

И. В. Украинец, С. Г. Таран, Л. В. Сидоренко,
О. В. Горохова, А. В. Туров, А. А. Огиренко

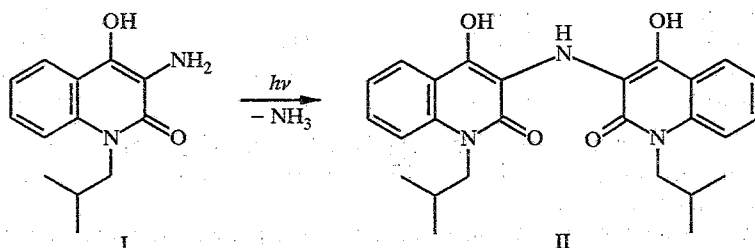
4-ОКСИХИНОЛОНЫ-2

34*. О СТРОЕНИИ ПРОДУКТОВ ФОТОКОНДЕНСАЦИИ 3-АМИНО-1R-2-ОКСО-4-ГИДРОСИХИНОЛИНОВ

3-Амино-2-оксо-4-гидроксихинолины под воздействием света количественно превращаются в ди (1R-2-оксо-4-гидроксихинолин-3-ил) амины. Проведено рентгеноструктурное исследование одного из таких соединений.

При изучении альтернативных путей синтеза 3-ациламино-2-оксо-4-гидроксихинолинов [2] нами отмечалась неустойчивость промежуточных 3-аминохинолинов. Как и следовало ожидать, особенно быстро эти соединения разлагаются в растворе, что необходимо учитывать при их кристаллизации. Кроме того, хроматографический контроль чистоты 3-амино-2-оксо-4-гидроксихинолинов показал, что даже выделенные в чистом виде под воздействием света они уже через несколько часов полностью превращаются в новые соединения. Исходя из этого целью настоящей работы является изучение направленности данной реакции путем установления строения образующихся при этом веществ. Исследование проведено на примере 3-амино-1-изобутил-2-оксо-4-гидроксихинолина (I). Отметим однако, что аналогичное химическое преобразование претерпевают 3-аминохинолины и с другими 1-N-алкильными заместителями, а также 1H-производное.

По данным хромато-масс-спектрометрического анализа, продукт превращения 3-аминохинолина I является индивидуальным соединением с молекулярной массой 447 а. е. м. С другой стороны, характер спектра ПМР полученного вещества указывает на то, что его молекула симметрична. Совокупность этих данных позволила предположить, что образующееся соединение II может быть охарактеризовано как ди(1-изобутил-2-оксо-4-гидроксихинолин-3-ил)амин. Окончательно вопрос о строении соединения II был решен нами с помощью рентгеноструктурного анализа.



Как видно из данных, приведенных на рисунке и в табл. 1, 2, базис структуры диамин II составляют две практически идентичные молекулы. Наиболее заметное различие между ними состоит в том, что во второй молекуле связь C(50)—C(51) в изобутильном фрагменте несколько укорочена по сравнению с другими изобутильными фрагментами, что позволяет предположить, что эти два атома в структуре могут быть разупорядоченными, хотя экспериментально это разупорядочение выявить не удалось.

* Сообщение 33 см. [1].

