

Таблица 1

Характеристики соединений IIIa-в, IVa,в

Соединение	Брутто-формула	Найдено, % Вычислено, %			T _{пл} (разл.), °C	Выход, %
		C	H	N		
IIIa	C ₁₉ H ₂₀ N ₆ O	<u>65.37</u>	<u>5.65</u>	<u>24.04</u>	119...121	50
		65,50	5,78	24,12		
IIIб	C ₁₇ H ₁₈ N ₆ O	<u>60.12</u>	<u>5.42</u>	<u>24.67</u>	>110	30
		60,29	5,36	24,83		
IIIв	C ₂₀ H ₂₂ N ₆ O ₂	<u>63.32</u>	<u>5.76</u>	<u>22.03</u>	95...96	15
		63,47	5,86	22,21		
IVa	C ₁₉ H ₂₀ N ₆ O	<u>65.38</u>	<u>5.65</u>	<u>24.12</u>	>110	80
		65,50	5,78	24,12		
IVв	C ₂₀ H ₂₂ N ₆ O ₂	<u>63.35</u>	<u>5.78</u>	<u>22.14</u>	>130	75
		63,47	5,86	22,21		

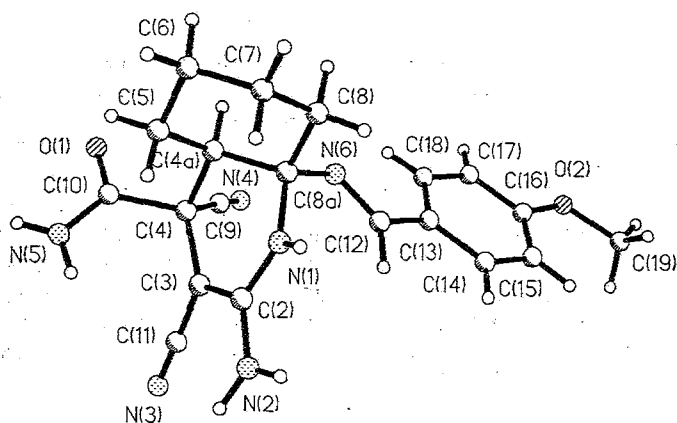


Рис. 1. Молекулярная структура соединения IVb

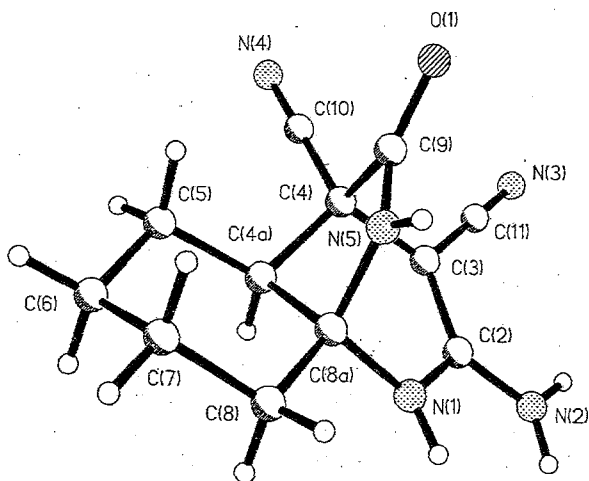


Рис. 2. Молекулярная структура соединения V

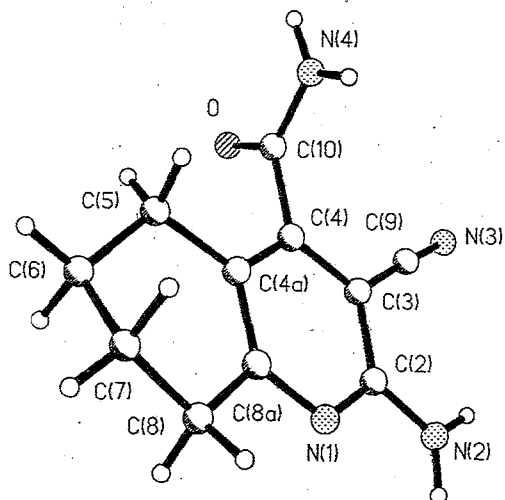


Рис. 3. Молекулярная структура соединения VI

Таблица 2

ИК спектры соединений IIIa—в, IVa,в

Соединение	$\nu, \text{см}^{-1}$		
	$\nu_{\text{C=O}}, \nu_{\text{C=C}}, \nu_{\text{C=N}}, \delta_{\text{NH}_2}$	$\nu_{\text{C}\equiv\text{N}}$	$\nu_{\text{NH}_2}, \nu_{\text{N-H}}$
IIIa	1695, 1640, 1590	2260	3575, 3490, 3370, 3260, 3150
IIIб	1695, 1645, 1580	2255	3525, 3405, 3340, 3270, 3150
IIIв	1695, 1635, 1600, 1590	2255	3590, 3495, 3380, 3280, 3160
IVa	1730, 1670, 1620, 1600	2265, 2190	3590, 3510, 3390, 3270, 3100
IVв	1730, 1670, 1630, 1600	2240, 2180	3490, 3340, 3260

Таблица 3

