

СТРУКТУРА
ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

УДК 548.73;547.7

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОЕ КАРТИРОВАНИЕ
В ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКОМ ДИЗАЙНЕ.
6. СТРУКТУРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
3-(ИЗОНИКОТИНОИЛ)-2-ОКСООКСАЗОЛО[3,2-*a*]ПИРИДИНА
И ПРОДУКТА ЕГО ГИДРОЛИЗА
МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ© 2002 г. В. Б. Рыбаков¹, Е. В. Бабаев, К. Ю. Пасичниченко, Э. Зонневельд*

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

*Университет Амстердама, химический факультет, Нидерланды

Поступила в редакцию 29.01.2001 г.

Методом порошковой дифракции определено строение 3-(изоникотиноил)-2-оксооксазоло[3,2-*a*]пиридина $C_{13}H_8N_2O_3$ (I). Кристаллы I ромбические: $a = 16.610(2)$, $b = 3.853(1)$, $c = 16.431(2)$ Å, $Z = 4$, пр. гр. $Pna2_1$. Структура решена методом систематического поиска; уточнение проводилось методом Ритвельда ($R_p = 0.086$, $R_{wp} = 0.115$, $R_e = 0.030$, $\chi^2 = 11.138$). Строение продукта гидролиза I – $C_{12}H_{10}N_2O_2$ (II) определено методом монокристалльной дифракции. Кристаллы II ромбические: $a = 8.755(4)$, $b = 10.526(17)$, $c = 23.088(6)$ Å, $Z = 8$, пр. гр. $Pc2_1b$. Структура решена прямыми методами и уточнена полноматричным МНК до $R = 0.0464$.

Система из двух сочлененных гетероциклов в I плоская. Двугранный угол между плоскостью пиридинового кольца в изоникотиноильном фрагменте и плоскостью бициклической системы составляет $51.2(2)^\circ$. Обе примыкающие к пятичленному фрагменту экзоциклические группы CO содержат двойные связи.

Строение двух кристаллографически независимых молекул II почти тождественно, а изоникотиноильный фрагмент практически перпендикулярен плоскости пиридинового фрагмента ($84.3(1)^\circ$ и $87.0(1)^\circ$).

ВВЕДЕНИЕ

Данная статья является продолжением проводимых нами структурных исследований гетероциклических соединений, обладающих способностью легко вступать в различные перегруппировки и реакции трансформации циклов [1–12]. Настоящая работа посвящена изучению строения 3-(изоникотиноил)-2-оксооксазоло[3,2-*a*]пиридина $C_{13}H_8N_2O_3$ (I), относящегося к классу мезоионных гетероциклов, а также продукта его гидролиза

$C_{12}H_{10}N_2O_2$ (II). Данные о строении указанных молекул в Кембриджском банке структурных данных [13] отсутствуют.

Наш интерес к структуре и свойствам молекул класса мезоионных соединений типа I связан, во-первых, с необычным илидным характером структуры таких гетероциклов [9], а во-вторых, с возможностью легкого раскрытия оксазолонового цикла и его трансформации в оксазолиевый [14] по типу конверсии I–IV:

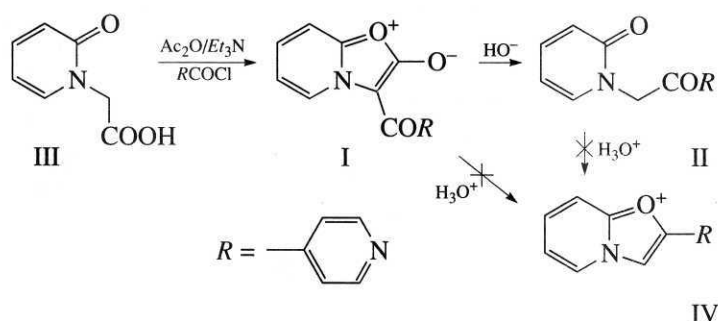


Таблица 1. Позиционные параметры атомов ($\times 10^4$) и их изотропные тепловые параметры $B_{\text{изо}}$ (\AA^2) для структуры I

