

И. В. Украинец, Н. Л. Березнякова, В. А. Паршиков, А. В. Туров^а

4-ГИДРОКСИХИНОЛОНЫ-2

129*. СИНТЕЗ И СТРОЕНИЕ БРОМИДА

2-БРОММЕТИЛ-4-КАРБОКСИ-5-МЕТИЛ-1,2-ДИГИДРООКСАЗОЛО[3,2-*a*]-ХИНОЛИНИЯ

Бромирование N-аллил-4-метил-2-оксо-1,2-дигидрохинолин-3-карбоновой кислоты подобно 4-гидроксипроизводным сопровождается замыканием пятичленного оксазольного ядра, но в отличие от них приводит к образованию соли – бромида 2-бромметил-4-карбокси-5-метил-1,2-дигидрооксазоло[3,2-*a*]хинолиния.

Ключевые слова: оксазоло[3,2-*a*]хинолин-4-карбоновая кислота, бромирование, гетероциклизация, PCA.

Способность N-аллилзамещенных 4-гидрокси-2-оксо-1,2-дигидрохинолинов и пиридинов претерпевать при бромировании молекулярным бромом циклизацию в 2-бромметил-5-оксо-1,2-дигидро-5Н-оксазоло[3,2-*a*]азагетероциклы основана на их способности образовывать высококонулофильные биполярные мезомерные 1,4-дигидроформы [1–3]. Благодаря именно им на завершающей стадии происходит не обычно наблюдающееся присоединение оставшегося бромид иона к положительно заряженному атому C₍₂₎ бывшего аллильного фрагмента, а замыкание оксазольного цикла с участием соседнего O-анионного центра.

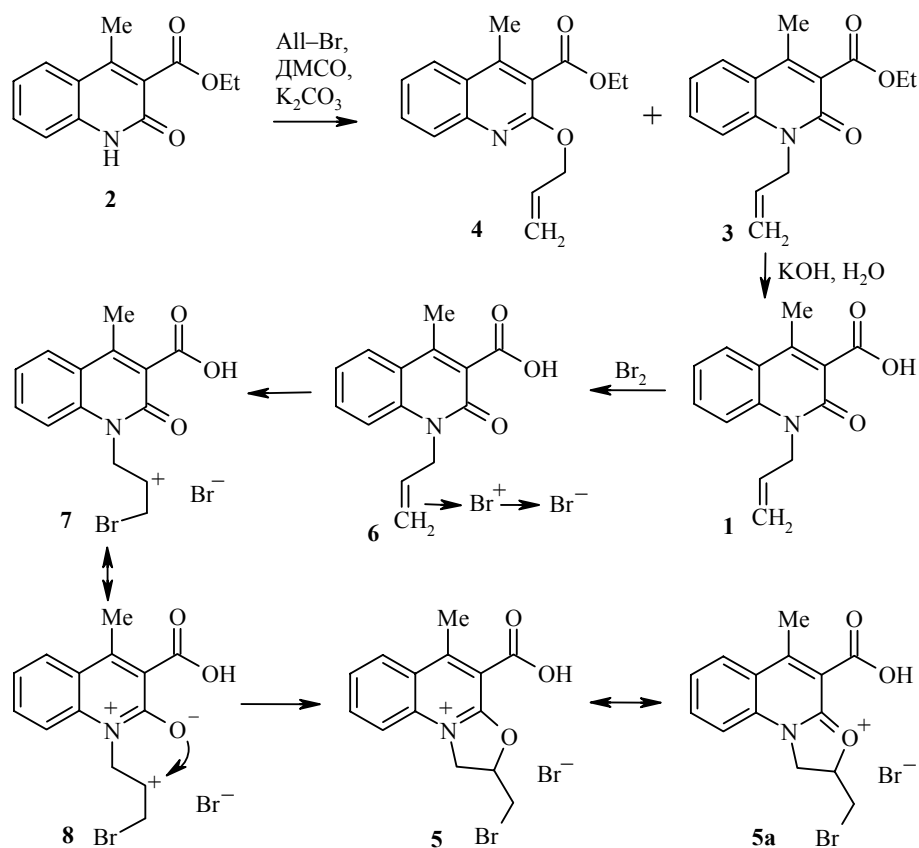
Продолжая изучение синтетического потенциала данной реакции, в настоящем сообщении мы исследовали бромирование 1-аллил-4-метил-2-оксо-1,2-дигидрохинолин-3-карбоновой кислоты (**1**). Интерес к такому исследованию обусловлен, прежде всего, тем, что 4-метилзамещенная кислота **1** в силу своего строения не способна к кето-енольной таутомерии. По этой причине для нее невозможно образование 1,4-дигидроформы, обеспечивающей гетероциклизацию в случае 4-гидроксианалогов, и, следовательно, взаимодействие с бромом должно протекать несколько иначе.

