

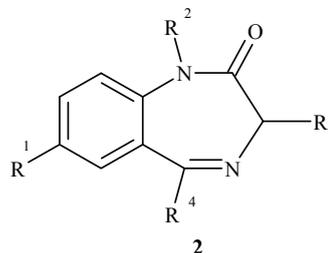
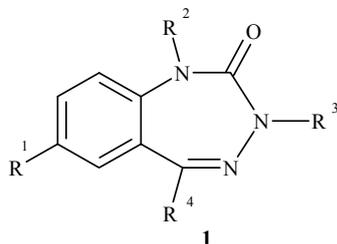
С. В. Власюк, В. И. Павловский, С. А. Андронати,
М. Гданец^а, Ю. А. Симонов^б

**СТРОЕНИЕ 7-БРОМ-5-ФЕНИЛ-1,2-ДИГИДРО-3Н-
1,3,4-БЕНЗТРИАЗЕПИНА-2-ОНА**

Термолизом *син*-4-фенилсемикарбазона 2-аминобензофенона получен 7-бром-5-фенил-1,2-дигидро-3Н-1,4-бензтриазепин-2-он. Его молекулярная и кристаллическая структура установлена методом рентгеноструктурного анализа. Характер водородных связей между молекулами соединения в растворе и в кристаллическом состоянии определен методами ИК спектроскопии и рентгеноструктурного анализа.

Ключевые слова: бензтриазепин, семикарбазон 2-аминобензофенона, водородные связи, ИК спектроскопия, УФ спектр, рентгеноструктурный анализ.

1,2-Дигидро-3Н-1,3,4-бензтриазепин-2-оны **1** изучены менее подробно, чем их гетероаналоги 1,2-дигидро-3Н-1,4-бенздиазепин-2-оны **2**, среди которых обнаружены соединения с ценными фармакологическими свойствами [1].

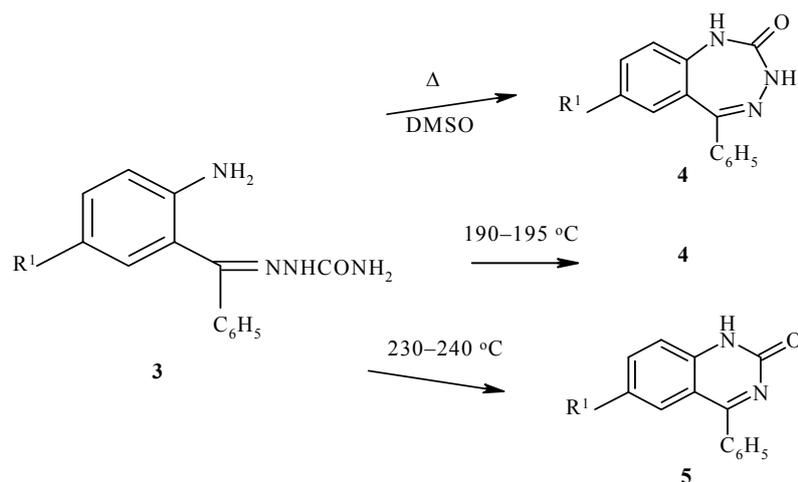


Перспективности производных 1,3,4-бензтриазепина как биологически активных соединений, в том числе антиконвульсантов и антитромбоцитарных средств, посвящены работы [2, 3].

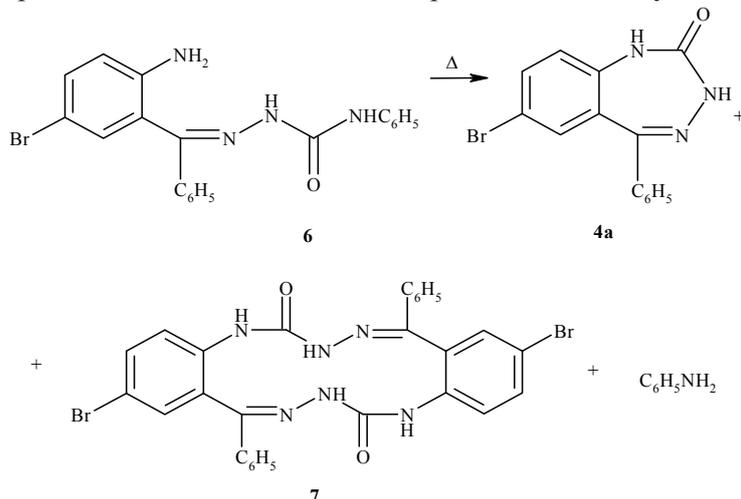
Один из методов получения 1,2-дигидро-3Н-1,3,4-бензтриазепин-2-онов заключается в нагревании семикарбазонов 2-аминобензофенонов **3** в растворителе либо расплаве (при 190–195 °С) [1, 4], однако при температуре 230–240 °С [1, 4] образуются не дигидробензтриазепиноны **4**, а хиназолиноны-2 **5**:

При 240–250 °С соединения **3** циклизируются в дигидробензтриазепиноны-2 **4** [5, 6], Однако авторы работ не указывают конфигурацию соединений **3**.

