C(4')	101,8(2)
N(31)—C(31)—C(3)	177,3(2)	N(31')—C(31')—C(3')	174,5(2)
C(4)—C(41)—C(42)	122,2(1)	C(4')—C(41')—C(42')	123,3(2)
C(4)—C(41)—C(43)	121,2(2)	C(4')—C(41')—C(43')	121,5(1)
C(42)—C(41)—C(43)	116,4(2)	C(42')—C(41')—C(43')	115,1(1)
N(42)—C(42)—C(41)	176,2(2)	N(42')—C(42')—C(41')	178,0(2)
N(43)—C(43)—C(41)	179,1(2)	N(43')—C(43')—C(41')	176,9(2)

сопряжений с делокализованным отрицательным зарядом реализуется между атомами C(31), C(3), C(4), C(41), C(43) и C(12). В этой цепочке только длины связей C(3)—C(4) (1,387(3) Å) и C(4)—C(41) (1,383(2) Å) соответствуют «чистым» полуторным связям (1,39 Å), прочие — несколько длиннее полуторных, но заметно короче ординарных (табл. 1). Короче ординарных и внутрициклическая связь C(2)—C(3) (1,430(2) Å в А и 1,434(2) Å в Б), что либо говорит о частичном сохранении сопряжения по этой связи в молекулах А и Б, либо может быть вызвано притяжением разноименно заряженных частей молекулы. Другая внутрициклическая связь C(4)—C(5) (1,536(2) Å в А и 1,537(2) Å в Б), не включенная в сопряжение благодаря атому C(5), находящемуся в sp^3 -гибридизации, напротив, заметно длиннее стандартной длины связи C_{sp^2} — C_{sp^3} (1,501 Å) и, по-видимому, может являться «слабым звеном» молекулы I.

Все отмеченные выше особенности строения молекулы I сохраняются в ее натриевой соли (рис. 2, табл. 3, 4). Однако, по сравнению с молекулой I, анион II имеет более плоское строение. Средняя плоскость, проведенная через одиннадцать атомов молекулы N(1), C(2), C(3), C(4), C(5), N(21), C(31), N(31), C(41), C(43), N(43), выполняется с точностью $\pm 0,009$ Å. По-видимому, это свидетельствует о более сильной делокализации электронов по связям в заряженной молекуле. На других геометрических параметрах (длины связей и валентные углы) эта дополнительная делокализация не сказывается.

Кроме метоксигрупп, объективно располагающихся вне плоскости молекулы, благодаря sp^3 -гибридизации атома C(5) (валентный угол O(51)—C(5)—O(52), также как и в предыдущем случае, уменьшен по

Длины связей (d) в молекуле соединения II

Связь	d , Å	Связь	d , Å
O(51)—C(5)	1,414(2)	C(3)—C(4)	1,373(3)
O(51)—C(51)	1,428(2)	C(3)—C(31)	1,416(3)
O(52)—C(5)	1,415(2)	C(4)—C(41)	1,396(3)
O(52)—C(52)	1,428(3)	C(4)—C(5)	1,556(2)
N(1)—C(2)	1,311(2)	C(41)—C(42)	1,426(3)
N(1)—C(5)	1,429(2)	C(41)—C(43)	1,425(3)
N(21)—C(2)	1,329(2)	O(1s)—C(1s)	1,415(3)
N(31)—C(31)	1,148(3)	O(2s)—C(2s)	1,432(3)
N(42)—C(42)	1,151(3)	O(3s)—C(3s)	1,404(3)
N(43)—C(43)	1,150(3)	O(4s)—C(4s)	1,423(3)
C(2)—C(3)	1,476(3)		

сравнению с тетраэдрическим и составляет $99,8(1)^\circ$ от плоскости молекулы отклоняются только атомы C(42) (0,078 Å) и N(42) (0,166 Å). Вероятно, это происходит благодаря влиянию противоиона Na^+ , располагающегося в кристалле поблизости от этих атомов.