Исходная кислота **1** получена алкилированием этилового эфира **2** аллилбромидом в системе ДМСО/К₂СО₃ с последующим щелочным гидролизом N-аллильного производного **3**. Побочный O-аллильный изомер **4** в таких условиях образуется с выходом всего лишь 5%. Бромирование кислоты **1** осуществляли в стандартных условиях – молекулярным бромом в растворе ледяной уксусной кислоты.

* Сообщение 128 см. [1].

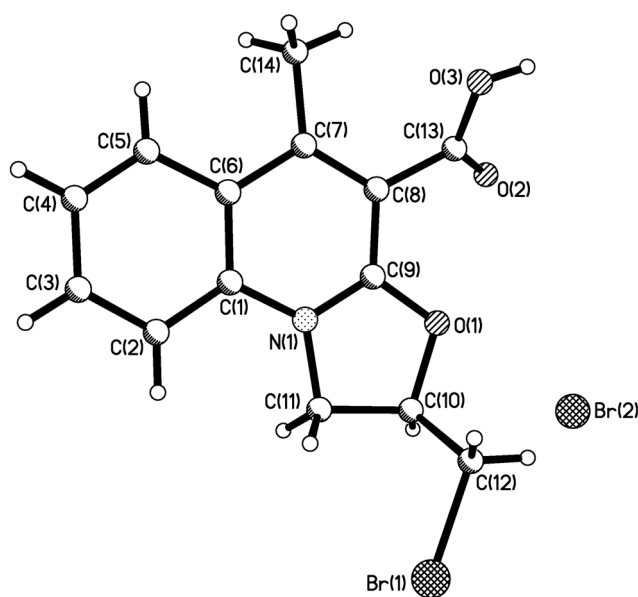
Для однозначного решения вопроса о строении полученного соедине-

ния мы предприняли рентгеноструктурное исследование, показавшее, что он является бромидом 2-бромметил-4-карбокси-5-метил-1,2-дигидрооксазоло[3,2-*a*]хинолиния (**5**). В независимой части элементарной ячейки этого соединения находится положительно заряженная молекула 2-бромметил-4-карбокси-5-метил-1,2-дигидрооксазоло[3,2-*a*]хинолиния и анион Br⁻ (рисунки).



Трициклический фрагмент, а также атомы C₍₁₃₎ и C₍₁₄₎ органического катиона лежат в одной плоскости с точностью 0.02 Å, несмотря на наличие укороченных внутримолекулярных контактов H₍₂₎...C₍₁₁₎ 2.64 (сумма ван-дер-ваальсовых радиусов 2.87 [4]), H₍₅₎...C₍₁₄₎ 2.55 (2.87), H₍₅₎...H_(14c) 2.20 (2.34), H_(14c)...C₍₅₎ 2.69 (2.87) и H_(14a)...C₍₁₃₎ 2.62 (2.87 Å). Длины связей N₍₁₎-C₍₉₎ 1.31(1) и O₍₁₎-C₍₉₎ 1.34(1) Å несколько укорочены по сравнению с их средними значениями 1.355 и 1.370 Å [5], вследствие чего строение органического катиона можно представить как резонансный гибрид двух канонических структур – **5** и **5a**.