Координаты неводородных атомов ($\times 10^4$) и коэффициенты эквивалентного изотропного смещения ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) соединения IVв

Атом	x	y	z	U_{eq}
O(1)	5064(3)	9699(2)	1042(2)	35(1)
O(2)	2134(3)	7391(2)	5932(2)	47(1)
O(3)	3409(4)	2630(3)	6540(3)	94(2)
O(4)	765(5)	9740(4)	6989(3)	74(3)
N(1)	2270(3)	11594(3)	2311(2)	27(1)
N(2)	643(4)	11400(3)	1311(2)	32(2)
N(3)	1070(3)	9206(3)	226(2)	42(2)
N(4)	3776(3)	8406(3)	2243(2)	42(2)
N(5)	3661(4)	10510(3)	182(2)	33(2)
N(6)	3277(3)	10389(2)	3317(2)	28(1)
C(2)	1710(4)	11120(3)	1634(2)	25(2)
C(3)	2247(4)	10380(3)	1289(2)	24(2)
C(4)	3487(4)	10172(3)	1585(2)	24(2)
C(4a)	4092(4)	10979(3)	2205(2)	26(2)
C(5)	4413(4)	11886(3)	1772(3)	31(2)
C(6)	4980(5)	12656(4)	2388(3)	39(2)
C(7)	4223(5)	12965(3)	2943(3)	40(2)
C(8)	3891(4)	12066(3)	3385(3)	33(2)
C(8a)	3342(4)	11251(3)	2796(2)	26(2)
C(9)	3657(4)	9187(4)	1983(3)	29(2)
C(10)	4141(4)	10098(3)	891(3)	26(2)
C(11)	1591(4)	9747(3)	706(3)	30(2)
C(12)	2354(5)	10187(3)	3500(2)	29(2)
C(13)	2267(4)	9406(3)	4092(2)	29(2)
C(14)	1323(4)	9374(3)	4421(3)	34(2)
C(15)	1243(4)	8716(3)	5036(3)	36(2)
C(16)	2112(4)	8066(3)	5319(3)	34(2)
C(17)	3048(5)	8062(4)	4976(3)	39(2)
C(18)	3116(4)	8727(4)	4375(3)	38(2)
C(19)	1195(6)	7396(4)	6315(4)	59(3)
C(20)	3035(6)	2105(6)	5962(4)	76(3)
C(21)	3692(7)	1297(8)	5757(5)	80(4)
C(22)	1913(9)	2342(8)	5385(8)	80(6)
C(23)	1613(5)	9834(4)	7499(4)	59(3)
C(24)	2732(10)	9616(8)	7320(6)	82(6)
C(25)	1578(6)	10127(4)	8335(4)	62(3)