Таблица 4

Валентные углы (ω) в молекуле соединения II

Угол	ω , град.	Угол	ω , град.
C(5)—O(51)—C(51)	114,8(1)	C(41)—C(4)—C(5)	121,9(2)
C(5)—O(52)—C(52)	114,8(2)	C(4)—C(41)—C(42)	122,9(2)
C(2)—N(1)—C(5)	107,8(2)	C(4)—C(41)—C(43)	121,8(2)
N(1)—C(2)—N(21)	123,9(2)	C(42)—C(41)—C(43)	115,3(2)
N(1)—C(2)—C(3)	113,2(2)	N(42)—C(42)—C(41)	178,0(2)
N(21)—C(2)—C(3)	122,8(2)	N(43)—C(43)—C(41)	176,7(2)
C(4)—C(3)—C(31)	129,8(2)	O(52)—C(5)—O(51)	99,8(1)
C(4)—C(3)—C(2)	106,9(2)	O(52)—C(5)—N(1)	112,9(2)
C(31)—C(3)—C(2)	123,3(2)	O(51)—C(5)—N(1)	113,2(1)
N(31)—C(31)—C(3)	176,7(2)	O(52)—C(5)—C(4)	111,3(1)
C(3)—C(4)—C(41)	132,8(2)	O(51)—C(5)—C(4)	113,0(2)
C(3)—C(4)—C(5)	105,3(2)	N(1)—C(5)—C(4)	106,7(1)

В кристаллах обоих изученных соединений реализуется разветвленная система слабых связей H. В кристаллах дигидропиррола I молекулы A объединяются в центросимметричные димеры за счет межмолекулярных H-связей N(21)—H(21b)...N(24) ($-1 - x, -y, 1 - z$). Молекулы B также объединены в центросимметричные димеры, но за счет связей N(21')—H(21d)...N(31') ($1 - x, 1 - y, 2 - z$) между аминогруппой и цианогруппой при атоме C(3). Центросимметричные димеры объединяются в слой связями H N(21)—H(21a)...O(51'), N(21)—H(21a)...O(52'), N(1)—H(1a)...N(43') (все три связи между исходными молекулами A и B). Далее слои «сшиваются» вдоль оси y в трехмерный структурный мотив связями H N(21')—H(21c)...O(51) ($x, 1 + y, z$) и N(1')—H(1b)...O(51) ($x, 1 + y, z$). Геометрические параметры указанных межмолекулярных связей H представлены в табл. 5.

В кристалле соли II на одну ее молекулу приходится четыре сольватные молекулы метилового спирта, которые также включены в общую систему межмолекулярных связей H. Также, как и молекулы соединения I, молекулы

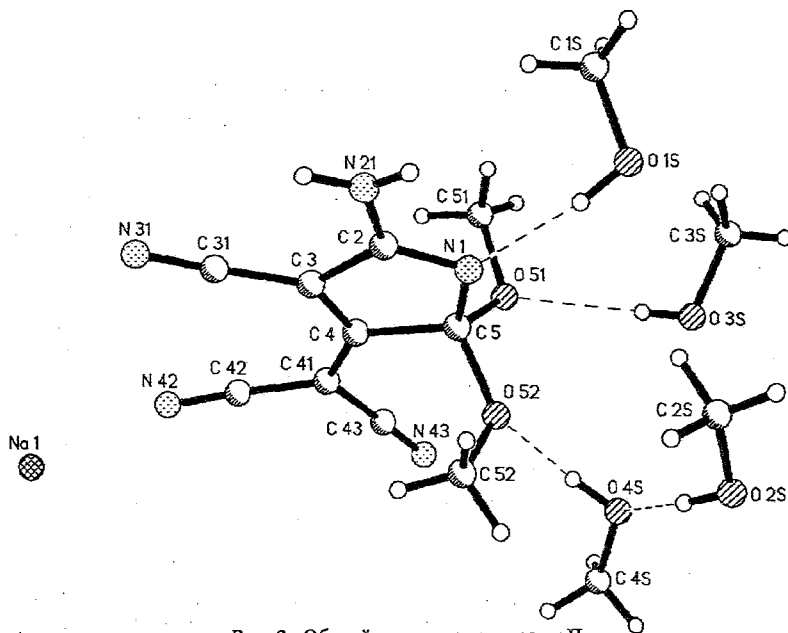


Рис. 2. Общий вид молекулы соли II

его соли II в кристалле образуют centrosимметричные димеры за счет Н-связей $N(21)-H(21b)...N(31)$ ($-x, 3-y, -1-z$) с параметрами $N(21)...N(31)$ 3,030 Å, $H(21b)...N(31)$ 2,80 Å, $N(21)-H(21b)$ 0,86 Å, $N(21)-H(21b)...N(31)$ 161°. Другой атом Н аминогруппы участвует в Н-связи с одной из сольватных молекул: $N(21)-H(21a)...O(1s)$ ($1-x, 2-y, -1-z$) ($N(21)...O(1s)$ 2,795 Å, $H(21a)...O(1s)$ 2,21 Å, $N(21)-H(21a)$ 0,83 Å, $N(21)-H(21a)...O(1s)$ 165°), образуя трехмерный структурный мотив.