Карбоксильная группа при атоме C₍₈₎ развернута относительно плоскости трициклического фрагмента (торсионный угол C₍₉₎-C₍₈₎-C₍₁₃₎-O₍₂₎ 43(1)°, что, вероятно, можно объяснить отталкиванием между метильной и карбоксильной группами (укороченный внутримолекулярный контакт



Строение бромида оксазолохинолиния **5** с нумерацией атомов

$H_{(14a)} \dots O_{(3)}$ 2.35 (2.46 Å)). Такое положение карбоксильной группы стабилизировано межмолекулярной водородной связью $O_{(3)}-H_{(30)} \dots Br_{(2)}$ ($0.5+x, 0.5-y, -0.5+z$) $H \dots Br'$ 2.32 Å, $O-H \dots Br'$ 168°. Бромметильный заместитель при атоме $C_{(10)}$ занимает экваториальное положение (торсионный угол $C_{(12)}-C_{(10)}-C_{(11)}-N_{(1)}$ 119.2(7)°, а атом брома находится в *+sc*-конформации относительно связи $C_{(11)}-C_{(10)}$ (торсионный угол $C_{(11)}-C_{(10)}-C_{(12)}-Br_{(1)}$ 60.1(8)°). При этом возникает укороченный внутримолекулярный контакт $H_{(11b)} \dots Br_{(1)}$ 2.87 Å (3.23 Å).

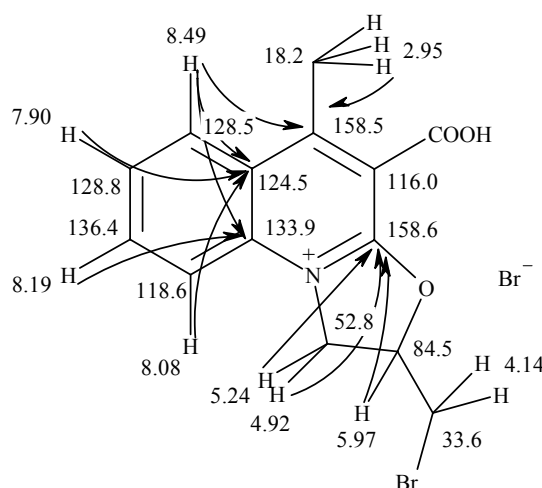
В кристалле молекулы бромида оксазолохинолиния **5** образуют стопки вдоль кристаллографического направления (1 0 0) и связаны с атомами брома слабыми межмолекулярными водородными связями $C_{(4)}-H_{(4)} \dots Br_{(1)}$ ($0.5-x, 0.5+y, 1.5-z$) $H \dots Br'$ 3.06 Å, $C-H \dots Br'$ 163°; $C_{(5)}-H_{(5)} \dots Br_{(2)}$ ($0.5-x, 0.5+y, 0.5-z$) $H \dots Br'$ 2.78 Å, $C-H \dots Br'$ 166°; $C_{(11)}-H_{(11b)} \dots Br_{(2)}$ ($-0.5+x, 0.5-y, 0.5+z$) $H \dots Br'$ 2.92 Å, $C-H \dots Br'$ 151°; $C_{(12)}-H_{(12a)} \dots Br_{(2)}$ ($0.5+x, 0.5-y, 0.5+z$) $H \dots Br'$ 2.89 Å, $C-H \dots Br'$ 149°. Также в кристалле обнаружены межмолекулярные укороченные контакты $H_{(14b)} \dots C_{(3)}$ ($1-x, 1-y, 1-z$) 2.79 (2.87), $H_{(14b)} \dots C_{(4)}$ ($1-x, 1-y, 1-z$) 2.76 (2.87), $H_{(14c)} \dots C_{(3)}$ ($-x, 1-y, 1-z$) 2.79 (2.87), $H_{(11b)} \dots Br_{(2)}$ ($0.5+x, 0.5-y, 0.5+z$) 3.15 (3.23), $Br_{(1)} \dots Br_{(2)}$ ($x, y, 1+z$) 3.69 Å (3.94 Å).