Атом	x	y	z	$B_{\text{изо}}$	Атом	x	y	z	$B_{\text{изо}}$
C(1)	1991(5)	5229(18)	-405	3.55	C(14)	439(4)	1779(21)	-1279(7)	5.70
C(2)	1456(5)	3740(18)	186(6)	3.55	N(1)	1947(4)	3072(16)	863(4)	3.55
C(3)	1744(5)	1900(21)	1618(6)	3.55	O(1)	2741(3)	5340(11)	-24(4)	3.55
C(4)	2349(5)	1259(22)	2183(5)	3.55	O(2)	1945(3)	6360(12)	-1082(4)	6.25
C(5)	3134(5)	2245(22)	1986(6)	3.55	O(3)	270(3)	1934(13)	833(4)	3.06
C(6)	3324(5)	3616(21)	1249(6)	3.55	H(3)	1222(27)	1036(159)	1758(36)	4.0
C(7)	2721(5)	4139(18)	699(6)	3.55	H(4)	2236(36)	335(135)	2691(31)	4.0
C(8)	612(4)	3033(22)	184(6)	3.55	H(5)	2540(31)	1951(175)	2378(30)	4.0
C(9)	191(5)	3327(22)	-533(6)	5.70	H(6)	3854(28)	4289(129)	1126(33)	4.0
C(10)	-576(6)	5040(21)	-491(6)	5.70	H(10)	-730(23)	5917(115)	10(35)	4.0
C(11)	-1022(4)	5424(27)	-1178(7)	5.70	H(11)	-1527(26)	6437(128)	-1144(35)	4.0
N(12)	-767(4)	3916(19)	-1938(5)	5.70	H(13)	157(31)	1329(145)	-2462(33)	4.0
C(13)	-10(6)	2390(28)	-1975(7)	5.70	H(14)	935(25)	666(138)	-1324(35)	4.0

В литературе описан ряд представителей мезоионных гетероциклов общей формулы I с алифатическими и ароматическими остатками R. нами получен первый представитель этого ряда для случая, когда R – гетероциклический остаток (гамма-пиридил). Соединение I получено из пиридонуксусной кислоты III по методике, аналогичной применяемой [14] ($R = Ar$) при использовании в качестве ацилирующего реагента хлорангидрида изоникотиновой кислоты. Хотя реакция сопровождается заметным осмолением, I удается выделить с выходом 47%. При нагревании I с водным раствором соды происходит гидролитическое расщепление оксазолонового цикла с образованием пиридона II. Следует отметить, что получить пиридон II каким-либо другим способом не представляется возможным. Например, весьма затруднительно было бы использовать стандартную стратегию получения такого вещества по реакции пиридон-2 с соответствующим бромкетонном, поскольку подходящий бромкетон-4-бром-ацетилпиридин содержит одновременно и гетероатом пиридинового ядра, и алкилирующий фрагмент, а потому способен к самокватернизации.

Превращение альфа-аминокислот в альфа-аминокетоны под действием (галоген)ангидридов кислот обычно называют реакцией Дакина–Веста. Осуществленную нами ступенчатую конверсию пиридонуксусной кислоты III (формально, альфа-аминокислоты) в пиридон II (формально, альфа-аминокетон) через стадию образования стабильного мезоионного гетероцикла I следует также отнести к реакции Дакина–Веста.

Попытки провести кислотную циклодегидратацию пиридона II в бициклический катион IV были безуспешны. В стандартных условиях, при

которых другие 1-фенацилпиридоны замыкают оксазолиевый цикл (последовательная обработка серной и хлорной кислотами), пиридон II образовывал стабильный перхлорат, в котором центром протонирования выступает, по-видимому, гетероатом азота изоникотиноильного фрагмента. Такой же перхлорат пиридона II был выделен при попытке рециклизации мезоионного оксазолопиридина I в кислой среде по аналогии с ранее обнаруженным превращением для случая $R = Ar$ [14]. Таким образом, нам удалось хотя бы частично очертить границы применимости рециклизации мезоионных оксазолопиридинов в катионоидные системы.

Ранее нами как порошковым, так и монокристалльным методами рентгеноструктурного анализа были изучены системы типа I и II с $Ar = C_6H_5$ [9, 3] и *para*-NO₂-C₆H₄ [11, 8]. Таким образом, настоящее исследование еще одной комплементарной пары молекул дополняет структурную информацию о строении мезоионных систем и продуктов их гидролиза и является еще одним примером принципа рентгеноструктурного картирования химических реакций [5–7, 11, 12].