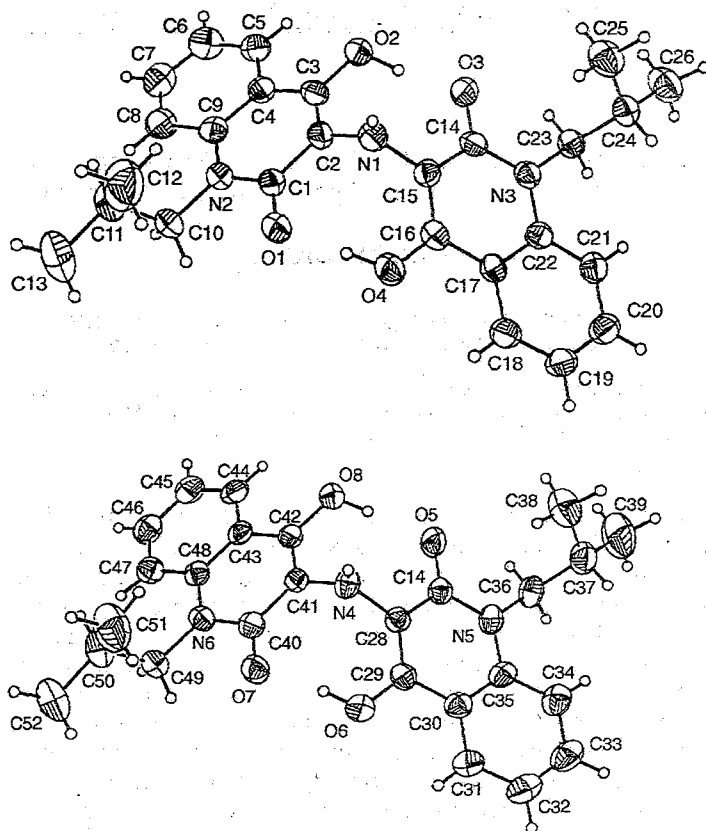


Схема нумерации и эллипсоиды тепловых колебаний атомов двух независимых молекул диамина II

Обе молекулы в структуре диамина II имеют собственную симметрию, близкую к C_2 . В них образуются сильные внутримолекулярные водородные связи $O-H\cdots O$, фиксирующие наблюдаемую конформацию молекул и препятствующие свободному вращению бициклических фрагментов вокруг связей $N-C$. Водородные связи характеризуются заметным удлинением связей $O-H$ (табл. 1) и укорочением ван-дер-ваальсовых расстояний $H\cdots O$ и $O\cdots O$. В данной структуре эти расстояния таковы:

$H(4)\cdots O(1)$	1,60(4)	$O(4)\cdots O(1)$	2,584(3)
$H(2)\cdots O(3)$	1,53(4)	$O(2)\cdots O(3)$	2,554(3)
$H(6)\cdots O(7)$	1,62(4)	$O(6)\cdots O(7)$	2,564(3)
$H(8)\cdots O(5)$	1,64(4)	$O(8)\cdots O(5)$	2,594(3)

Кроме того, значения углов $O-H\cdots O$ (для $H(2)$, $H(4)$, $H(6)$ и $H(8)$ соответственно 175, 167, 175 и 171°) также являются типичными для водородной связи.

В обеих базисных молекулах содержатся фрагменты конденсированных ароматических систем. В первой молекуле фрагмент, состоящий из атомов $N(2)$ и $C(1)-C(9)$, является плоским с точностью 0,04 Å; фрагмент $N(3)$, $C(14)-C(22)$ — с точностью 0,013 Å. Плоскости этих фрагментов образуют двугранный угол 44,9°. Отметим, что атом $N(1)$ отклоняется на 0,296 и 0,183 Å от первой и второй плоскости соответственно. Для второй молекулы указанные цифры составляют соответственно 0,06 и 0,02 Å, 42,6°, 0,44 и 0,11 Å.

Можно также отметить, что в обеих молекулах окружение центральных атомов азота заметно искажено по сравнению с плоско-тригональным, характерным для атомов в состоянии sp^2 -гибридизации: в то время как углы