Для бромида оксазолохинолиния **5** была также исследована структура методами корреляционной спектроскопии ЯМР. Измерение спектра COSY позволило сделать надежные отнесения сигналов в протонном спектре, а измерение спектров по гетероядерным корреляциям через 1 связь (HMQC) и через 2–3 химические связи (HMBC) позволило отнести сигналы в углеродном спектре соединения. В табл. 1 приведены все найденные для этого соединения гетероядерные корреляции.

Гетероядерные ^1H - ^{13}C корреляции, найденные для бромида оксазолинолина **5**

δ , м. д.	HMQC	HMBC
8.49	128.5	136.4; 133.9; 124.5; 158.5
8.19	136.4	133.9; 128.5; 124.5
8.08	118.6	136.4; 128.8; 124.5
7.90	128.8	136.4; 133.9; 128.8; 124.5; 118.6
5.97	84.5	158.6
5.24	52.8	158.6; 84.5; 33.6
4.92	52.8	158.6; 84.5; 33.6
4.14	33.6	84.5; 52.8
2.95	18.2	158.5; 124.5; 116.0

Ниже приведены отнесения сигналов в протонном и углеродном спектрах соединения **5**. Стрелками показаны важнейшие корреляции в спектре HMBC, послужившие основанием для отнесений сигналов.



Интересной особенностью спектра ЯМР ^{13}C соединения **5** оказалось то, что химические сдвиги сигналов атомов $\text{C}_{(3a)}$ и $\text{C}_{(5)}$ весьма близки. Оба они поглощают при 158.6 м. д. с едва различимой разницей химических сдвигов. Однако отнесение данных сигналов следует из наличия корреляций для атома $\text{C}_{(3a)}$ с протонными сигналами оксазолинового цикла, а для атома $\text{C}_{(5)}$ – с сигналом протонов метильной группы и Н-6, которые отстоят от атома $\text{C}_{(5)}$, соответственно, на 2 и 3 химические связи.

Таким образом, проведенное исследование позволяет утверждать, что невозможность некоторых N-аллил-1,2-дигидрохинолин-2-онов образовывать 1,4-дигидроформу не является препятствием для гетероциклизации.

Длины связей (*l*) в структуре бромида оксазолохинолиния 5

Связь	<i>l</i> , Å	Связь	<i>l</i> , Å	Связь	<i>l</i> , Å
Br ₍₁₎ -C ₍₁₂₎	1.956(9)	C ₍₆₎ -C ₍₇₎	1.45(1)	O ₍₃₎ -C ₍₁₃₎	1.32(1)
N ₍₁₎ -C ₍₁₎	1.38(1)	C ₍₇₎ -C ₍₁₄₎	1.49(1)	C ₍₁₎ -C ₍₆₎	1.41(1)
O ₍₁₎ -C ₍₉₎	1.34(1)	C ₍₈₎ -C ₍₁₃₎	1.51(1)	C ₍₃₎ -C ₍₄₎	1.39(1)
O ₍₂₎ -C ₍₁₃₎	1.212(9)	C ₍₁₀₎ -C ₍₁₁₎	1.55(1)	C ₍₅₎ -C ₍₆₎	1.43(1)
C ₍₁₎ -C ₍₂₎	1.40(1)	N ₍₁₎ -C ₍₉₎	1.31(1)	C ₍₇₎ -C ₍₈₎	1.39(1)
C ₍₂₎ -C ₍₃₎	1.40(1)	N ₍₁₎ -C ₍₁₁₎	1.47(1)	C ₍₈₎ -C ₍₉₎	1.41(1)
C ₍₄₎ -C ₍₅₎	1.34(1)	O ₍₁₎ -C ₍₁₀₎	1.485(9)	C ₍₁₀₎ -C ₍₁₂₎	1.49(1)