Исходя из *син*-4-фенилсемикарбазона 2-амино-5-бромбензофенона **6** термолизом в расплаве (190–200 °С) нами получены три соединения. Одно из них идентифицировано как 7-бром-5-фенил-1,2-дигидро-3Н-1,3,4-бензтриазепин-2-он **4а**; второму, по данным элементного анализа, ИК и



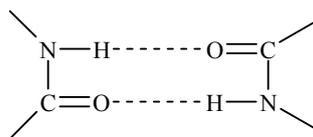
масс-спектропии, приписано строение 7,16-дибром-5,14-дифенил-1,2,3,10,11,12-гексагидрибензо[*f,m*]-1,3,4,10,12,13-гексаазаиклотетрадецин-2,11-диона (**7**). Третьим продуктом реакции является анилин, который конденсировался на охлаждаемом пальце реакционного сосуда.



Данное сообщение посвящено структуре бензтриазепинона **4a**; строению и свойствам дибензогексаазагетероцикла **7** будет посвящена наша дальнейшая публикация.

УФ спектр соединения **4a** содержит три полосы с максимумами при 224, 250 и 302 нм. Первая (наиболее интенсивная) и вторая полосы могут быть отнесены к ароматическим хромофорам, третья — к азометиновой связи, сопряженной с бензогруппой.

1,2-Дигидро-3Н-1,4-бенздиазепин-2-оны в кристаллическом состоянии и относительно концентрированных растворах в CCl_4 образуют циклические димеры за счет водородных связей между вторичными амидными группировками [7]:



Особенности ИК спектров соединений **4** позволяют предположить, что водородные связи образуют и молекулы вещества **4a**, в ИК спектре раствора в CCl_4 которого при концентрации $3 \cdot 10^{-3}$ моль/л имеются две полосы поглощения карбонильной группы при 1725 и 1700 см^{-1} , полосы свободной и связанной групп NH при 3370 , 3210 и 3125 см^{-1} (рис. 1). При разбавлении раствора до $5 \cdot 10^{-5}$ моль/л интенсивность полос при 1725 и 3370 см^{-1} увеличивается. Полосы при 3125 , 3210 и 1700 см^{-1} практически исчезают. Наблюдаемые изменения, в принципе, повторяют изменения в спектрах 1,2-дигидро-3H-1,4-бензодиазепин-2-онов при разбавлении их растворов в CCl_4 [7].