Длины связей (Å) в молекуле диамина II

Связь	<i>l</i>	Связь	<i>l</i>
O(1)—C(1)	1,249(4)	O(5)—C(27)	1,267(4)
O(2)—C(3)	1,347(4)	O(6)—C(29)	1,331(4)
O(2)—H(2)	1,030(4)	O(6)—H(6)	0,940(3)
O(3)—C(14)	1,261(4)	O(7)—C(40)	1,259(4)
O(4)—C(16)	1,341(4)	O(8)—C(42)	1,349(4)
O(4)—H(4)	1,000(3)	O(8)—H(8)	0,960(3)
N(1)—C(15)	1,430(4)	N(4)—C(41)	1,423(4)
N(1)—C(2)	1,432(4)	N(4)—C(28)	1,440(4)
N(1)—H(1)	0,910(3)	N(4)—H(4A)	0,890(3)
N(2)—C(1)	1,379(4)	N(5)—C(27)	1,381(4)
N(2)—C(9)	1,398(4)	N(5)—C(35)	1,405(4)
N(2)—C(10)	1,482(4)	N(5)—C(36)	1,480(4)
N(3)—C(14)	1,366(4)	N(6)—C(40)	1,390(4)
N(3)—C(22)	1,399(4)	N(6)—C(48)	1,394(4)
N(3)—C(23)	1,489(4)	N(6)—C(49)	1,483(4)
C(1)—C(2)	1,451(5)	C(27)—C(28)	1,423(4)
C(2)—C(3)	1,360(5)	C(28)—C(29)	1,331(4)
C(3)—C(4)	1,433(5)	C(29)—C(30)	1,441(4)
C(4)—C(5)	1,401(5)	C(30)—C(35)	1,393(5)
C(4)—C(9)	1,407(5)	C(30)—C(31)	1,410(5)
C(5)—C(6)	1,361(5)	C(31)—C(32)	1,374(5)
C(6)—C(7)	1,383(6)	C(32)—C(33)	1,364(6)
C(7)—C(8)	1,388(6)	C(33)—C(34)	1,381(6)
C(8)—C(9)	1,405(5)	C(34)—C(35)	1,408(5)
C(10)—C(11)	1,525(6)	C(36)—C(37)	1,529(6)
C(11)—C(12)	1,501(8)	C(37)—C(39)	1,512(7)
C(11)—C(13)	1,543(7)	C(37)—C(38)	1,528(7)
C(14)—C(15)	1,444(4)	C(40)—C(41)	1,437(4)
C(15)—C(16)	1,363(4)	C(41)—C(42)	1,363(4)
C(16)—C(17)	1,435(4)	C(42)—C(43)	1,435(4)
C(17)—C(18)	1,406(5)	C(43)—C(48)	1,400(4)
C(17)—C(22)	1,409(4)	C(43)—C(44)	1,409(5)
C(18)—C(19)	1,370(5)	C(44)—C(45)	1,373(5)
C(19)—C(20)	1,386(5)	C(45)—C(46)	1,390(5)
C(20)—C(21)	1,362(5)	C(46)—C(47)	1,379(5)
C(21)—C(22)	1,399(5)	C(47)—C(48)	1,405(5)
C(23)—C(24)	1,534(5)	C(49)—C(50)	1,511(5)
C(24)—C(26)	1,513(5)	C(50)—C(51)	1,477(6)
C(24)—C(25)	1,520(6)	C(50)—C(52)	1,528(6)

C—N—C близки к 120° , углы C—N—H лежат в пределах $108...111^\circ$ (см. табл. 2), что более характерно для атомов в состоянии sp^3 -гибридизации. Такое искажение валентных углов может быть обусловлено влиянием неподеленной электронной пары.

Подводя итог проведенному исследованию, считаем целесообразным дать ряд рекомендаций, касающихся получения 3-амино-1R-2-оксо-4-гидрокси-хинолинов. Учитывая высокую светочувствительность указанных соединений, последнюю стадию их синтеза — гидразинолиз 1R-2-оксо-3-(1-пириди-нио)хинолин-4-олатов [2] — необходимо проводить в защищенном от света реакционном сосуде. Аналогичные предосторожности следует соблюдать при