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Дифракционный эксперимент для I проводился в вакуумированной камере Гинье–Йохансона FR552 Enraf-Nonius ($\lambda CuK_{\alpha 1}$, кварцевый монохроматор). Интенсивности рентгеновского спектра и его угловые параметры измерены на денситометре LS18 с шагом 0.01° . Параметры элементарной ячейки определены программой индицирования ITO [15] в интервале углов 2θ 4–86° и индексов $0 \leq h \leq 13$; $0 \leq k \leq 3$; $0 \leq l \leq 13$. Пространственная группа определена по систематическим погасаниям отражений. Кристаллы I ромбические:

Таблица 2. Позиционные параметры атомов ($\times 10^4$) и их эквивалентные изотропные тепловые параметры $U_{\text{экр}}$ ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) для структуры II

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{\text{экр}}$	Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{\text{экр}}$
N(1A)	2515(2)	8000(2)	8031(1)	48(1)	C(9B)	3677(2)	10598(2)	1727(1)	49(1)
C(2A)	1987(3)	6861(2)	8234(1)	73(1)	C(10B)	4385(2)	9734(2)	1367(1)	53(1)
O(2A)	1588(2)	6042(2)	7876(1)	99(1)	C(11B)	4500(3)	10009(3)	792(1)	75(1)
C(3A)	1910(3)	6746(2)	8837(1)	87(1)	N(12B)	4008(2)	11056(2)	534(1)	86(1)
C(4A)	2353(3)	7668(3)	9192(1)	83(1)	C(13B)	3352(4)	11873(3)	892(1)	104(1)
C(5A)	2886(2)	8805(2)	8969(1)	66(1)	C(14B)	3157(3)	11706(2)	1472(1)	94(1)
C(6A)	2941(2)	8969(2)	8400(1)	59(1)	H(3A)	1452(16)	6081(17)	8983(6)	43(5)
C(7A)	2556(2)	8171(2)	7410(1)	52(1)	H(4A)	2360(20)	7600(20)	9573(9)	118(9)
C(8A)	1018(2)	8316(2)	7142(1)	44(1)	H(5A)	3320(20)	9570(20)	9262(8)	99(8)
O(8A)	-94(1)	8508(1)	7440(1)	64(1)	H(6A)	3310(30)	9750(20)	8165(9)	125(9)
C(9A)	860(2)	8207(2)	6511(1)	46(1)	H(7A1)	3105(17)	8840(20)	7319(7)	62(6)
C(10A)	-426(2)	8675(2)	6240(1)	72(1)	H(7A2)	3070(20)	7520(20)	7223(7)	81(7)
C(11A)	-541(3)	8557(3)	5654(1)	91(1)	H(10A)	-1249(19)	8970(20)	6485(7)	72(6)
N(12A)	483(2)	8031(2)	5308(1)	81(1)	H(11A)	-1415(19)	8860(10)	5453(7)	70(6)
C(13A)	1714(3)	7602(2)	5576(1)	67(1)	H(13A)	2474(18)	7325(18)	5314(7)	73(7)
C(14A)	1946(2)	7643(2)	6159(1)	58(1)	H(14A)	2790(20)	7330(20)	6319(8)	86(7)
N(1B)	2442(2)	10839(1)	3307(1)	46(1)	H(3B)	4471(17)	11115(19)	4465(7)	67(6)
C(2B)	3687(2)	11161(2)	3631(1)	47(1)	H(4B)	2344(15)	10235(15)	4846(6)	35(4)
O(2B)	4809(2)	11629(2)	3383(1)	62(1)	H(5B)	328(18)	9553(17)	4283(7)	55(6)
C(3B)	3611(2)	10883(2)	4226(1)	57(1)	H(6B)	365(18)	10010(18)	3314(7)	54(5)
C(4B)	2377(3)	10337(2)	4458(1)	62(1)	H(7B1)	1432(13)	11137(14)	2540(6)	23(4)
C(5B)	1169(3)	9984(2)	4110(1)	71(1)	H(7B2)	2890(20)	12030(20)	2672(8)	98(7)
C(6B)	1220(2)	10253(2)	3552(1)	63(1)	H(10B)	4680(20)	8880(30)	1554(8)	112(8)
C(7B)	2454(2)	11184(2)	2700(1)	52(1)	H(11B)	5040(20)	9540(20)	550(8)	82(7)
C(8B)	3423(2)	10284(2)	2346(1)	47(1)	H(13B)	2820(30)	12440(30)	706(12)	151(11)
O(8B)	3962(1)	9335(1)	2551(1)	59(1)	H(14B)	2690(20)	12230(20)	1716(8)	80(7)

$a = 16.610(2)$, $b = 3.853(1)$, $c = 16.431(2)$ \AA , $V = 1051.6(3)$ \AA^3 , $d_{\text{выч}} = 1.436$ г/см³; $\mu(\lambda\text{Cu}) = 8.89$ см⁻¹; $Z = 4$; пр. гр. $Pna2_1$.