В таких случаях начальные стадии бромирования носят общий характер с алкенами: аллильное производное **1** → π-комплекс **6** → вторичный карбкатион **7**. Однако в отличие от 4-гидроксихинолин-2-онов, происходящая затем циклизация становится возможной за счет отмечавшегося нами ранее [6] существенного вклада в резонансный гибрид подобных соединений уже совершенно иных по строению биполярных форм – ароматических. И поскольку в интермедиатах типа **8** есть не участвующий в дальнейших превращениях четвертичный атом азота, то конечным продуктом реакции может быть только нейтральный в целом бромид оксазолохинолиния.

Валентные углы (*ω*) в структуре бромида оксазолохинолиния 5

Угол	<i>ω</i> , град.	Угол	<i>ω</i> , град.	Угол	<i>ω</i> , град.
C ₍₉₎ -N ₍₁₎ -C ₍₁₎	122.1(7)	O ₍₁₎ -C ₍₉₎ -C ₍₈₎	122.8(7)	C ₍₅₎ -C ₍₆₎ -C ₍₇₎	122.3(7)
C ₍₁₎ -N ₍₁₎ -C ₍₁₁₎	125.8(7)	O ₍₁₎ -C ₍₁₀₎ -C ₍₁₁₎	104.4(6)	C ₍₈₎ -C ₍₇₎ -C ₍₁₄₎	124.5(7)
N ₍₁₎ -C ₍₁₎ -C ₍₂₎	120.4(7)	N ₍₁₎ -C ₍₁₁₎ -C ₍₁₀₎	101.5(6)	C ₍₇₎ -C ₍₈₎ -C ₍₉₎	117.6(7)
C ₍₂₎ -C ₍₁₎ -C ₍₆₎	122.0(7)	O ₍₂₎ -C ₍₁₃₎ -O ₍₃₎	126.2(7)	C ₍₉₎ -C ₍₈₎ -C ₍₁₃₎	118.7(7)
C ₍₄₎ -C ₍₃₎ -C ₍₂₎	121.4(7)	O ₍₃₎ -C ₍₁₃₎ -C ₍₈₎	113.0(6)	N ₍₁₎ -C ₍₉₎ -C ₍₈₎	123.7(8)
C ₍₄₎ -C ₍₅₎ -C ₍₆₎	120.4(8)	C ₍₉₎ -N ₍₁₎ -C ₍₁₁₎	112.0(7)	O ₍₁₎ -C ₍₁₀₎ -C ₍₁₂₎	107.4(7)
C ₍₁₎ -C ₍₆₎ -C ₍₇₎	120.3(7)	C ₍₉₎ -O ₍₁₎ -C ₍₁₀₎	108.5(6)	C ₍₁₂₎ -C ₍₁₀₎ -C ₍₁₁₎	114.2(7)
C ₍₈₎ -C ₍₇₎ -C ₍₆₎	118.6(7)	N ₍₁₎ -C ₍₁₎ -C ₍₆₎	117.6(7)	C ₍₁₀₎ -C ₍₁₂₎ -Br ₍₁₎	108.2(6)
C ₍₆₎ -C ₍₇₎ -C ₍₁₄₎	116.9(7)	C ₍₃₎ -C ₍₂₎ -C ₍₁₎	117.3(8)	O ₍₂₎ -C ₍₁₃₎ -C ₍₈₎	120.8(7)
C ₍₇₎ -C ₍₈₎ -C ₍₁₃₎	123.5(7)	C ₍₅₎ -C ₍₄₎ -C ₍₃₎	121.4(8)		
N ₍₁₎ -C ₍₉₎ -O ₍₁₎	113.6(7)	C ₍₁₎ -C ₍₆₎ -C ₍₅₎	117.4(7)		