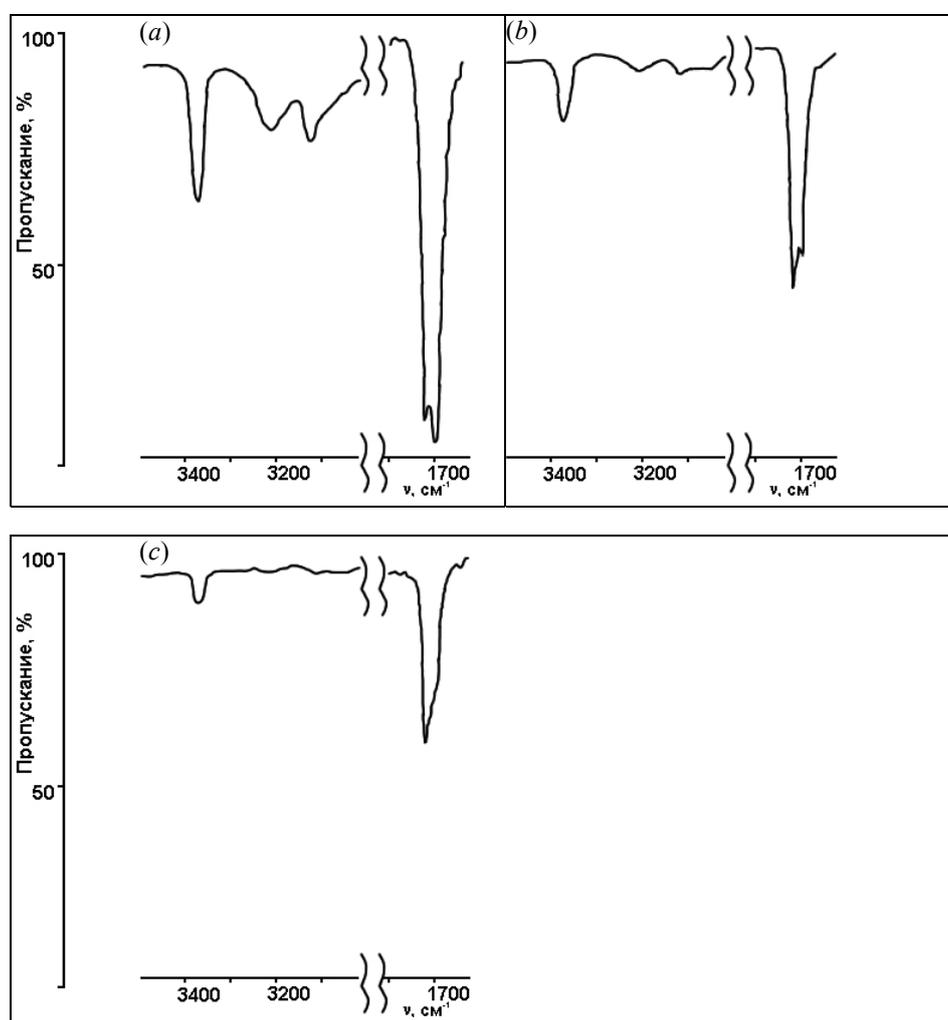


Рис. 1. ИК спектры 7-бром-5-фенил-1,2-дигидро-3H-1,3,4-бензотриазепин-2-она при различных концентрациях: *a* — $C = 3 \cdot 10^{-3}$ моль/л; *b* — $C = 3 \cdot 10^{-3}$ моль/л; *c* — $C = 5 \cdot 10^{-5}$ моль/л в CCl_4

Масс-спектр соединения **4a** соответствует описанному в статье [4]; его кристаллическая и молекулярная структура изучена методом рентгеноструктурного анализа.

На рис. 2 представлен фрагмент упаковки молекул в кристалле. Характерным для упаковки является образование димеров, связанных водородными связями типа $N_{(1)}-H...O_{(1)}$. Параметры водородных связей $N_{(1)}...O_{(1)}^* = 2.931 \text{ \AA}$, $H...O_{(1)} = 2.09 \text{ \AA}$, угол при атоме водорода 168° (образуется восьмичленный псевдоцикл). Подобная система водородных связей в кристалле, характерная для 1,2-дигидро-3Н-1,4-бенздиазепин-2-онов, описана как тип *A* в работе [8]. Такой тип связи обнаружен для нитразепама [9], феназепама [10], а также в случае 7-хлор-3,5-дифенил-1,2-дигидро-3Н-1,3,4-бензтриазепин-2-она **1a** [11].

Между образованными в кристалле centrosимметричными димерами имеют место лишь ван-дер-ваальсовские взаимодействия. Донорная группа $N_{(3)}-H$ в системе водородных связей участия не принимает, так как экранирована фенильным кольцом соседней молекулы.

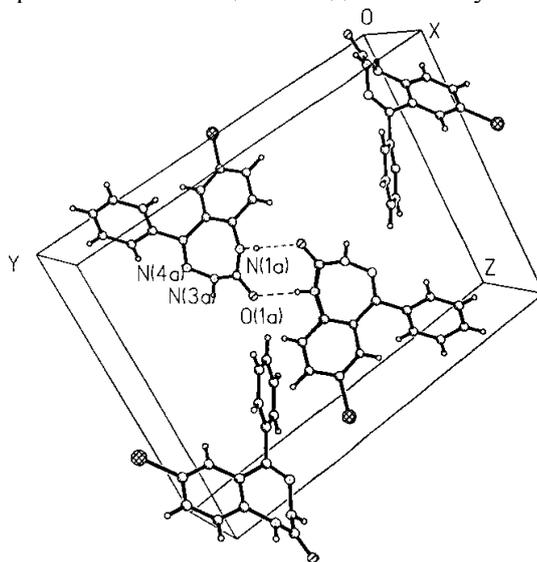


Рис.2. Фрагмент упаковки молекул 7-бром-5-фенил-1,2-дигидро-3Н-1,3,4-бензтриазепин-2-она в кристалле