Структура I решена методом систематического поиска [16] с использованием заданных молекулярных фрагментов. Полнопрофильное уточнение структуры по методу Ритвелда проводилось программой MR1A [17]. В качестве функции профиля использовалась псевдо-Войт функция, фон аппроксимировался полиномами Чебышева пятого порядка. Параметры текстуры в направлении [010] уточнялись по модели Марша-Долласа [18]. Окончательные параметры уточнения $R_p = 0.086$, $R_{wp} = 0.115$, $R_e = 0.030$, $\chi^2 = 11.138$, где $R_p = \sum |I_o - I_c| / \sum I_o$, $R_{wp} = \sum w|I_o - I_c| / \sum wI_o$, $R_e = \sum \sigma I_o / \sum I_o$; I_o - наблюдаемая интенсивность; I_c - расчетная интенсивность. Координаты атомов и их изотропные тепловые параметры приведены в табл. 1.

Параметры элементарной ячейки II определяли и уточняли по 25 рефлексам в интервале углов θ 14°–16° на автоматическом дифрактометре CAD-4 [19] ($\lambda\text{MoK}_{\alpha}$, графитовый монохроматор). Кристаллы II ромбические: $a = 8.755(4)$, $b = 10.526(17)$, $c = 23.088(6)$ \AA , $V = 2128(4)$ \AA^3 , $d_{\text{выч}} = 1.337$ г/см³, $\mu(\lambda\text{Mo}) = 0.093$ мм⁻¹, $Z = 8$, пр. гр. $Pc2_1b$. На том же дифрактометре методом ω -сканирования в области углов $\theta \leq 21.96^\circ$ измерено 1266 отражений с $I \geq 2\sigma(I)$. Первичная обработка массива дифракционных данных проводилась с использованием программы WinGX-98 [20]. Структура решена прямыми методами и уточнена МНК в анизотропном приближении по программному комплексу SHELX97 [21]. Атомы водорода локализованы из разностного синтеза электронной плотности и уточнены в изотропном приближении. Окончательные значения $R_1 = 0.0461$, $wR_2 = 0.0868$. Остаточная электронная плотность имела значения $\Delta\rho_{\text{max}} = 0.139$ и $\Delta\rho_{\text{min}} = -0.116$ э/Å³. Ко-

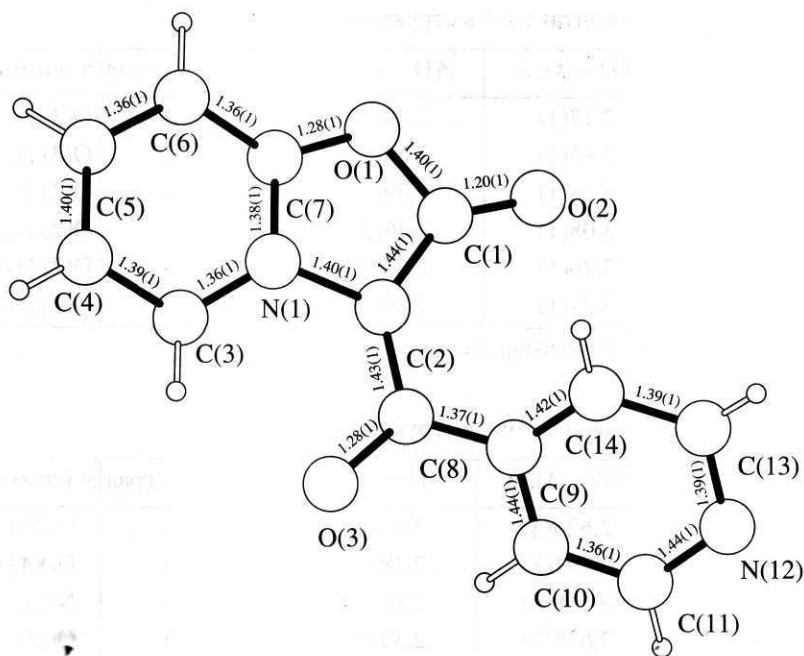


Рис. 1. Нумерация атомов, межатомные расстояния и строение молекулы I.