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Спектры ЯМР ^1H и ^{13}C бромида оксазолохинолина **5**, эксперименты по двумерной спектроскопии ЯМР ^1H COSY, а также гетероядерные корреляционные спектры НМРС и НМВС зарегистрированы на спектрометре Varian Mercury-400 (400 и 100 МГц, соответственно, для ^1H и ^{13}C). Все двумерные эксперименты проводились с градиентной селекцией полезных сигналов. Время смешивания в импульсных последовательностях соответствовало $^1J_{\text{CH}} = 140$ и $^{2-3}J_{\text{CH}} = 8$ Гц. Количество инкрементов в спектрах COSY и НМРС составило 128, а в спектрах НМВС – 400. Спектры ЯМР ^1H аллильных производных записаны на приборе Varian Mercury-VX-200 (200 МГц). Во всех случаях растворитель ДМСО- d_6 , внутренний стандарт ТМС. Этиловый эфир 4-метил-2-оксо-1,2-дигидрохинолин-3-карбоновой кислоты (**2**) получен по методике работы [6].

Этиловый эфир 1-аллил-4-метил-2-оксо-1,2-дигидрохинолин-3-карбоновой кислоты (3). К смеси 2.31 г (0.01 моль) соединения **2** и 2.76 г (0.02 моль) K_2CO_3 в 20 мл ДМСО прибавляют 1.3 мл (0.015 моль) аллилбромида и перемешивают в течение 2 ч при 90 °С. Охлаждают, разбавляют водой. Выделившийся осадок экстрагируют CH_2Cl_2 (3 × 20 мл). Органические вытяжки объединяют, растворитель отгоняют, остаток обрабатывают гексаном (3 × 15 мл). Не растворившийся в гексане осадок растворяют в 30 мл эфира, čistят углем и после отгонки растворителя выделяют 2.28 г (84%) N-этилзамещенного эфира **3**. R_f 0.42 (Silufol UV-254, Et_2O –гексан, 2 : 1). Т. пл. 66–68 °С (из водного этанола). Спектр ЯМР ^1H , δ , м. д. (J , Гц): 7.88 (1H, д, $J = 8.2$ и $J = 1.2$, H-5); 7.64 (1H, т. д, $J = 7.9$ и $J = 1.2$, H-7); 7.47 (1H, д, $J = 8.3$, H-8); 7.32 (1H, т. д, $J = 7.4$ и $J = 1.0$, H-6); 5.91 (1H, м, $\text{CH}=\text{CH}_2$); 5.13 (1H, д. д, $J = 10.5$ и $J = 1.3$, $\text{NCH}_2\text{CH}=\text{CH}-\text{cis}$); 4.95 (1H, д. д, $J = 17.4$ и $J = 1.3$, $\text{NCH}_2\text{CH}=\text{CH}-\text{trans}$); 4.84 (2H, д, $J = 4.7$, NCH_2); 4.30 (2H, к, $J = 7.1$, OCH_2); 2.41 (3H, с, 4- CH_3); 1.27 (3H, т, $J = 7.1$, OCH_2CH_3). Найдено, %: С 70.75; Н 6.23; N 5.08. $\text{C}_{16}\text{H}_{17}\text{NO}_3$. Вычислено, %: С 70.83; Н 6.32; N 5.16.