На рис. 3 представлена молекулярная структура соединения **4a**. Характерными составными частями остова этой молекулы являются существенно неплоский 7-членный гетероцикл (В), сопряженная с ним бромбензогруппа (А) и фенильный радикал в положении 5 гетероцикла (С). Для гетероцикла В характерна конформация псевдованны с расположением атомов в трех взаимопересекающихся плоскостях: $N_{(1)}C_{(2)}N_{(4)}C_{(5)}$, $N_{(1)}C_{(5)}C_{(10)}C_{(11)}$ и $C_{(2)}N_{(3)}N_{(4)}$. При этом от первого фрагмента атомы двух других отклонены в одну сторону. В табл. 1 приведены некоторые параметры, характеризующие молекулу **4a** в сопоставлении с 3-фенильным аналогом **1a** [11] и нитразепамом **2b** [9].

Сравнительные геометрические характеристики соединений: **4a**, 7-хлор-3,5-дифенил-1,2-дигидро-3H-1,3,4-бензтриазепин-2-она **1a** [11] и нитразепама **2b** [9]

Диэдральный угол между плоскостями, град.	4a	1a	2b
Циклы А и С	116.5	116.8	118.2
N(1)—C(2)—N(4)—C(5) и N(1)—C(5)—C(10)—C(11)	35.6	35.9	32.3
N(1)—C(2)—N(4)—C(5) и C(2)—N(3)—N(4)	42.8	55.8	60.3
Торсионные углы и значение ΔC_s (град.) в 7-членном цикле			
	4a	1a	2b
C(10)—N(1)—C(2)—N(3)	-31.6	-25.7	-0.9
N(1)—C(2)—N(3)—N(4)	-41.1	-56.7	-71.2
C(2)—N(3)—C(4)—C(5)	60.4	75.0	72.9
N(3)—N(4)—C(5)—C(6)	-1.5	-2.7	-2.2
N(4)—C(5)—C(11)—C(10)	-36.0	-45.0	-40.0
C(5)—C(11)—C(10)—N(1)	0.6	5.5	0.1
C(11)—C(10)—N(1)—C(2)	51.5	53.0	40.1
ΔC_s	20.67	17.6	1.8

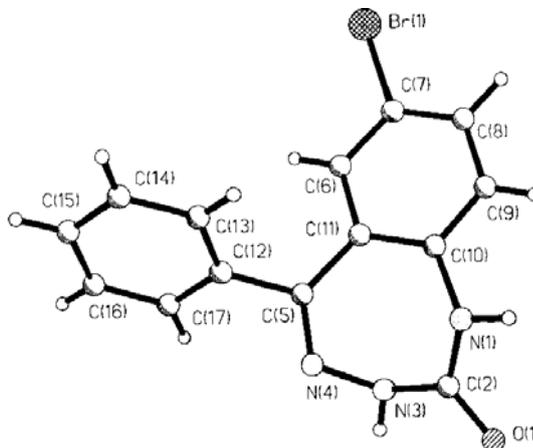


Рис.3. Молекулярная структура
7-бром-5-фенил-1,2-дигидро-3H-1,3,4-бензтриазепин-2-она

Мерой искажения ванны является критерий

$$\Delta C_s = \{[T_0^2 + \sum (T_i + T_i^*)^2]/4\}^{1/2},$$

где T_0 — торсионный угол по связи C(10)—C(11). Этот критерий показывает степень отступления 7-членного цикла от симметрии C_s . В молекуле соединения **4a** $\Delta C = 20.67^\circ$.

Анализ торсионных углов показывает, что в случае 1,2-дигидро-

3Н-1,3,4-бензтриазепинов **1** ($R^1 = \text{Cl}$, $R^2 = \text{H}$, $R^3 = R^4 = \text{C}_6\text{H}_5$) [11] и **4a**, наблюдается существенное искажение ванны. Оно связано с двумя обстоятельствами: (1) значительной твистованностью фрагмента $\text{N}_{(1)}\text{C}_{(2)}\text{N}_{(4)}\text{C}_{(5)}$ (в соединении **4a** выход атомов из средней плоскости от +0.090 до -0.076 Å, в нитразепаме практически нулевой); (2) отклонением ванны от C_s -симметрии: в случае нитразепама величина ΔC_s меньше 2° , в соединении **4a** и его 3-фенильном производном — около 20° .