Таблица 5

Геометрические параметры связей Н, реализующихся в кристалле соединения I

Связь Н	R (X...Y), Å	d (H...Y), Å	r (X-H), Å	∠XНУ, град.
$N(1)-H(1a)...N(43')$	2,967	2,20	0,81	158
$N(21)-H(21a)...O(51')$	3,152	2,37	0,86	151
$N(21)-H(21a)...O(52')$	3,126	2,35	0,86	150
$N(21)-H(21b)...N(42)$	3,147	2,45	0,80	147
$N(1')-H(1b)...O(51)$	3,152	2,56	0,72	140
$N(21')-H(21d)...N(31')$	3,110	2,30	0,87	156
$N(21')-H(21c)...O(51)$	3,064	2,34	0,85	143

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Рентгеноструктурное исследование соединений I и II. Кристаллы соединения I триклинные, при -120°C $a = 7,095(5)$, $b = 9,886(4)$, $c = 16,290(6)$ Å, $\alpha = 88,19(3)^\circ$, $\beta = 89,27(4)^\circ$, $\gamma = 74,43(4)^\circ$, $V = 1100,0(9)$ Å³, $d_{\text{выч}} = 1,396$ г/см³, $Z = 4$, пространственная группа P-1. $C_{10}H_9N_5O_2$.

Кристаллы соединения II триклинные, при -120°C $a = 8,857(2)$, $b = 9,321(3)$, $c = 12,911(3)$ Å, $\alpha = 73,79(2)^\circ$, $\beta = 75,98(2)^\circ$, $\gamma = 79,14(2)^\circ$, $V = 984,7(5)$ Å³, $d_{\text{выч}} = 1,286$ г/см³, $Z = 2$, пространственная группа P-1. $C_{10}H_8N_5O_2Na$.

Параметры элементарных ячеек и интенсивности 2921 и 3381 независимых отражений (для соединений I и II соответственно) измерены на четырехкрупном автоматическом дифрактометре Siemens P3/PC (λ МоК α , графитовый монохроматор, $\theta/2\theta$ -сканирование до $\theta_{\text{max}} = 27^\circ$ и 25° соот-

Таблица 6

Координаты ($\times 10^4$, для N $\times 10^3$) и изотропные (для неводородных атомов — эквивалентные) температурные параметры ($\times 10^3$) атомов в молекуле соединения I