Валентные углы в структуре диамин II

Угол	ω	Угол	ω
1	2	3	4
C(3)—O(2)—H(2)	109,0(2)	C(29)—O(6)—H(6)	112,0(2)
C(16)—O(4)—H(4)	110,0(2)	C(42)—O(8)—H(8)	114,0(2)
C(15)—N(1)—C(2)	119,4(3)	C(41)—N(4)—C(28)	120,1(3)
C(15)—N(1)—H(1)	110,0(2)	C(41)—N(4)—H(4A)	110,0(2)
C(2)—N(1)—H(1)	111,0(2)	C(28)—N(4)—H(4A)	108,0(2)
C(1)—N(2)—C(9)	122,0(3)	C(27)—N(5)—C(35)	120,9(3)
C(1)—N(2)—C(10)	117,6(3)	C(27)—N(5)—C(36)	118,4(3)
C(9)—N(2)—C(10)	120,4(3)	C(35)—N(5)—C(36)	120,7(3)
C(14)—N(3)—C(22)	121,7(3)	C(40)—N(6)—C(48)	121,2(3)
C(14)—N(3)—C(23)	117,6(3)	C(40)—N(6)—C(49)	117,4(3)
C(22)—N(3)—C(23)	120,7(3)	C(48)—N(6)—C(49)	121,5(3)
O(1)—C(1)—N(2)	120,2(3)	O(5)—C(27)—N(5)	118,7(3)
O(1)—C(1)—C(2)	121,8(3)	O(5)—C(27)—C(28)	122,4(3)
N(2)—C(1)—C(2)	118,0(3)	N(5)—C(27)—C(28)	118,9(3)
C(3)—C(2)—N(1)	122,7(3)	C(29)—C(28)—C(27)	121,4(3)
C(3)—C(2)—C(1)	120,7(3)	C(29)—C(28)—N(2)	121,0(3)
N(1)—C(2)—C(1)	116,5(3)	C(27)—C(28)—N(4)	117,4(3)
O(2)—C(3)—C(2)	122,7(3)	O(6)—C(29)—C(28)	124,1(3)
O(2)—C(3)—C(4)	116,8(3)	O(6)—C(29)—C(30)	116,6(3)
C(2)—C(3)—C(4)	120,5(3)	C(28)—C(29)—C(30)	119,2(3)
C(5)—C(4)—C(9)	119,3(3)	C(35)—C(30)—C(31)	119,6(3)
C(5)—C(4)—C(3)	121,8(3)	C(35)—C(30)—C(29)	119,5(3)
C(9)—C(4)—C(3)	118,8(3)	C(31)—C(30)—C(29)	120,7(3)
C(6)—C(5)—C(4)	121,6(4)	C(32)—C(31)—C(30)	120,2(4)
C(5)—C(6)—C(7)	119,1(4)	C(33)—C(32)—C(31)	119,9(4)
C(6)—C(7)—C(8)	121,5(4)	C(32)—C(33)—C(34)	121,8(4)
C(7)—C(8)—C(9)	119,5(4)	C(33)—C(34)—C(35)	119,2(4)
N(2)—C(9)—C(8)	121,4(3)	C(30)—C(35)—N(5)	119,6(3)
N(2)—C(9)—C(4)	119,8(3)	C(30)—C(35)—C(34)	119,3(3)
C(8)—C(9)—C(4)	118,8(3)	N(5)—C(35)—C(34)	121,2(3)
N(2)—C(10)—C(11)	114,0(3)	N(5)—C(36)—C(37)	115,2(3)
C(12)—C(11)—C(10)	113,2(4)	C(39)—C(37)—C(36)	108,9(4)
C(12)—C(11)—C(13)	111,2(5)	C(39)—C(37)—C(38)	110,5(4)
C(10)—C(11)—C(13)	107,8(4)	C(36)—C(37)—C(38)	113,2(3)
O(3)—C(14)—N(3)	120,2(3)	O(7)—C(40)—N(6)	119,3(3)
O(3)—C(14)—C(15)	120,8(3)	O(7)—C(40)—C(41)	122,4(3)
N(3)—C(14)—C(15)	118,9(3)	N(6)—C(40)—C(41)	118,3(3)
C(16)—C(15)—N(1)	121,2(3)	C(42)—C(41)—N(4)	122,2(3)
C(16)—C(15)—C(14)	120,7(3)	C(42)—C(41)—C(40)	121,1(3)
N(1)—C(15)—C(14)	118,0(3)	N(4)—C(41)—C(40)	116,6(3)
O(4)—C(16)—C(15)	123,0(3)	O(8)—C(42)—C(41)	122,6(3)
O(4)—C(16)—C(17)	117,3(3)	O(8)—C(42)—C(43)	117,3(3)