Этиловый эфир 2-аллилокси-4-метилхинолин-3-карбоновой кислоты (4). Оставшийся после выделения N-этилзамещенного эфира **3** гексановый экстракт (см. предыдущий пример) čistят углем, после чего растворитель удаляют. Получают 0.13 г (5%) 2-аллил-оксипроизводного **4** в виде бесцветной маслянистой жидкости. R_f 0.89 (Silufol UV-254, Et_2O –гексан, 2:1). Спектр ЯМР ^1H , δ , м. д. (J , Гц): 8.04 (1H, д, $J = 8.3$, H-5); 7.75 (2H, м, H-7,8); 7.49 (1H, т. д, $J = 7.3$ и $J = 1.9$, H-6); 6.07 (1H, м, $\text{CH}=\text{CH}_2$); 5.37 (1H, д. д, $J = 17.0$ и $J = 1.9$, $\text{OCH}_2\text{CH}=\text{CH}-\text{trans}$); 5.22 (1H, д. д, $J = 10.6$ и $J = 1.9$, $\text{OCH}_2\text{CH}=\text{CH}-\text{cis}$); 4.96 (2H, д, $J = 4.8$, $\text{OCH}_2\text{CH}=\text{CH}$); 4.37 (2H, к, $J = 7.2$, OCH_2CH_3); 2.58 (3H, с, 4- CH_3); 1.30 (3H, т, $J = 7.2$, OCH_2CH_3). Найдено, %: С 70.73; Н 6.40; N 5.21. $\text{C}_{16}\text{H}_{17}\text{NO}_3$. Вычислено, %: С 70.83; Н 6.32; N 5.16.

1-Аллил-4-метил-2-оксо-1,2-дигидрохинолин-3-карбоновая кислота (1). Смесь 2.71 г (0.01 моль) соединения **3** и 30 мл 20% водного раствора КОН кипятят 3 ч. Охлаждают, подкисляют HCl до pH 3. Выделившийся осадок кислоты **1** отфильтровывают, промывают водой, сушат. Выход 2.20 г (90%). Т. пл. 131–133 °С (из этанола). Спектр ЯМР ^1H , δ , м. д. (J , Гц): 13.46 (1H, уш. с, COOH); 7.90 (1H, д, $J = 8.0$, H-5); 7.64 (1H, т, $J = 7.9$, H-7); 7.47 (1H, д, $J = 8.3$, H-8); 7.32 (1H, т, $J = 7.6$, H-6); 5.92 (1H, м, $\text{CH}=\text{CH}_2$); 5.14 (1H, д. д, $J = 10.5$ и $J = 1.3$, $\text{NCH}_2\text{CH}=\text{CH}-\text{cis}$); 4.97 (1H, д. д, $J = 17.5$ и $J = 1.3$, $\text{NCH}_2\text{CH}=\text{CH}-\text{trans}$); 4.89 (2H, д, $J = 4.7$, NCH_2); 2.45 (3H, с, CH_3). Найдено, %: С 69.22; Н 4.46; N 5.69. $\text{C}_{14}\text{H}_{13}\text{NO}_3$. Вычислено, %: С 69.12; Н 5.39; N 5.76.

Бромид 2-бромметил-4-карбоксо-5-метил-1,2-дигидрооксазо[3,2- a]хинолина (5). К раствору 2.43 г (0.01 моль) N-аллилзамещенной кислоты **1** в 20 мл уксусной кислоты при перемешивании прибавляют 0.52 мл (0.01 моль) брома, который сразу же обесцвечивается. Разбавляют водой. Выпавший осадок отфильтровывают, промывают холодной водой, сушат. Выход 3.26 г (81%). Т. пл. 213–215 °С (этанол). Спектр ЯМР ^1H , δ , м. д. (J , Гц): 8.49 (1H, д, $J = 7.9$, H-6); 8.19 (1H, т, $J = 7.9$, H-8); 8.08 (1H, д, $J = 7.9$, H-9); 7.90 (1H, т, $J = 7.9$, H-7); 5.97 (1H, м, CHO); 5.24 (1H, т, $J = 11.3$, NCH); 4.92 (1H, д. д, $J = 11.3$ и $J = 7.0$, NCH); 4.14 (2H, м, CH_2Br); 2.95 (3H, с, 5- CH_3). Спектр ЯМР ^{13}C , δ , м. д.: 163.9 (COO), 158.6 ($\text{C}_{(3a)}$), 158.5 ($\text{C}_{(5)}$), 136.4 ($\text{C}_{(8)}$), 133.9 ($\text{C}_{(9a)}$), 128.8 ($\text{C}_{(7)}$), 128.5 ($\text{C}_{(6)}$), 124.5 ($\text{C}_{(5a)}$), 118.6 ($\text{C}_{(9)}$), 116.0 ($\text{C}_{(4)}$), 84.5 ($\text{C}_{(2)}$), 52.8 ($\text{C}_{(1)}$), 33.6 (CH_2Br), 18.2 (5- CH_3). Найдено, %: С 41.81; Н 3.30; N 3.36. $\text{C}_{14}\text{H}_{13}\text{BrNO}_3 \cdot \text{Br}$. Вычислено, %: С 41.72; Н 3.25; N 3.47.