Атом	x	y	z	U_{iso}
1	2	3	4	5
Молекула А				
O(51)	1120(2)	-3573(1)	6837(1)	26(1)
O(52)	-1686(2)	-3083(1)	7439(1)	28(1)
N(1)	-519(2)	-1160(1)	6960(1)	29(1)
N(21)	-1466(3)	1100(2)	6377(1)	28(1)
N(31)	-3154(2)	229(2)	4327(1)	29(1)
N(42)	-4735(3)	-3052(2)	4443(1)	35(1)
N(43)	-1188(3)	-5967(2)	6251(1)	47(1)
C(2)	-1324(3)	-241(2)	6363(1)	20(1)
C(3)	-2021(3)	-958(2)	5732(1)	17(1)
C(4)	-1727(3)	-2353(2)	5982(1)	18(1)
C(5)	-688(3)	-2560(2)	6816(1)	22(1)
C(31)	-2682(2)	-313(2)	4961(1)	20(1)
C(41)	-2280(3)	-3447(2)	5635(1)	20(1)
C(42)	-3588(3)	-3233(2)	4961(1)	22(1)
C(43)	-1677(3)	-4838(2)	5982(1)	27(1)
C(51)	2496(3)	-3428(2)	6203(1)	35(1)
C(52)	-3655(3)	-2248(2)	7597(1)	37(1)
H(3a)	-78(25)	-965(17)	7381(11)	18(5)
H(21a)	-960(31)	1456(20)	6764(13)	39(7)
H(21b)	-2055(26)	1623(19)	6030(11)	17(6)
H(51a)	3661(33)	-4154(21)	6292(11)	39(5)
H(51b)	1996(32)	-3549(20)	5652(15)	57(6)
H(51c)	2714(33)	-2466(25)	6209(12)	59(6)
H(52a)	-3738(32)	-1335(25)	7852(13)	60(7)
H(52b)	-4470(33)	-2036(21)	7068(14)	60(6)
H(52c)	-4215(34)	-2785(22)	7969(14)	57(7)
Молекула Б				
O(51')	-1010(2)	2264(1)	8121(1)	26(1)
O(52')	1782(2)	1601(1)	7515(1)	25(1)
N(1')	896(2)	3902(2)	8031(1)	25(1)
N(21')	2173(3)	5568(2)	8632(1)	33(1)
N(31')	4521(3)	3590(2)	10445(1)	34(1)
N(42')	3276(2)	97(2)	10836(1)	35(1)
N(43')	1485(2)	-1314(2)	8561(1)	34(1)
C(2')	1838(3)	4334(2)	8628(1)	20(1)
C(3')	2416(3)	3242(2)	9244(1)	19(1)
C(4')	1861(2)	2067(2)	8986(1)	17(1)
C(5')	863(4)	2452(2)	8146(1)	20(1)
C(31')	3549(3)	3388(2)	9925(1)	21(1)
C(41')	2052(3)	764(2)	9352(1)	19(1)
C(42')	2751(3)	407(2)	10170(1)	23(1)
C(43')	1692(3)	-367(2)	8909(1)	24(1)
C(51')	-2408(4)	3098(3)	8675(2)	43(1)
C(52')	3797(4)	1583(2)	7367(1)	33(1)
H(1b)	544(24)	4325(17)	7665(11)	5(5)
H(21c)	1753(28)	6170(21)	8248(12)	37(6)

1	2	3	4	5
H(21d)	2894(30)	5755(17)	9016(12)	28(6)
H(51d)	-1968(39)	2918(25)	9265(18)	87(9)
H(51e)	-2613(34)	4110(27)	8540(13)	66(7)
H(51f)	-3650(43)	2750(24)	8684(14)	73(9)
H(52d)	3943(30)	2545(23)	7212(11)	49(6)
H(52e)	4247(25)	969(17)	6908(11)	30(5)

Таблица 7

Координаты ($\times 10^4$, для атомов Н $\times 10^3$) и изотропные (для неводородных атомов — эквивалентные) температурные параметры ($\times 10^3$) атомов в молекуле соединения II

Атом	x	y	z	U _{iso}
Na(1)	-6247(1)	14155(1)	-702(1)	24(1)
O(51)	658(2)	7970(1)	-2713(1)	20(1)
O(52)	1565(2)	8862(1)	-1640(1)	21(1)
N(1)	2167(2)	9997(2)	-3553(1)	19(1)
N(21)	2365(2)	12334(2)	-4805(1)	20(1)
N(31)	-1502(2)	14456(2)	-3946(2)	33(1)
N(42)	-4141(2)	12364(2)	-1464(2)	33(1)
N(43)	-2124(2)	7780(2)	-327(1)	29(1)
C(2)	1589(2)	11387(2)	-3961(1)	16(1)
C(3)	-23(2)	11809(2)	-3389(1)	18(1)
C(31)	-874(2)	13260(2)	-3675(2)	21(1)
C(4)	-442(2)	10571(2)	-2565(1)	16(1)
C(41)	-1791(2)	10316(2)	-1750(2)	19(1)
C(42)	-3091(2)	11456(2)	-1610(2)	22(1)
C(43)	-1939(2)	8895(2)	-977(2)	20(1)
C(5)	1017(2)	9350(2)	-2640(1)	18(1)
C(51)	-11(3)	807(2)	-3636(2)	26(1)
C(52)	2077(3)	10008(3)	-1320(2)	31(1)
O(1s)	4362(2)	8277(2)	-4735(1)	30(1)
O(2s)	5061(2)	6417(2)	-931(1)	31(1)
O(3s)	2893(2)	5272(2)	-2336(1)	35(1)
O(4s)	1854(2)	6145(2)	-49(1)	32(1)
C(1s)	3956(3)	8718(3)	-5785(2)	38(1)
C(2s)	5567(4)	7292(3)	-2026(2)	44(1)
C(3s)	3258(5)	4733(4)	-3292(3)	64(1)
C(4s)	937(4)	5828(3)	1039(2)	40(1)
H(21a)	331(3)	1210(3)	-503(2)	32(7)
H(21b)	197(3)	1326(3)	-502(2)	20(5)
H(51a)	-16(3)	709(3)	-362(2)	30(6)
H(51b)	69(4)	846(3)	-431(3)	54(8)
H(51c)	-104(3)	870(3)	-359(2)	44(7)
H(52a)	253(3)	948(3)	-66(2)	40(7)
H(52b)	127(4)	1078(3)	-115(2)	55(8)
H(52c)	283(3)	1049(3)	-190(2)	38(7)
H(1so)	374(4)	880(3)	-430(2)	54(8)
H(2so)	418(4)	669(3)	-71(3)	52(10)
H(3so)	239(4)	607(4)	-245(2)	51(9)
H(4so)	134(4)	684(4)	-48(3)	63(9)
H(1sa)	335(5)	968(5)	-588(3)	103(14)