Т а б л и ц а 2

Межатомные расстояния d (Å) в молекуле соединений **4a** и 7-хлор-3,5-дифенил-1,2-дигидро-3Н-1,3,4-бензтриазепин-2-она **1a** [11]

Связь	4a	1a
$\text{O}_{(1)}-\text{C}_{(2)}$	1.221(3)	1.215(5)
$\text{Cl}_{(1)}-\text{C}_{(7)}$		1.739(4)
$\text{Br}_{(1)}-\text{C}_{(7)}$	1.899(3)	
$\text{N}_{(1)}-\text{C}_{(2)}$	1.368(3)	1.367(5)
$\text{N}_{(1)}-\text{C}_{(10)}$	1.413(3)	1.408(5)
$\text{C}_{(2)}-\text{N}_{(3)}$	1.376(4)	1.411(6)
$\text{N}_{(3)}-\text{N}_{(4)}$	1.408(3)	1.422(4)
$\text{N}_{(4)}-\text{C}_{(5)}$	1.283(3)	1.295(5)
$\text{C}_{(5)}-\text{C}_{(11)}$	1.481(3)	1.479(5)
$\text{C}_{(5)}-\text{C}_{(12)}$	1.488(4)	1.480(5)
$\text{C}_{(6)}-\text{C}_{(7)}$	1.377(4)	1.371(6)
$\text{C}_{(6)}-\text{C}_{(11)}$	1.403(4)	1.398(5)
$\text{C}_{(7)}-\text{C}_{(8)}$	1.379(4)	1.383(7)
$\text{C}_{(8)}-\text{C}_{(9)}$	1.379(4)	1.366(6)
$\text{C}_{(9)}-\text{C}_{(10)}$	1.387(4)	1.397(6)
$\text{C}_{(10)}-\text{C}_{(11)}$	1.393(4)	1.386(6)
$\text{C}_{(12)}-\text{C}_{(13)}$	1.387(4)	
$\text{C}_{(12)}-\text{C}_{(17)}$	1.392(4)	
$\text{C}_{(13)}-\text{C}_{(14)}$	1.383(4)	
$\text{C}_{(14)}-\text{C}_{(15)}$	1.372(5)	
$\text{C}_{(15)}-\text{C}_{(16)}$	1.374(5)	
$\text{C}_{(16)}-\text{C}_{(17)}$	1.384(4)	

В табл. 2 и 3 приведены межатомные расстояния и валентные углы соединения **4a** в сравнении с соединением **1a** [11]. В плоском фрагменте А среднее расстояние С—С равно 1,386(4) Å, расстояние С—Br — 1,899(3) Å, все эти параметры близки к найденным в структурах других 1,2-дигидро-3Н-1,4-бенздиазепин-2-онов [9, 10] и 3,5-дифенил-7-хлор-1,2-дигидро-3Н-1,3,4-бензтриазепин-2-она [11]. Можно отметить отклонение в значении эндоциклических углов в цикле А от среднего значения 120° для

атомов C₍₆₎, C₍₁₁₎ и C₍₁₀₎, что может определяться влиянием заместителей при этих атомах.

Т а б л и ц а 3

Валентные углы ω (град) в молекуле соединений **4a**
и 7-хлор-3,5-дифенил-1,2-дигидро-3H-1,3,4-бензтриазепин-2-она **1a** [11]