1	2	3	4
C(15)—C(16)—C(17)	119,7(3)	C(41)—C(42)—C(43)	120,0(3)
C(18)—C(17)—C(22)	119,2(3)	C(48)—C(43)—C(44)	119,5(3)
C(18)—C(17)—C(16)	121,5(3)	C(48)—C(43)—C(42)	118,9(3)
C(22)—C(17)—C(16)	119,4(3)	C(44)—C(43)—C(42)	121,6(3)
C(19)—C(18)—C(17)	120,9(4)	C(45)—C(44)—C(43)	121,3(4)
C(18)—C(19)—C(20)	119,2(4)	C(44)—C(45)—C(46)	118,7(4)
C(21)—C(20)—C(19)	121,3(4)	C(47)—C(46)—C(45)	121,6(4)
C(20)—C(21)—C(22)	120,7(3)	C(46)—C(47)—C(48)	120,1(4)
N(3)—C(22)—C(21)	121,9(3)	N(6)—C(48)—C(43)	120,5(3)
N(3)—C(22)—C(17)	119,5(3)	N(6)—C(48)—C(47)	120,6(3)
C(21)—C(22)—C(17)	118,6(3)	C(43)—C(48)—C(47)	118,9(3)
N(3)—C(23)—C(24)	114,5(3)	N(6)—C(49)—C(50)	114,1(3)
C(26)—C(24)—C(25)	110,6(4)	C(51)—C(50)—C(49)	114,7(4)
C(26)—C(24)—C(23)	108,2(3)	C(51)—C(50)—C(52)	112,5(4)
C(25)—C(24)—C(23)	112,5(3)	C(49)—C(50)—C(52)	107,5(4)

кристаллизации, сушке и хранении полученных веществ. По нашим данным, 3-амино-2-оксо-4-гидроксихинолины, полученные с учетом указанных требований, могут храниться без заметных химических изменений в течение 1...1,5 месяцев.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Спектр ПМР диамина II записан на приборе Bruker WP-100 SY, внутренний стандарт ТМС. Масс-спектр зарегистрирован на квадрупольном спектрометре Finnigan MAT Incos 50 в режиме полного сканирования в диапазоне 33...700 m/z , ионизация электронным ударом 70 эВ, прямой ввод, скорость нагрева $\sim 5^\circ/\text{с}$.

Ди(1-изобутил-2-оксо-4-гидроксихинолин-3-ил)амин (II). Оставляют в освещенном месте 2,32 г (0,01 моль) свежеполученного 3-амино-1-изобутил-2-оксо-4-гидроксихинолина I [2] при комнатной температуре на 4...5 ч, после чего обрабатывают 20 мл 2% водного раствора АсОН, фильтруют, промывают водой и высушивают. Получают 2,23 г (количеств.) диамина II. $T_{\text{пл}}$ 183...184 $^\circ\text{C}$ (диэтиловый эфир). R_f 0,65 (Silufol UV-254, гексан—эфир—пропанол-2, 6 : 6 : 1). Для сравнения: исходный амин I в той же системе имеет значение R_f 0,38. Спектр ПМР (ДМСО- D_6): 13,47 (2H, с, OH); 8,10...7,25 (8H, м, Наром); 5,61 (1H, с, NH); 4,22 (4H, д, NCH_2); 2,12 (2H, м, $\text{CH}(\text{Me})_2$); 0,89 м. д. (12H, д, CH_3). Масс-спектр, m/z (относительная интенсивность, %): 447 (100) $[\text{M}]^+$, 187 (40), 161 (94), 146 (33), 120 (37), 77 (29), 57 (43), 41 (70). Найдено, %: С 69,81; Н 6,50; N 9,40. $\text{C}_{26}\text{H}_{29}\text{N}_3\text{O}_4$. Вычислено, %: С 69,78; Н 6,53; N 9,39.

