

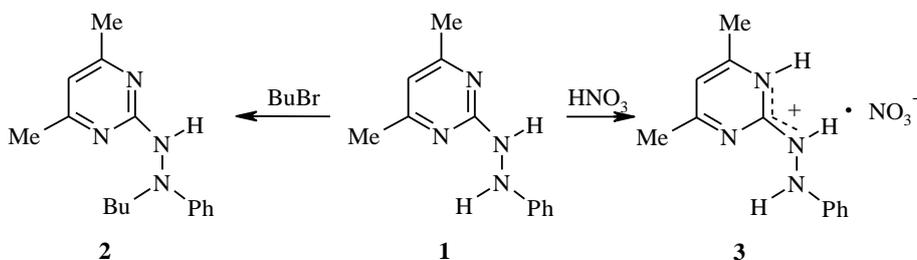
Б. И. Бузыкин, М. Ю. Сорокин, Д. Б. Криволапов,
А. Т. Губайдуллин, И. А. Литвинов

**МОЛЕКУЛЯРНАЯ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА
4,6-ДИМЕТИЛ-2-(ФЕНИЛГИДРАЗИНО)ПИРИМИДИНА
И ПРОДУКТОВ ЕГО
АЛКИЛИРОВАНИЯ И ПРОТОНИРОВАНИЯ**

Методом РСА установлено, что 4,6-диметил-2-(фенилгидразино)пиримидин при алкилировании *n*-бутилбромидом образует 2-(2-*n*-бутил-2-фенилгидразино)-4,6-диметилпиримидин, а при протонировании азотной кислотой – нитрат 4,6-диметил-2-(фенилгидразино)-1(Н)-пиримидиния. Обсуждается строение молекул и система межмолекулярных водородных связей в кристаллах изученных соединений.

Ключевые слова: 4,6-диметил-2-(фенилгидразино)пиримидин, пиримидин, алкилирование, протонирование, РСА.

2-Гидразинопиримидин и его производные, как и другие α -гидразиноазагетарилы, относятся к соединениям, у которых имеется несколько нуклеофильных центров, локализованных на атомах азота или углерода, входящих в цикл или в боковую цепь. Результаты реакций таких соединений с электрофильными реагентами, как правило, зависят от природы заместителей в гетероцикле и в гидразиновом фрагменте. На примере алкилирования и протонирования 4,6-диметил-2-(фенилгидразино)пиримидина (**1**) мы обнаружили, что в таких системах в зависимости от природы электрофильного реагента реакции могут направляться по тому или другому нуклеофильному центру. В процессе установления структуры продукта реакции фенилгидразинопиримидина **1** с бромистым *n*-бутилом, а также и продукта реакции его с азотной кислотой методами ЯМР и ИК спектроскопии, возникли сложности, поэтому для однозначного установления строения выделенных соединений был проведен РСА соединения **1**, продукта его алкилирования бромистым *n*-бутилом – 2-(2-*n*-бутил-2-фенилгидразино)-4,6-диметилпиримидина (**2**) и продукта протонирования его азотной кислотой – нитрата 4,6-диметил-2-(фенилгидразино)-1(Н)-пиримидиния (**3**).



Длины (*l*) некоторых связей соединений 1–3

Связь	<i>l</i> , Å				
	1А	1В	1С	2	3
N ₍₁₎ –N ₍₂₎	1.384(5)	1.413(5)	1.43(1)	1.417(5)	1.398(2)
N ₍₂₎ –C ₍₉₎	1.409(5)	1.371(5)	1.506(9)	1.397(6)	1.417(2)
N ₍₁₎ –C ₍₃₎	1.347(5)	1.489(7)	1.15(1)	1.382(7)	1.334(2)
N ₍₄₎ –C ₍₃₎	1.380(4)	1.326(7)	1.60(1)	1.350(6)	1.342(2)
N ₍₈₎ –C ₍₃₎	1.377(5)	1.243(8)	1.35(1)	1.319(6)	1.340(2)
N ₍₈₎ –C ₍₇₎	1.269(6)	1.438(6)	1.13(1)	1.326(7)	1.356(2)
C ₍₇₎ –C ₍₆₎	1.377(7)	1.338(6)	1.40(1)	1.372(7)	1.357(3)
C ₍₆₎ –C ₍₅₎	1.48(1)	1.317(9)	1.48(1)	1.357(8)	1.389(2)
C ₍₅₎ –N ₍₄₎	1.346(5)	1.386(7)	1.55(1)	1.330(7)	1.340(2)