Связь	4a	1a
C ₍₂₎ —N ₍₁₎ —C ₍₁₀₎	123.7(2)	124.9(4)
O ₍₁₎ —C ₍₂₎ —N ₍₁₎	122.2(2)	122.9(4)
O ₍₁₎ —C ₍₂₎ —N ₍₃₎	120.0(2)	123.1(4)
N ₍₁₎ —C ₍₂₎ —N ₍₃₎	117.8(2)	114.0(3)
C ₍₂₎ —N ₍₃₎ —N ₍₄₎	125.0(2)	115.1(3)
C ₍₅₎ —N ₍₄₎ —N ₍₃₎	119.3(2)	116.8(3)
N ₍₄₎ —C ₍₅₎ —C ₍₁₁₎	126.6(2)	124.1(3)
N ₍₄₎ —C ₍₅₎ —C ₍₁₂₎	114.6(2)	115.9(3)
C ₍₁₁₎ —C ₍₅₎ —C ₍₁₂₎	118.7(2)	120.1(3)
C ₍₇₎ —C ₍₆₎ —C ₍₁₁₎	120.1(3)	120.5(4)
C ₍₆₎ —C ₍₇₎ —C ₍₈₎	121.4(2)	120.7(4)
C ₍₆₎ —C ₍₇₎ —Br ₍₁₎	119.5(2)	
C ₍₆₎ —C ₍₇₎ —Cl ₍₁₎		119.3(4)
C ₍₈₎ —C ₍₇₎ —Br ₍₁₎	119.1(2)	
C ₍₈₎ —C ₍₇₎ —Cl ₍₁₎		119.9(3)
C ₍₇₎ —C ₍₈₎ —C ₍₉₎	118.8(2)	119.6(4)
C ₍₈₎ —C ₍₉₎ —C ₍₁₀₎	121.0(3)	120.1(4)
C ₍₉₎ —C ₍₁₀₎ —C ₍₁₁₎	120.2(2)	120.6(4)
C ₍₉₎ —C ₍₁₀₎ —N ₍₁₎	117.7(2)	119.1(4)
C ₍₁₁₎ —C ₍₁₀₎ —N ₍₁₎	122.1(2)	120.3(3)
C ₍₁₀₎ —C ₍₁₁₎ —C ₍₆₎	118.5(2)	118.3(4)
C ₍₁₀₎ —C ₍₁₁₎ —C ₍₅₎	122.3(2)	120.1(3)
C ₍₆₎ —C ₍₁₁₎ —C ₍₅₎	119.2(2)	121.5(4)
C ₍₁₃₎ —C ₍₁₂₎ —C ₍₁₇₎	118.9(3)	
C ₍₁₃₎ —C ₍₁₂₎ —C ₍₅₎	120.9(2)	
C ₍₁₇₎ —C ₍₁₂₎ —C ₍₅₎	120.2(2)	
C ₍₁₄₎ —C ₍₁₃₎ —C ₍₁₂₎	120.6(3)	
C ₍₁₅₎ —C ₍₁₄₎ —C ₍₁₃₎	120.0(3)	
C ₍₁₄₎ —C ₍₁₅₎ —C ₍₁₆₎	119.9(3)	
C ₍₁₅₎ —C ₍₁₆₎ —C ₍₁₇₎	120.7(3)	
C ₍₁₆₎ —C ₍₁₇₎ —C ₍₁₂₎	119.8(3)	

В цикле С значения длин связей С—С в среднем 1.382(4) Å, среднее значение эндоциклического угла 120°; длина связи C₍₅₎—C₍₁₂₎ 1.488(4) Å.

Мы уже отмечали (табл. 1), что диэдральный угол между циклами А и С равен 116.5°, что характерно для всех приведенных в этой таблице соединений (116.8° [11], 118.2° [9]). В 7-членном цикле В расстояния близки найденным в аналоге [11]. Связь C₍₅₎=N₍₄₎ (1.283(3) Å) имеет

типичный характер двойной связи. Сопряжение с циклом А оказывает влияние на длину связи $C_{(5)}-C_{(11)} = 1.481(2) \text{ \AA}$, а также на укорочение связи $N_{(1)}-C_{(10)}$. Геометрия амидной группы стандартная [9, 11]. Длины связей $N_{(3)}-C_{(2)}$ и $N_{(3)}-N_{(4)}$ соответственно 1.376 и 1.408 \AA , соответственно. Длина первой из них указывает на участие неподеленной электронной пары атома $N_{(3)}$ в сопряжении с амидной группой.

Т а б л и ц а 4

Кристаллографические данные и уточнение структуры 4a

Эмпирическая формула	$C_{14}H_{10}BrN_3O$
Молекулярный вес	316.16
Температура	293(2)К
Длина волны	1.54178 \AA
Пространственная группа	$P2_1/c$
Параметры элементарной ячейки	$a = 5.140(1) \text{ \AA}$ $\alpha = 90$ град. $b = 18.314(4) \text{ \AA}$ $\beta = 91.14(3)$ град. $c = 13.645(3) \text{ \AA}$ $\gamma = 90$ град.
Объем, V	1284.2(5) \AA^3
Z	4
Плотность (вычисленная)	1.635 мг/мм^3
Коэффициент поглощения	4.326 мм^{-1}
$F(000)$	632
Область по θ для сбора данных	от 4.04 до 65.05°
Область по индексам	$-6 \leq h \leq 5,$ $-4 \leq k \leq 22,$ $0 \leq l \leq 16$
Число независимых рефлексов	2127 ($R_{\text{int}} = 0.0182$)
Максимальное и минимальное пропускание	0.979 и 0.435
Метод уточнения	Полноматричный метод наименьших квадратов по F^2
Добротность уточнения по F^2	1.092
Заключительные R -факторы	
$[I > 2\sigma(I)]$	$R_1 = 0.0317, wR_2 = 0.0822$
R -фактор (все данные)	$R_1 = 0.0352, wR_2 = 0.0893$
Коэффициент экстинкции	0.0033(3)
Максимальные и минимальные пики на разностном синтезе	
$\Delta\rho_{\text{max}}$	0.586 $\text{ е} \cdot \text{ \AA}^{-3}$
$\Delta\rho_{\text{min}}$	-0.581 $\text{ е} \cdot \text{ \AA}^{-3}$