Рентгеноструктурное исследование выполнено на автоматическом четырехкружном дифрактометре Синтекс Р21 в монохроматизированном молибденовом излучении ($\lambda = 0,71073\text{\AA}$). Параметры элементарной ячейки уточнены по 24 отражениям в интервале углов $28 < 2\theta < 30^\circ$. Интенсивности 3791 отражения для определения структуры измерены методом $\theta/2\theta$ -сканирования со скоростью от 3 до 30 $^\circ/\text{мин}$ в интервале $5 < 2\theta < 55^\circ$, при вычислении структурных факторов учтены поправки Лорентца и поляризационная, поправка на поглощение не вводилась. Структура расшифрована прямым методом и уточнена методом наименьших квадратов (МНК) по 3775 независимым неэквивалентным отражениям с $I(hkl) > 4\sigma I(hkl)$ в полноматричном анизотропном приближении для неводородных атомов структуры (атомы водорода найдены разностным синтезом и уточнены в изотропном приближении). В процессе уточнения по МНК учтена поправка на экстинкцию излучения. Окончательное значение R-фактора 4,18% по 3775 наблюдаемым отражениям (4,43% по всему массиву отражений). Координаты атомов приведены в табл. 3.

Таблица 3

Координаты атомов ($\text{\AA} \times 10^4$) и эквивалентные тепловые поправки ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) в структуре диамина II (для атомов водорода приведены изотропные тепловые поправки)

Атом	x/a	y/b	z/c	$U_{\text{экв}}$
1	2	3	4	5
O(2)	3727(2)	9280(2)	4609(2)	60(1)
O(3)	4339(2)	8644(2)	6035(1)	61(1)
O(4)	1751(2)	11183(2)	7388(2)	57(1)
N(1)	3261(3)	10592(2)	5953(2)	49(1)
N(2)	604(3)	11319(2)	4680(2)	51(1)
N(3)	3729(2)	8397(2)	7397(2)	48(1)
C(1)	1323(3)	11240(2)	5346(2)	50(1)
C(2)	2442(3)	10551(2)	5308(2)	46(1)
C(3)	2723(3)	9955(2)	4657(2)	50(1)
C(4)	1963(3)	10044(2)	3971(2)	50(1)
C(5)	2249(4)	9463(3)	3281(2)	60(1)
C(6)	1574(4)	9596(3)	2607(3)	74(1)
C(7)	572(4)	10315(3)	2610(3)	72(1)
C(8)	222(4)	10887(3)	3289(2)	64(1)
C(9)	922(3)	10757(3)	3984(2)	50(1)
C(10)	-531(4)	12031(3)	4721(3)	66(1)
C(11)	-356(4)	13024(3)	4247(3)	81(1)
C(12)	654(7)	13584(4)	4550(4)	118(2)
C(13)	-1631(7)	13652(5)	4303(5)	139(3)
C(14)	3748(3)	8970(2)	6681(2)	46(1)
C(15)	3096(3)	9956(2)	6678(2)	45(1)
C(16)	2409(3)	10289(2)	7367(2)	46(1)
C(17)	2391(3)	9677(2)	8114(2)	45(1)
C(18)	1705(3)	9997(3)	8839(2)	56(1)
C(19)	1694(4)	9405(3)	9549(2)	63(1)
C(20)	2359(4)	8474(3)	9546(2)	60(1)
C(21)	3042(3)	8145(3)	8856(2)	52(1)
C(22)	3070(3)	8731(3)	8122(2)	45(1)
C(23)	4413(3)	7386(2)	7379(2)	50(1)
C(24)	5734(3)	7333(3)	7681(2)	55(1)
C(25)	6585(4)	8019(3)	7173(3)	75(1)
C(26)	6284(5)	6258(3)	7655(4)	84(2)
O(5)	2645(2)	5034(2)	10652(1)	61(1)
O(6)	1474(2)	6398(2)	8073(2)	60(1)
O(7)	2921(2)	4974(2)	7436(1)	60(1)
O(8)	4377(2)	3783(2)	10000(1)	55(1)
N(4)	3401(3)	5428(2)	9004(2)	46(1)
N(5)	809(3)	6012(2)	10595(2)	50(1)
N(6)	3802(2)	3368(2)	7560(2)	46(1)
C(27)	1898(3)	5563(3)	10214(2)	49(1)
C(28)	2161(3)	5743(2)	9352(2)	42(1)
C(29)	1313(3)	6258(2)	8887(2)	45(1)
C(30)	184(3)	6732(3)	9287(2)	50(1)
C(31)	-654(4)	7360(3)	8833(3)	64(1)
C(32)	-1654(4)	7894(3)	9232(3)	74(1)
C(33)	-1850(4)	7803(3)	10069(3)	70(1)
C(34)	-1073(4)	7174(3)	10536(3)	61(1)
C(35)	-28(3)	6635(2)	10141(2)	48(1)