Длины связей и валентные углы в молекуле соединения IVb

Связь	Длина, Å	Угол	ω , град.	Угол	ω , град.
O(1)—C(10)	1,226(6)	C(16)—O(2)—C(19)	116,8(4)	N(1)—C(8a)—C(8)	109,3(3)
O(2)—C(16)	1,374(5)	C(2)—N(1)—C(8a)	122,3(4)	N(6)—C(8a)—C(8)	105,8(3)
O(2)—C(19)	1,439(9)	C(8a)—N(6)—C(12)	119,3(4)	C(4a)—C(8a)—C(8)	110,5(4)
O(3)—C(20)	1,206(8)	N(1)—C(2)—N(2)	117,3(4)	N(4)—C(9)—C(4)	176,0(4)
O(4)—C(23)	1,187(7)	N(1)—C(2)—C(3)	119,9(4)	O(1)—C(10)—N(5)	124,8(5)
N(1)—C(2)	1,346(5)	N(2)—C(2)—C(3)	122,8(4)	O(1)—C(10)—C(4)	118,7(3)
N(1)—C(8a)	1,450(5)	C(2)—C(3)—C(4)	122,1(3)	N(5)—C(10)—C(4)	116,4(4)
N(2)—C(2)	1,347(6)	C(2)—C(3)—C(11)	118,9(4)	N(3)—C(11)—C(3)	178,2(5)
N(3)—C(11)	1,166(6)	C(4)—C(3)—C(11)	118,7(4)	N(6)—C(12)—C(13)	121,8(4)
N(4)—C(9)	1,147(6)	C(3)—C(4)—C(4a)	111,6(3)	C(12)—C(13)—C(14)	119,0(4)
N(5)—C(10)	1,321(5)	C(3)—C(4)—C(9)	109,9(3)	C(12)—C(13)—C(18)	123,0(5)
N(6)—C(8a)	1,478(5)	C(4a)—C(4)—C(9)	109,8(3)	C(14)—C(13)—C(18)	117,9(4)
N(6)—C(12)	1,267(7)	C(3)—C(4)—C(10)	114,6(3)	C(13)—C(14)—C(15)	121,5(4)
C(2)—C(3)	1,399(6)	C(4a)—C(4)—C(10)	107,1(3)	C(14)—C(15)—C(16)	119,4(5)
C(3)—C(4)	1,509(6)	C(9)—C(4)—C(10)	103,5(3)	O(2)—C(16)—C(15)	124,5(5)
C(3)—C(11)	1,406(6)	C(4)—C(4a)—C(5)	112,7(3)	O(2)—C(16)—C(17)	115,5(4)
C(4)—C(4a)	1,576(5)	C(4)—C(4a)—C(8a)	109,4(4)	C(15)—C(16)—C(17)	120,0(4)
C(4)—C(9)	1,493(6)	C(5)—C(4a)—C(8a)	111,5(3)	C(16)—C(17)—C(18)	119,7(5)
C(4)—C(10)	1,560(7)	C(4a)—C(5)—C(6)	111,3(4)	C(13)—C(18)—C(17)	121,5(5)
C(4a)—C(5)	1,530(6)	C(5)—C(6)—C(7)	111,1(4)	O(3)—C(20)—C(21)	120,9(6)
C(4a)—C(8a)	1,542(7)	C(6)—C(7)—C(8)	109,9(4)	O(3)—C(20)—C(22)	120,2(7)
C(5)—C(6)	1,522(6)	C(7)—C(8)—C(8a)	113,2(4)	C(21)—C(20)—C(22)	118,7(7)
C(6)—C(7)	1,516(8)	N(1)—C(8a)—N(6)	115,0(4)	O(4)—C(23)—C(24)	121,4(7)
C(7)—C(8)	1,535(7)	N(1)—C(8a)—C(4a)	108,2(3)	O(4)—C(23)—C(25)	120,1(6)
C(8)—C(8a)	1,534(6)	N(6)—C(8a)—C(4a)	108,0(3)	C(24)—C(23)—C(25)	118,4(6)
C(12)—C(13)	1,476(6)				
C(13)—C(14)	1,391(7)				
C(13)—C(18)	1,390(6)				
C(14)—C(15)	1,387(7)				
C(15)—C(16)	1,381(7)				
C(16)—C(17)	1,395(8)				
C(17)—C(18)	1,373(7)				
C(20)—C(21)	1,45(1)				
C(20)—C(22)	1,52(1)				
C(23)—C(24)	1,50(2)				
C(23)—C(25)	1,467(9)				