Сопоставление параметров 1,2-дигидро-3Н-1,3,4-бензтриазепин-2-онов, описанных в настоящей статье и работе [11], указывают на большую степень искажения ванны для 7-членного цикла в этих соединениях в сравнении с дигидробензтриазепинами. Вероятно, это может быть объяснено заменой sp^3 -гибридизованного атома углерода в положении 3

дигидробенздиазепинов на атом азота, имеющий промежуточное (между sp^2 и sp^3) состояние.

Т а б л и ц а 5

**Координаты базисных неводородных атомов ($\times 10^4$)
и эквивалентные изотропные температурные параметры U_{eq} ($\text{\AA} \cdot 10^{-3}$)**

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	U_{eq}
O ₍₁₎	8111(4)	5688(1)	5507(1)	45(1)
Br ₍₁₎	1461(1)	3922(1)	686(1)	62(1)
N ₍₁₎	7929(5)	5383(1)	3896(2)	37(1)
C ₍₂₎	6957(5)	5705(1)	4717(2)	35(1)
N ₍₃₎	4578(5)	6047(1)	4633(2)	42(1)
N ₍₄₎	3762(4)	6484(1)	3836(2)	38(1)
C ₍₅₎	3621(5)	6203(1)	2975(2)	34(1)
C ₍₆₎	2840(5)	5092(2)	1961(2)	38(1)
C ₍₇₎	3472(5)	4393(2)	1682(2)	41(1)
C ₍₈₎	5547(6)	4027(2)	2109(2)	44(1)
C ₍₉₎	6982(6)	4369(2)	2839(2)	41(1)
C ₍₁₀₎	6359(5)	5068(1)	3147(2)	33(1)
C ₍₁₁₎	4298(5)	5445(1)	2702(2)	33(1)
C ₍₁₂₎	2589(5)	6703(1)	2201(2)	36(1)
C ₍₁₃₎	3671(6)	6719(2)	1278(2)	41(1)
C ₍₁₄₎	2735(7)	7195(2)	567(2)	47(1)
C ₍₁₅₎	686(7)	7648(2)	765(2)	50(1)
C ₍₁₆₎	-408(6)	7638(2)	1676(3)	51(1)
C ₍₁₇₎	530(6)	7171(2)	2399(2)	44(1)

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

ИК спектры записаны на спектрофотометре Specord 75-IR в растворе CCl₄. УФ спектры сняты на спектрофотометре Specord UV-vis в этиловом спирте при концентрациях $3 \cdot 10^{-5}$ моль/л при толщине слоя 10 мм. Масс-спектры регистрировали на масс-спектрометре MX-1321 с использованием прямого ввода образца в источник ионов при энергии ионизирующих электронов 70 эВ, температура камеры ионизации 150 °С.

Чистоту соединений контролировали методом ТСХ на пластинках Silufol UV-254 (Kavalier) в системе растворителей ацетон—хлороформ—гексан, 2 : 2 : 1.

Спектр ЯМР ¹H записан в растворе ДМСО-d₆ (99.9%) на приборе Varian WXP-300 с рабочей частотой 299.95 МГц. Внутренний стандарт ТМС, при 25 °С.

Для рентгеноструктурного эксперимента использовали бесцветный монокристалл пластинчатого габитуса (0.6×0.2×0.2 мм). Кристалл моноклинный, параметры элементарной ячейки, определенной методом наименьших квадратов по 40 рефлексам в интервале углов θ 8.5–35° приведены в табл. 4. Определение параметров и получение экспериментального материала проведено в дифрактометре KUMA (KM-4) на CuK _{α} (графитовый монохроматор) излучении методом $\omega/2\theta$ -сканирования. В процессе эксперимента для контроля качества кристалла и измерительного тракта через каждые 100 отражений измерялись два контрольных. Различия в них не превышали $\pm 1\%$. Всего

зарегистрировано 2298 отражений, 1978 из которых с $I \geq 2\sigma(I)$. Расшифровка и уточнение структуры проведены по 2123 ненулевым рефлексам. В процессе подготовки массива к расчетам вводилась поправка на поглощение, полученная экспериментально (ψ -сканирование). Структура решена прямыми методами. Уточнение проведено в анизотропном приближении для неводородных атомов. Атомы водорода найдены объективно и уточнены изотропно в рамках модели твердого тела для атомов H. Заключительные координаты базисных атомов приведены в табл. 5.