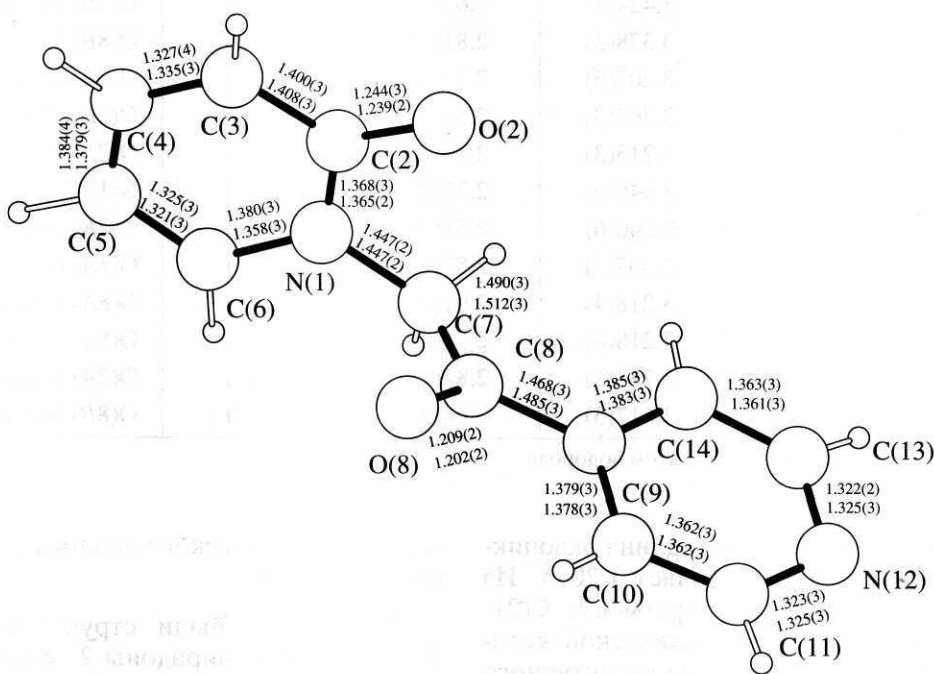


Рис. 2. Нумерация атомов, межатомные расстояния (верхняя строчка для молекулы A, нижняя для молекулы B) и строение молекул II.

ординаты атомов и их эквивалентные тепловые параметры приведены в табл. 2.

Пространственное расположение атомов в молекулах I и II и их нумерация показаны на рис. 1 и 2, полученных с использованием графического пакета программ PLUTON96 [22].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Угол между плоскостями оксазоло[3,2-*a*]пиридинового бицикла и шестичленного пиридинового кольца в молекуле I равен $51.2(2)^\circ$. Длина связи C(1)–C(2) (1.44 Å) оказалась существенно длиннее

Таблица 3. Параметры межатомных контактов* в структуре I

$D-H$	$d(D-H)$, Å	$d(D\cdots A)$, Å	$d(H\cdots A)$, Å	$\omega(D-H\cdots A)$, град	A (симметрическая операция)
C(3)–H(3)	0.96(5)	2.77(1)	2.22(5)	115(3)	O(3) [x, y, z]
C(10)–H(10)	0.93(6)	2.85(1)	2.64(5)	94(3)	O(3) [x, y, z]
C(14)–H(14)	0.93(5)	3.08(1)	2.79(5)	99(3)	O(2) [x, y, z]
C(4)–H(4)	0.93(5)	3.08(1)	2.46(5)	124(4)	O(2) [1/2 - x, y - 1/2, 1/2 + z]
C(5)–H(5)	0.94(5)	3.20(1)	2.67(5)	116(4)	O(2) [1/2 - x, y - 1/2, 1/2 + z]
C(14)–H(14)	0.93(5)	3.27(1)	2.39(5)	158(4)	O(2) [x, y - 1, z]

* D – атом-донор; A – атом-акцептор; H – атом водорода.