Рентгеноструктурное исследование. Кристаллы соединения **5** моноклинные (этанол), при $-173\text{ }^\circ\text{C}$: $a = 7.140(2)$, $b = 23.844(5)$, $c = 8.128(2)\text{ \AA}$, $\beta = 90.06(2)^\circ$, $V = 1383.8(5)\text{ \AA}^3$, $M_r = 403.07$, $Z = 4$, пространственная группа $P2_1/n$, $d_{\text{выч}} = 1.935\text{ г/см}^3$, $\mu(\text{MoK}\alpha) = 5.864\text{ мм}^{-1}$, $F(000) = 792$. Параметры элементарной ячейки и интенсивности 7700 отражений (2443 независимых, $R_{\text{int}} = 0.133$) измерены на дифрактометре Xcalibur-3 (MoK α излучение, CCD-детектор, графитовый монохроматор, ω -сканирование, $2\theta_{\text{max}} = 50^\circ$). Поглощение учтено полуэмпирическим методом по результатам ψ -сканирования ($T_{\text{min}} = 0.319$, $T_{\text{max}} = 0.752$). Структура расшифрована прямым методом по комплексу программ SHELXTL [7]. Положения атомов водорода рассчитаны геометрически и уточнены по модели "наездника" с $U_{\text{iso}} = nU_{\text{eq}}$ неводородного атома, связанного с данным водородным ($n = 1.5$ для метильной группы и $n = 1.2$ для остальных атомов водорода). Структура уточнена по F^2 полноматричным МНК в анизотропном приближении для неводородных атомов до $wR_2 = 0.117$ по 2355 отражениям ($R_1 = 0.073$ по 1901 отражению с $F > 4\sigma(F)$, $S = 1.060$). Полная кристаллографическая информация депонирована в Кембриджском банке структурных данных (депонент № CCDC 619575). Межатомные расстояния и валентные углы представлены в табл. 2, 3.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. И. В. Украинец, Н. Л. Березнякова, А. В. Туров, С. В. Слободзян, *XTC*, 1365 (2007).
2. И. В. Украинец, Л. В. Сидоренко, О. В. Горохова, С. В. Шишкина, А. В. Туров, *XTC*, 736 (2007).
3. И. В. Украинец, Н. Л. Березнякова, О. В. Горохова, А. В. Туров, С. В. Шишкина, *XTC*, 1180 (2007). [*Chem. Heterocycl. Comp.*, **43**, 617 (2007)].
4. Ю. В. Зефирюк, *Кристаллография*, **42**, 936 (1997).
5. Н.-В. Burgi, J. D. Dunitz, *Structure Correlation*, VCH, Weinheim, 1994, vol. 2, p. 741.
6. И. В. Украинец, Л. В. Сидоренко, О. В. Горохова, С. В. Шишкина, *XTC*, 887 (2006). [*Chem. Heterocycl. Comp.*, **42**, 776 (2006)].
7. G. M. Sheldrick, *SHELXTL PLUS. PC Version. A System of Computer Programs for the Determination of Crystal Structure from X-ray Diffraction Data*. Rev. 5.1 (1998).

Национальный фармацевтический
университет, Харьков 61002, Украина
e-mail: uiv@kharkov.ua

Поступило 25.06.2006

^aКиевский национальный университет
им. Тараса Шевченко, Киев 01033, Украина
e-mail: nmrlab@univ.kiev.ua