Для расчетов использовались комплексы программ SHELXG 86 [12] и SHELX-93 [13].

Термические превращения 4-фенилсемикарбазона 2-амино-5-бромбензофенона. Помещают в колбу и нагревают 2.5 ч при 190–200 °С 8.18 г (0.02 моль) *син*-изомера 4-фенилсемикарбазона 2-амино-5-бромбензофенона. В верхнюю часть колбы помещают охлаждаемый палец для улавливания возгоняющихся продуктов. В процессе синтеза среди возгоняющихся продуктов идентифицирован анилин, который конденсируется на охлаждаемом пальце. Реакционную смесь охлаждают, измельчают и добавляют 15 мл холодного хлороформа. Нерастворившийся осадок отфильтровывают и кристаллизуют несколько раз из хлороформа. Получают 3.9 г (61.7 %) соединения **7**. Т. пл. 370–375 °С (с разл.). Найдено, %: С 53.2; Н 3.1; Br 25.2; N 13.3. $C_{28}H_{20}Br_2N_6O_2$. Вычислено, %: С 53.19; Н 3.19; Br 25.27; N 13.29.

Маточный раствор упаривают, выпавший осадок отфильтровывают и кристаллизуют из хлороформа. Получают 1.7 г (27%) 7-бром-5-фенил-1,2-дигидро-3Н-1,3,4-бензтриазепин-2-она **4a**. Т. пл. 263–265 °С. Спектр ЯМР 1H (ДМСО- d_6), δ , м. д.: 9.72 (1H, с, $N_{(1)}H$); 9.35 (1H, с, $N_{(3)}H$); 7.66–7.01 (8H, м, Ar). Найдено, %: С 53.3; Н 3.31; Br 25.1; N 13.18. $C_{14}H_{10}BrN_3O$. Вычислено, %: С 53.19; Н 3.19; Br 25.27; N 13.29.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. P. Richter, O. Morgenstern, *Pharmazie*, **39**, 301 (1984).
2. Г. И. Колдобский, С. Э. Иванова, *ЖОрХ*, **31**, 1601 (1995).
3. S. A. Andronati, T. I. Karaseva, T. A. Kabanova, V. I. Pavlovsky, A. S. Yavorsky, *Pharmazie*, **50**, 632 (1995).
4. T. Ishiywaka, M. Sano, K. Isagawa, Y. Fushizaki, *Bull. Chem. Soc. Jap.*, **43**, 135 (1970).
5. S. Toyoshima, T. Morishita, T. Nakamura, *Jap. Pat.* 70 11147; *Chem. Abstr.*, **73**, 25545 (1970).
6. S. Toyoshima, T. Morishita, T. Nakamura, *Jap. Pat.* 70 11148; *Chem. Abstr.*, **73**, 25544 (1970).
7. S. A. Andronati, T. A. Voronina, in *Heterocycles in Bioorganic Chemistry*, Eds. J. Bergman, Y. C. van der Peds, M. Simonyi, Sweden, 1991, 87.
8. G. Gilli, P. A. Borea, V. Bertolasi, M. Sacerdoti, in *Molecular Structure and Biological Activity*, J. F. Griffin, W. L. Duax Eds., Elsevier Biomedical Press (NY), 1982, 259.
9. G. Gilli, V. Bertolasi, M. Sacerdoti, P. A. Borea, *Acta crystallogr.*, **B33**, 2664 (1977).
10. А. А. Карапетян, В. Г. Андрианов, Ю. Т. Стручков, А. В. Богатский, С. А. Андронати, Т. И. Коротенко, *Биоорг. химия*, **5**, 1684 (1979).
11. С. А. Андронати, Ю. А. Симонов, А. А. Дворкин, Т. Ш. Гифейсман, В. И. Павловский, А. С. Яворский, *Изв. АН МССР, Сер. Физика и техника*, № 3, 16 (1990).
12. G. M. Sheldrick, SHELX S-86, *Acta crystallogr.*, **A46**, 467 (1990).
13. G. M. Sheldrick, SHELX S-93, Program for the Refinement of Crystal Structures. University of Göttingen, Germany, 1993.
- 14.

Физико-химический институт им. А. В. Богатского НАН Украины, Одесса 270080
e-mail: hfvlovsky@paco.net

Поступило в редакцию 18.02.2000

^aMickiewicz University, Faculty of Chemistry
60-780 Poznan, Poland

^bИнститут прикладной физики АН Республики Молдова, Кишинев 277028
e-mail: simonov.xray@phys.asm.md