присоединении образуется новая связь C—N в *цис*-позиции по отношению к карбамоильной группе. Только в этом случае возможны соблюдения стереохимических особенностей соединений IV и V (рис. 1, 2). При образовании соединений IV и V определяющей стадией, по-видимому, является гетеролитический разрыв связи C(4)—C(5) соединения III. Соединение VI не получается из соединений IVa,в даже при проведении реакции в сильноосновной среде, вероятно, потому, что потенциально уходящие группы (H и N=CHAg или H и C≡N) не могут отщепляться по

Таблица 5

Координаты неводородных атомов ($\times 10^4$) и коэффициенты эквивалентного изотропного смещения ($\text{Å}^2 \times 10^3$) соединения V

Атом	x	y	z	U_{eq}
O(1)	4048(2)	3339(1)	941(1)	40(1)
N(1)	7058(2)	8605(1)	2944(1)	34(1)
N(2)	9755(2)	8199(2)	4236(1)	43(1)
N(3)	7374(2)	3394(2)	4509(1)	69(1)
N(4)	1179(2)	2026(2)	3089(1)	59(1)
N(5)	4785(2)	6437(1)	1174(1)	31(1)
C(2)	7694(2)	7488(2)	3586(1)	31(1)
C(3)	6212(2)	5692(2)	3532(1)	33(1)
C(4)	3958(2)	5030(2)	2696(1)	30(1)
C(4a)	3296(2)	6636(2)	2640(1)	31(1)
C(5)	994(2)	6059(2)	1891(1)	40(1)
C(6)	653(3)	7690(2)	1457(2)	49(1)
C(7)	2224(2)	8688(2)	803(1)	45(1)
C(8)	4518(2)	9386(2)	1577(1)	37(1)
C(8a)	4962(2)	7848(2)	2076(1)	30(1)
C(9)	4216(2)	4762(2)	1474(1)	30(1)
C(10)	2397(2)	3340(2)	2923(1)	37(1)
C(11)	6866(2)	4437(2)	4073(1)	41(1)

Таблица 6

Длины связей и валентные углы в молекуле соединения V

Связь	Длина, Å	Угол	ω , град.	Угол	ω , град.
O(1)—C(9)	1,224(2)	C(2)—N(1)—C(8a)	120,2(1)	C(5)—C(4a)—C(8a)	112,6(1)
N(1)—C(2)	1,360(2)	C(8a)—N(5)—C(9)	112,8(1)	C(4a)—C(5)—C(6)	112,1(1)
N(1)—C(8a)	1,452(1)	N(1)—C(2)—N(2)	117,1(1)	C(5)—C(6)—C(7)	111,8(2)
N(2)—C(2)	1,340(2)	N(1)—C(2)—C(3)	119,3(1)	C(6)—C(7)—C(8)	110,5(1)
N(3)—C(11)	1,146(2)	N(2)—C(2)—C(3)	123,6(1)	C(7)—C(8)—C(8a)	112,0(1)
N(4)—C(10)	1,134(2)	C(2)—C(3)—C(4)	117,9(1)	N(1)—C(8a)—N(5)	110,6(1)
N(5)—C(8a)	1,469(2)	C(2)—C(3)—C(11)	120,7(1)	N(1)—C(8a)—C(4a)	107,9(1)
N(5)—C(9)	1,342(2)	C(4)—C(3)—C(11)	120,6(1)	N(5)—C(8a)—C(4a)	100,4(1)
C(2)—C(3)	1,390(2)	C(3)—C(4)—C(4a)	110,1(1)	N(1)—C(8a)—C(8)	110,4(1)
C(3)—C(4)	1,523(2)	C(3)—C(4)—C(9)	104,6(1)	N(5)—C(8a)—C(8)	112,4(1)
C(3)—C(11)	1,403(2)	C(4a)—C(4)—C(9)	101,2(1)	C(4a)—C(8a)—C(8)	114,8(1)
C(4)—C(4a)	1,543(2)	C(3)—C(4)—C(10)	113,1(1)	O(1)—C(9)—N(5)	128,4(1)
C(4)—C(9)	1,549(2)	C(4a)—C(4)—C(10)	114,4(1)	O(1)—C(9)—C(4)	126,5(1)
C(4)—C(10)	1,465(2)	C(9)—C(4)—C(10)	112,4(1)	N(5)—C(9)—C(4)	105,1(1)
C(4a)—C(5)	1,524(2)	C(4)—C(4a)—C(5)	113,6(1)	N(4)—C(10)—C(4)	179,4(1)
C(4a)—C(8a)	1,545(2)	C(4)—C(4a)—C(8a)	97,3(1)	N(3)—C(11)—C(3)	179,1(1)
C(5)—C(6)	1,525(3)				
C(6)—C(7)	1,527(3)				
C(7)—C(8)	1,516(2)				
C(8)—C(8a)	1,516(2)				