Таблица 4. Параметры межатомных контактов* в структуре II

$D-H$	$d(D-H)$, Å	$d(D\cdots A)$, Å	$d(H\cdots A)$, Å	$\omega(D-H\cdots A)$, град	A (симметрическая операция)
C(7A)–H(7A2)	0.93(2)	2.626(4)	2.52(2)	86(1)	O(2A) [x, y, z]
C(10A)–H(10A)	0.97(2)	2.791(3)	2.48(2)	99(1)	O(8A) [x, y, z]
C(5B)–H(5B)	0.95(2)	3.498(4)	2.86(2)	125(1)	N(12A) [x, y, z]
C(7B)–H(7B2)	0.97(2)	2.638(3)	2.39(2)	94(1)	O(2B) [x, y, z]
C(10B)–H(10B)	1.03(2)	2.790(3)	2.44(2)	99(1)	O(8B) [x, y, z]
C(3B)–H(3B)	0.97(2)	3.674(3)	2.81(2)	150(1)	N(12B) [1 - x, y, z + 1/2]
C(7A)–H(7A1)	0.88(2)	3.302(3)	2.68(2)	130(1)	O(8B) [1 - x, y, z + 1/2]
C(6A)–H(6A)	1.04(3)	3.424(5)	2.62(3)	134(2)	O(2B) [1 - x, y, z + 1/2]
C(6A)–H(6A)	1.04(3)	3.378(3)	2.81(2)	114(1)	O(8B) [1 - x, y, z + 1/2]
C(7A)–H(7A1)	0.88(2)	3.207(5)	2.71(2)	117(2)	O(2A) [x, y + 1/2, 3/2 + z]
C(7A)–H(7A2)	0.93(2)	3.363(3)	2.51(2)	153(2)	O(2B) [1 - x, y - 1/2, 1 - z]
C(14A)–H(14A)	0.89(2)	3.213(3)	2.33(2)	171(2)	O(2B) [1 - x, y - 1/2, 1 - z]
C(13A)–H(13A)	0.95(2)	3.640(3)	2.72(2)	163(1)	N(12B) [x, y - 1/2, 1/2 - z]
C(10B)–H(10B)	1.03(2)	3.340(6)	2.38(3)	155(2)	O(2B) [x, y - 1/2, 1/2 - z]
C(6B)–H(6B)	0.96(2)	3.307(3)	2.57(2)	133(1)	O(8A) [-x, y, z - 1/2]
C(7B)–H(7B2)	0.97(2)	3.218(4)	2.91(2)	100(1)	O(8A) [-x, y + 1/2, 1 - z]
C(7B)–H(7B1)	0.97(1)	3.218(4)	2.76(2)	110(1)	O(8A) [-x, y + 1/2, 1 - z]
C(7B)–H(7B1)	0.97(1)	3.783(3)	2.82(1)	177(1)	O(2A) [-x, y + 1/2, 1 - z]
C(7B)–H(7B2)	0.97(2)	3.617(5)	2.66(2)	172(2)	O(8B) [x, y + 1/2, 1/2 - z]

* D – атом-донор; A – атом-акцептор; H – атом водорода.

ожидаемой двойной при том, что длина экзоциклической связи C(1)–O(2) составляет 1.20 Å. Из этого следует, что геометрия фрагмента C(2)–C(1)=O(2) соответствует экзоциклической кетогруппе C(2)–C(8)=O(3). Параметры структурного фрагмента O(2)=C(1)–C(2)–C(8)=O(3) отвечают комбинации двух ординарных карбонильных групп, соединенных посредством атома C(2), что может быть объяснено локализацией отрицательного заряда в мезоионной молекуле на атоме C(2). Положительный заряд делокализован по цепочке N(1)–C(7)–O(1) и не затрагивает пиридиновый фрагмент мезоионного бицикла. Аналогичная делокализация положительного заряда, но выраженная в большей степени, отмечена нами в

молекуле химического аналога I, описанного ранее [9].

Ранее нами были структурно исследованы N-замещенные пиридоны-2, содержащие фенацильную [3] и пара-нитрофенацильную группы у атома азота [8]. Строение II хорошо коррелирует со строением молекул таких фенацилпиридонов. Так, молекулы A и B в структуре II практически тождественны между собой, атомы O(2) и C(7) (пиридоновый фрагмент), а также атомы C(8) и O(8) (ацильный фрагмент) лежат в плоскости соответствующих гетероциклов.