1	2	3	4	5
H _(2sb)	343(5)	806(5)	-590(3)	99(14)
H _(1sc)	482(5)	874(4)	-634(3)	84(11)
H _(2sa)	483(4)	748(4)	-254(3)	84(11)
H _(2sb)	646(5)	683(4)	-232(3)	89(13)
H _(2sc)	560(4)	839(5)	-200(3)	91(12)
H _(3sa)	377(5)	375(5)	-316(4)	107(14)
H _(3sb)	379(5)	551(5)	-395(4)	114(15)
H _(3sc)	247(6)	463(6)	-361(4)	131(19)
H _(4sa)	18(6)	526(6)	109(4)	130(18)
H _(4sb)	57(4)	675(4)	127(3)	83(11)
H _(4sc)	150(5)	533(4)	157(3)	88(12)

ветственно). Структуры расшифрованы прямым методом, выявившим все неводородные атомы, и уточнены полноматричным МНК в анизотропном приближении для неводородных атомов. Атомы водорода выявлены Фурье-синтезом и уточнены изотропно. Окончательные значения факторов расходимости $R_1 = 0,025$ по 1672 независимым отражениям с $I > 2\sigma(I)$, $WR_2 = 0,089$ по 1757 независимым отражениям для I и $R_1 = 0,040$ по 2715 независимым отражениям с $I > 2\sigma(I)$, $WR_2 = 0,102$ по 2978 независимым отражениям для II. Все расчеты проведены по программе SHELXL PLUS [11] (версия PC). Координаты и изотропные эквивалентные тепловые параметры неводородных атомов (для H изотропные) приведены в табл. 6 и 7 соответственно.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 97-03-33783а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Швехгеймер Г. А. // ХГС. — 1994. — № 10. — С. 1299.
2. Насакин О. Е., Шевердов В. П., Тафеев В. А. // ДАН. — 1994. — Т. 334, № 2. — С. 187.
3. Чехлов А. Н., Левковский А. В., Соколов В. Б., Аксенов А. Ю., Мартынов И. В. // ДАН. — 1994. — Т. 334, № 2. — С. 200.
4. Ollis W. D., Ramsolen Ch. A. // Adv. Heterocycl. Chem. — 1976. — Vol. 19. — P. 516.
5. Яшуцкий В. Г. // ХГС. — 1981. — № 3. — С. 291.
6. Boyer Y. H., Morgan T., Pillai T. P. // J. Chem. Soc. Chem. Commun. — 1983. — N 23. — P. 1388.
7. Avalos M., Babiano R., Bautista I., Fernandez J. I., Jimenez J. L., Palacios J. C., Plumet J., Rebolledo F. // Carbohydr. Res. — 1989. — Vol. 186. — P. C7.
8. Яшуцкий В. Г., Холодов Л. Е. // Успехи химии. — 1980. — Т. 49. — С. 54.
9. Насакин О. Е., Павлов В. В., Лыщиков А. Н., Лукин П. М., Хрусталева В. Н., Стручков Ю. Т., Антипин М. Ю. // ХГС. — 1996. — № 4. — С. 458.
10. Allen F. H., Kennard O., Watson D. G., Brammer L., Orpen A. G., Taylor R. // J. Chem. Soc. Perkin Trans. II. — 1987. — N 1. — P. S1.
11. Robinson W., Sheldrick G. M. // Crystallographic Computing Techniques and Technologies/ Eds. N. W. Isaacs, M. R. Taylor. — Oxford: Univ. Press, 1988. — P. 366.