Таблица 7

Координаты неводородных атомов ($\times 10^4$) и коэффициенты эквивалентного изотропного смещения ($\text{Å}^2 \times 10^3$) соединения VI

Атом	x	y	z	$U_{(eq)}$
O	6861(2)	7600(1)	6886(2)	49(1)
N(1)	4470(2)	5489(1)	1875(2)	31(1)
N(2)	6950(2)	5016(1)	2207(3)	43(1)
N(3)	9691(2)	5850(1)	6341(3)	56(1)
N(4)	6304(2)	6521(1)	8431(2)	44(1)
C(2)	6036(2)	5473(1)	2879(2)	29(1)
C(3)	6668(2)	5913(1)	4573(2)	29(1)
C(4)	5642(2)	6374(1)	5173(2)	29(1)
C(4a)	4016(2)	6399(1)	4113(2)	31(1)
C(5)	2875(3)	6907(2)	4708(3)	46(1)
C(6)	1289(3)	7059(2)	3162(4)	55(1)
C(7)	645(3)	6276(2)	2075(4)	60(1)
C(8)	1762(2)	5909(2)	1223(3)	41(1)
C(8a)	3494(2)	5937(1)	2472(2)	30(1)
C(9)	8349(2)	5895(1)	5586(3)	36(1)
C(10)	6329(2)	6888(1)	6928(2)	31(1)

Таблица 8

Длины связей и валентные углы в молекуле соединения VI

Связь	Длина, Å	Угол	ω , град.	Угол	ω , град.
O—C(10)	1,223(2)	C(2)—N(1)—C(8a)	119,7(2)	C(5)—C(4a)—C(8a)	121,6(2)
N(1)—C(2)	1,342(2)	N(1)—C(2)—N(2)	116,9(2)	C(4a)—C(5)—C(6)	113,0(2)
N(1)—C(8a)	1,347(3)	N(1)—C(2)—C(3)	120,6(2)	C(5)—C(6)—C(7)	112,3(2)
N(2)—C(2)	1,346(3)	N(2)—C(2)—C(3)	122,4(2)	C(6)—C(7)—C(8)	112,5(2)
N(3)—C(9)	1,140(3)	C(2)—C(3)—C(4)	119,0(2)	C(7)—C(8)—C(8a)	114,0(2)
N(4)—C(10)	1,322(3)	C(2)—C(3)—C(9)	118,9(2)	N(1)—C(8a)—C(4a)	123,6(2)
C(2)—C(3)	1,415(2)	C(4)—C(3)—C(9)	122,1(2)	N(1)—C(8a)—C(8)	114,9(2)
C(3)—C(4)	1,395(3)	C(3)—C(4)—C(4a)	120,3(2)	C(4a)—C(8a)—C(8)	121,6(2)
C(3)—C(9)	1,432(3)	C(3)—C(4)—C(10)	119,0(2)	N(3)—C(9)—C(3)	176,8(2)
C(4)—C(4a)	1,396(2)	C(4a)—C(4)—C(10)	120,6(2)	O—C(10)—N(4)	124,2(2)
C(4)—C(10)	1,515(2)	C(4)—C(4a)—C(5)	121,6(2)	O—C(10)—C(4)	119,7(2)
C(4a)—C(5)	1,514(4)	C(4)—C(4a)—C(8a)	116,8(2)	N(4)—C(10)—C(4)	116,1(2)
C(4a)—C(8a)	1,397(3)				
C(5)—C(6)	1,514(3)				
C(6)—C(7)	1,486(4)				
C(7)—C(8)	1,522(4)				
C(8)—C(8a)	1,509(2)				