В пиридоновом фрагменте наблюдается чередование длин частично простых и частично двой-

ных связей с образованием квазидиенового структурного фрагмента C(3)=C(4)-C(5)=C(6).

Плоскость гетероцикла ацильного фрагмента практически перпендикулярна плоскости пиридинового фрагмента и составляет $84.34(8)^\circ$ и $86.96(8)^\circ$ для молекул А и В соответственно. Такое взаимное расположение шестичленных циклов в молекуле почти совпадает с аналогичным параметром для фенацилпиридона ($87.55(6)^\circ$) [8] и в среднем на 10° больше, чем в *пара*-нитрофенацилпиридоне [3], где аналогичный угол имеет значение $77.21(1)^\circ$. Таким образом, можно сделать вывод о том, что характер ацильного радикала (фенил, *пара*-нитрофенил и *гамма*-пиридил) практически не влияет на геометрию молекулы.

В строении кристаллов обоих соединений I и II отмечена система межатомных контактов с участием атомов водорода, азота и кислорода (табл. 3 и 4). Расчеты этих контактов проведены с использованием программы PARST-95 [23].

Работа выполнялась при поддержке Нидерландского общества фундаментальных исследований (NWO). Российскому фонду фундаментальных исследований авторы выражают благодарность за финансовую поддержку в оплате лицензии на пользование Кембриджским банком структурных данных (грант № 99-07-90133) и финансирование синтетических работ (грант № 99-03-33076).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бабаев Е.В., Ефимов А.В., Жуков С.Г., Рыбаков В.Б. // Химия гетероцикл. соединений. 1998. № 7. С. 983.
2. Babaev E.V., Bozhenko S.V., Maiboroda D.A. et al. // Bull. Soc. Chim. Belg. 1997. V. 106(11). P. 631.
3. Zhukov S.G., Rybakov V.B., Babaev E.V. et al. // Acta Cryst. C. 1997. V. 53. P. 1909.
4. Бабаев Е.В., Боженко С.В., Жуков С.Г., Рыбаков В.Б. // Химия гетероцикл. соединений. 1997. № 8. С. 1105.
5. Рыбаков В.Б., Жуков С.Г., Бабаев Е.В. и др. // Кристаллография. 1999. Т. 44. № 6. С. 1067.
6. Рыбаков В.Б., Жуков С.Г., Бабаев Е.В. и др. // Кристаллография. 2000. Т. 45. № 1. С. 108.
7. Рыбаков В.Б., Жуков С.Г., Бабаев Е.В. и др. // Кристаллография. 2000. Т. 45. № 2. С. 292.
8. Бабаев Е.В., Рыбаков В.Б., Жуков С.Г., Орлова И.А. // Химия гетероцикл. соединений. 1999. № 4. С. 542.
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. // Координац. химия. 2000. Т. 26. № 9. С. 714.
11. Рыбаков В.Б., Жуков С.Г., Бабаев Е.В., Зонневельд Э. // Кристаллография. 2001. Т. 46. № 3. С. 435.
12. Рыбаков В.Б., Троянов С.И., Бабаев Е.В. и др. // Кристаллография. 2001. Т. 46. № 6. С. 1069.
13. Allen F.H., Kennard O. // Chem. Desing Automation News. 1993. V. 8. № 1. P. 31.
14. Бабаев Е.В., Орлова И.А. // Химия гетероцикл. соединений. 1997. № 4. С. 569.
15. Visser J.W. // J. Appl. Cryst. 1969. V. 2. P. 89.
16. Chernyshev V.V., Schenk Y. // Z. Kristallogr. 1998. B. 213. S. 1.
17. Zlokazov V.B., Chernyshev V.V. // J. Appl. Cryst. 1992. V. 25. P. 447.
18. Dollase W.A. // J. Appl. Cryst. 1986. V. 19. P. 267.
19. Enraf-Nonius CAD-4 Software. Version 5.0. Enraf-Nonius. Delft, The Netherlands, 1989.
20. Farrugia L.J. WinGX98. X-Ray Crystallographic Programs for Windows. University of Glasgow, U.K., 1998.
21. Sheldrick G.M. SHELX97. Program for the Solution and Refinement of Crystal Structures. University of Göttingen, Germany, 1997.
22. Spek A.L. PLUTON96. Molecular Graphics Program. University of Utrecht, The Netherlands, 1996.
23. Nardelli M. // J. Appl. Cryst. 1995. V. 28. P. 659.