Продолжение таблицы 3

1	2	3	4	5
C(36)	531(4)	5800(3)	11488(2)	58(1)
C(37)	890(4)	6591(3)	12047(2)	67(1)
C(38)	2287(5)	6759(4)	11946(3)	89(2)
C(39)	499(7)	6293(5)	12932(3)	120(2)
C(40)	3436(3)	4295(3)	7884(2)	48(1)
C(41)	3671(3)	4442(2)	8722(2)	42(1)
C(42)	4198(3)	3684(3)	9200(2)	44(1)
C(43)	4566(3)	2729(2)	8860(2)	45(1)
C(44)	5077(3)	1919(3)	9342(2)	57(1)
C(45)	5402(4)	1001(3)	9017(3)	62(1)
C(46)	5198(4)	874(3)	8200(3)	63(1)
C(47)	4691(3)	1648(3)	7711(2)	54(1)
C(48)	4357(3)	2590(2)	8038(2)	45(1)
C(49)	3562(4)	3237(3)	6691(2)	55(1)
C(50)	4699(4)	3330(3)	6088(2)	76(1)
C(51)	5338(5)	4252(4)	6141(3)	109(2)
C(52)	4290(6)	3204(5)	5227(3)	101(2)
H(2)	3930(32)	9031(25)	5195(22)	72
H(4)	1586(32)	11438(25)	6814(22)	68
H(1)	4075(32)	10538(24)	5748(20)	59
H(5)	2929(34)	8950(26)	3324(21)	72
H(6A)	1790(37)	9259(29)	2111(24)	89
H(7)	95(37)	10500(28)	2156(24)	86
H(8A)	-450(35)	11399(27)	3261(22)	77
H(10A)	-693(33)	12181(26)	5320(23)	79
H(10B)	-1213(36)	11686(27)	4479(22)	79
H(11)	54(38)	13000(29)	3614(25)	97
H(12A)	701(49)	14236(41)	4216(32)	142
H(12B)	1505(51)	13175(40)	4495(32)	142
H(12C)	326(52)	13742(39)	5142(32)	142
H(13A)	-2268(60)	13304(47)	4077(38)	167
H(13B)	-1424(56)	14310(45)	3987(36)	167
H(13C)	-1857(57)	13733(44)	4957(35)	167
H(18)	1323(33)	10648(26)	8809(21)	67
H(19)	1213(34)	9628(26)	10030(22)	75
H(20)	2351(33)	8057(26)	10051(22)	71
H(21)	3504(31)	7494(25)	8882(19)	62
H(23A)	4462(30)	7216(23)	6781(21)	60
H(23B)	3872(31)	6960(24)	7728(20)	60
H(24)	5691(30)	7540(24)	8296(21)	66
H(25A)	6210(37)	8739(30)	7193(23)	90
H(25B)	6685(37)	7770(29)	6588(25)	90
H(25C)	7421(39)	7991(29)	7395(23)	90
H(26A)	5739(40)	5812(31)	7973(26)	101
H(26B)	7094(43)	6172(31)	7888(25)	101
H(26C)	6444(40)	6050(31)	7044(26)	101
H(6)	2041(34)	5895(26)	7836(21)	71
H(8)	3801(32)	4276(25)	10261(20)	66
H(4A)	3946(31)	5557(24)	9358(20)	55
H(31)	-508(34)	7407(27)	8247(23)	76
H(32)	-2200(37)	8334(29)	8895(23)	89
H(33)	-2545(37)	8159(27)	10392(23)	84