механизму E2, так как находятся в *гош*-положении друг к другу, а протеканию процесса по анионному механизму препятствует более быстрый процесс внутримолекулярного нуклеофильного замещения с образованием соединения V. Причиной образования пиридина VI, возможно, является конкурирующее с гетеролитическим расщеплением циклоэлиминирование (ретрореакция Дильса—Альдера) из таутомерной формы Б соединения III с образованием интермедиата i_2 . В интермедиате i_2 , по-видимому, должно протекать *син*-элиминирование цианистого водорода. В пользу этого свидетельствует более низкий выход соединения VI при проведении реакции в толуоле в отличие от реакции в ацетонитриле. Таким образом, для образования соединения VI необходимы совершенно противоположные условия: для первой стадии — неполярный растворитель, для второй — полярный, так как элиминирование цианистого водорода, скорее всего, протекает по анионному механизму (механизм E1cB). Сравнительно невысокий выход соединения VI при проведении реакции в ацетонитриле объясняется возможностью конкурирующего процесса — ацетонитрил как полярный растворитель способствует гетеролитическому разрыву связи C(4)—C(5) соединений IIIа—в. Низкий выход соединения VI при проведении реакции в толуоле, возможно, объясняется тем, что вторая стадия реакции — элиминирование цианистого водорода — протекает с очень малой скоростью.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

ИК спектры сняты на приборе UR-20 для образцов в вазелиновом масле. Параметры элементарных ячеек и интенсивности отражений для рентгеноструктурного анализа соединений V и VI измерены на автоматическом четырехкружном дифрактометре Siemens P3/PC (λ MoK α , графитовый монохроматор, $\theta/2\theta$ -сканирование), а соединения IV — на автоматическом четырехкружном дифрактометре Syntex P21 (λ MoK α , графитовый монохроматор, $\theta/2\theta$ -сканирование). Структуры исследуемых соединений расшифрованы прямым методом и уточнены полноматричным методом наименьших квадратов в анизотропном приближении для неводородных атомов. Атомы водорода, локализованные объективно в разностном Фурье-синтезе, уточнены в изотропном приближении. Все расчеты проведены по программе SHELXTL PLUS (версия PC). Координаты атомов, длины связей, валентные углы и тепловые параметры депонированы в Кембриджском центре кристаллографических данных. Чистоту синтезированных соединений, а также степень завершения реакций устанавливали методом ТСХ (Silufol UV-254).

5-Арил-1,7-тетраметилен-3-имино-4,8-дициано-2,6-диазабцикло[2.2.2]октан-8-карбоксамиды (IIIа—в). А. К 10 мл концентрированного раствора водного аммиака добавляют 3 ммоль спирта Ia,в и перемешивают до окончания реакции (5...10 мин). Осадок отфильтровывают, промывают этилацетатом, сушат в вакууме.

Б. Аналогично получают соединения IIIа—в из амидов IIа—в.

6-Амино-2-арилденамино-2,3-тетраметилен-4,5-дициано-1,2,3,4-тетрагидропиридин-4-карбоксамиды (IVа,в). В 10 мл ацетона растворяют 3 ммоль бцикла IIIа,в и выдерживают 2 ч. Образующийся осадок отделяют, промывают, сушат в вакууме до постоянной массы.

Рентгеноструктурные исследования соединения IVв. Полученные из ацетона прозрачные бесцветные кристаллы моноκлинные, сольватированы молекулами ацетона в соотношении 1 : 2, при -80°C : $a = 12,228(3)$, $b = 13,641(3)$, $c = 16,754(4)$ Å, $\beta = 103,42(1)^\circ$, $V = 2718,8(2)$ Å³, $d_{\text{выч}} = 1,214$ г/см³, пространственная группа P2₁/n, $Z = 4$. Было измерено 2716 отражений, $\theta_{\text{max}} = 25^\circ$. Окончательные значения факторов расхожимости $R = 0,032$ по 2365 отражениям $I > 2\sigma(I)$ и $R_w = 0,032$ по всем 2716 независимым отражениям.