1	2	3	4	5
H ₍₃₄₎	-1185(33)	7131(26)	11124(22)	73
H _(36A)	945(32)	5120(27)	11623(21)	70
H _(36B)	-337(35)	5703(25)	11569(21)	70
H ₍₃₇₎	519(34)	7265(28)	11869(22)	81
H _(38A)	2478(41)	6982(31)	11313(27)	107
H _(38B)	2743(43)	6125(34)	12012(28)	107
H _(38C)	2512(39)	7316(33)	12309(26)	107
H _(39A)	-321(53)	6124(43)	12974(34)	144
H _(39B)	693(52)	6783(40)	13307(33)	144
H _(39C)	972(51)	5568(40)	13042(32)	144
H ₍₄₄₎	5184(32)	2031(25)	9897(21)	69
H ₍₄₅₎	5745(34)	445(27)	9386(21)	75
H ₍₄₆₎	5440(34)	242(27)	7952(22)	76
H ₍₄₇₎	4563(31)	1525(24)	7122(21)	65
H _(49A)	2887(33)	3737(25)	6552(20)	66
H _(49B)	3231(32)	2566(26)	6666(20)	66
H ₍₅₀₎	5362(25)	2711(23)	6220(5)	91
H _(51A)	6163(19)	4242(4)	5697(10)	131
H _(51B)	5632(8)	4296(4)	6765(14)	131
H _(51C)	4693(14)	4904(15)	6001(4)	131
H _(52A)	3853(46)	2593(37)	5162(28)	121
H _(52B)	4899(47)	3344(36)	4829(30)	121
H _(52C)	3735(45)	3862(35)	5069(28)	121

Основные кристаллографические данные о структуре диамина II: кристаллическая система триклинная; при 20 °C $a = 10,729(2)$, $b = 13,434(3)$, $c = 16,304(4)$ Å, $\alpha = 87,06(2)^\circ$, $\beta = 85,20(2)^\circ$, $\gamma = 85,10(2)^\circ$, $V = 2331,0(8)$ Å³, $d_{\text{выч}} = 1,275$ г/см³, $F(000) = 952$, коэффициент поглощения μ (MoK α) 0,087 мм⁻¹, пространственная группа P-1, $Z = 4$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Українець І. В., Таран С. Г., Горохова О. В., Кодолова О. Л., Туров А. В. // ХГС. — 1997. — № 7. — С. 928.
2. Українець І. В., Таран С. Г., Сидоренко Л. В., Горохова О. В., Огиренко А. А., Туров А. А., Филимонова Н. І. // ХГС. — 1996. — № 8. — С. 1113.

Українська фармацевтична академія,
Харьков 310002

Поступило в редакцію 03.03.97