3-Амино-6-оксо-1,8-тетраметилен-2,7-диазабцикло[3.2.1]окта-3-ен-4,5-дикарбонитрил (V). А. Суспензию 3 ммоль соединения IIIа—в в 10 мл изопропилового спирта нагревают до кипения. Реакционную массу охлаждают, осадок отфильтровывают, промывают изопропиловым спиртом, сушат в вакууме. Получают 0,72 г (99%) белого кристаллического порошка, $T_{\text{пл}} > 240^\circ\text{C}$ (разл.). Найдено, %: C 59,12; H 5,27; N 28,65. C₁₂H₁₃N₅O. Вычислено, %: C 59,25; H 5,38; N 28,79. ИК спектр: 3450, 3330, 3230, 3200 (ν_{NH_2} , ν_{NH}); 2275, 2195 ($\nu_{\text{C}\equiv\text{N}}$); 1695, 1630, 1570 см⁻¹ ($\nu_{\text{C=O}}$, ν_{NH_2} , $\nu_{\text{C=C}}$).

Рентгеноструктурные исследования соединения V. Полученные из изопропилового спирта прозрачные бесцветные кристаллы триклинные, при 20 °С $a = 7,150(2)$, $b = 8,035(3)$, $c = 12,096(4)$ Å, $\alpha = 93,45(2)^\circ$, $\beta = 104,71(2)^\circ$, $\gamma = 113,74(2)^\circ$, $V = 604,8(8)$ Å³, $d_{\text{выч}} = 1,342$ г/см³, пространственная группа $P\bar{1}$, $Z = 2$. Измерено 2337 отражений, $\theta_{\text{max}} = 26^\circ$. Окончательные значения факторов расходимости $R = 0,032$ по 1983 отражениям с $I > 2\sigma(I)$ и $R_w = 0,032$ по всем 2337 независимым отражениям.

2-Амино-3-циано-5,6-тетраметиленипирidin-4-карбоксамид (VI). А. Растворяют в 10 мл ацетонитрила 0,35 г (1 ммоль) соединения Ша и выдерживают раствор 5 сут. Образовавшийся осадок отфильтровывают, промывают охлажденным ацетонитрилом, сушат в вакууме. Получают 20 мг (10%) розовых кристаллов, $T_{\text{пл}} > 230$ °С (разл.). Найдено, %: С 60,95; Н 5,46; N 25,82. С₁₁Н₁₂N₄O. Вычислено, %: С 61,1; Н 5,59; N 25,91. ИК спектр: 3420, 3375, 3320, 3240 (ν_{NH_2}); 2230 ($\nu_{\text{C}\equiv\text{N}}$); 1680, 1650, 1635 см⁻¹ ($\nu_{\text{C}=\text{O}}$, δ_{NH_2} , $\nu_{\text{C}=\text{N}}$, $\nu_{\text{C}=\text{C}}$).

После концентрирования фильтрата получают 0,08 г (40%) соединения V.

Б. В 50 мл абсолютного толуола растворяют при нагревании 5 ммоль соединения Ша, в и кипятят 10 ч с обратным холодильником. Охлаждают реакционную массу, осадок отфильтровывают, промывают этилацетатом. Очистку проводят переосаждением водой из раствора в диметилсульфоксиде. Получают 25 мг (2%) розовых кристаллов.

Рентгеноструктурные исследования соединения VI. Кристаллы соединения VI, полученные из ацетонитрила, моноклинные, при 20 °С: $a = 9,084(2)$, $b = 15,698(3)$, $c = 7,856(4)$ Å, $\beta = 112,11(2)^\circ$, $V = 1038(1)$ Å³, $d_{\text{выч}} = 1,390$ г/см³, пространственная группа $P2_1/c$, $Z = 2$. Измерено 2070 отражений, $\theta_{\text{max}} = 26^\circ$. Окончательные значения факторов расходимости $R = 0,040$ по 1503 отражениям с $I > 2\sigma(I)$ и $R_w = 0,040$ по всем 2070 независимым отражениям.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Каюков Я. С., Насакин О. Е., Урман Я. Г., Хрусталеv В. Н., Нестеров В. Н., Антипин М. Ю., Лыщиков А. Н., Лукин П. М. // ХГС. — 1996. — № 10. — С. 1395.

Чувашский государственный университет
им. И. Н. Ульянова, Чебоксары 428015

Поступило в редакцию 31.10.96