Общий вид, система водородных связей и нумерация атомов в молекулах соединений **1–3** показаны на рис. 1–6. Значения некоторых длин связей, валентных и торсионных углов приведены в табл. 1–3. Длины соответствующих связей в молекулах соединений **1–3** совпадают в пределах экспериментальных погрешностей. Длины связей отдельных фрагментов молекул гидразинов **1–3** сопоставимы с длинами, характерными для моно- и дизамещенных гидразинов и гидразидов, как и длины связей N₍₁₎–N₍₂₎ 1.384(5), 1.417(5), 1.398(2) (соединения **1–3** соответственно), которые близки к найденным в других типах замещенных гидразинов [1, 2 и ссылки в них], в том числе и для 5-ацетил-2-гидразино-4-метилпиримидина (**4**) и его гидразона **5** [3]. Введение фенила к терминальному атому азота в системе 2-гидразинопиримидинов мало влияет на длину связи N₍₁₎–N₍₂₎. Длина связи N₍₁₎–N₍₂₎ в соли **3** имеет среднее значение среди изученных соединений и ближе к значениям ее в 1,2-диформилгидразине (1.387(2)) [4], чем в ацилгидразиниевых солях, например в 4-фенилтиосемикарбазиддиуксусной кислоте (1.434(9)) [5].

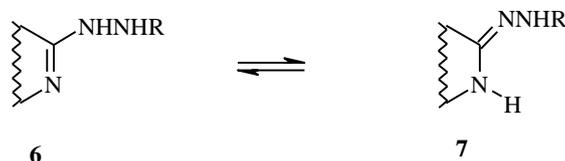
Некоторые валентные (ω) углы соединений 1–3

Угол	ω , град				
	1А	1В	1С	2	3
N ₍₄₎ C ₍₃₎ N ₍₈₎	125.8(3)	135.7(5)	121.7(7)	128.9(5)	123.0(1)
N ₍₁₎ C ₍₃₎ N ₍₄₎	112.6(3)	109.2(5)	104.4(9)	111.9(4)	117.3(1)
N ₍₁₎ C ₍₃₎ N ₍₈₎	121.4(3)	114.1(4)	133.6(8)	119.3(4)	119.7(2)
C ₍₃₎ N ₍₁₎ H ₍₁₎	117.(3)	117.(3)	121(1)	118.(4)	121.(1)
N ₍₂₎ N ₍₁₎ C ₍₃₎	120.5(3)	118.0(4)	129.(1)	122.6(4)	120.0(1)
N ₍₂₎ N ₍₁₎ H ₍₁₎	117.(3)	117.(3)	110.(1)	118.(4)	118.(1)
N ₍₁₎ N ₍₂₎ X*	121.(3)	107.(3)	122.3(6)	116.4(4)	111.(1)
N ₍₁₎ N ₍₂₎ C ₍₉₎	115.8(3)	115.7(3)	116.8(6)	119.5(4)	114.5(1)
C ₍₉₎ N ₍₂₎ X*	122.(3)	123.(3)	120.5(5)	119.9(4)	114.(2)
N ₍₂₎ C ₍₉₎ C ₍₁₄₎	121.6(4)	125.3(4)	128.3(7)	114.4(4)	121.8(2)
N ₍₂₎ C ₍₉₎ C ₍₁₀₎	118.8(4)	118.1(4)	106.3(7)	126.4(4)	117.8(2)

* 1А – 1С, 3 X = H_(N2), 2 X = C₍₁₇₎.

В молекуле **2** (рис. 2) бутильный фрагмент находится при анилиновом атоме азота. Это, в свою очередь, указывает на то, что атом N₍₂₎ обладает наибольшей нуклеофильностью в реакциях алкилирования. Другая картина наблюдается, когда в качестве электрофильного реагента используется протон азотной кислоты. Реакционным центром в этом случае становится атом азота гетероцикла (рис. 3). Все атомы водорода в молекуле соединения **3**, в том числе и при атоме N₍₈₎, выявлены из разностных рядов электронной плотности и уточнены в изотропном приближении.

Установление структур изучаемых соединений вызывает интерес и с точки зрения исследования таутомерии. Как известно, α-гидразиноазагетероциклы могут находиться в разных таутомерных формах, например гидразинной (**6**) или гидразонной (**7**). Так производные пиридина существуют в гидразинной форме, а гидразинофалазина – в гидразонной [6–8 и ссылки в них]. В растворах эти формы могут находиться в равновесии [5, 6].



Согласно результатам рентгеноструктурного исследования, соединения **1** и **2** в кристаллическом состоянии находятся в гидразинной форме (рис. 1 и 2). Об этом свидетельствуют независимое выявление положения протона при атомах N₍₁₎, а в соли **3** также и протона при N₍₈₎, и характеристики структурных параметров (длины связей, торсионный угол по связи N₍₁₎–N₍₂₎ в соединении **1** и др., табл. 1–3). Сравнение структурных параметров соединений **1–3** позволяет утверждать что катион в нитрате **3** является протонированной формой гидразинного таутомера соединения **1**.

Т а б л и ц а 3

Некоторые торсионные (θ) углы соединений **1–3**

Угол	θ, град.				
	1A	1B	1C	2	3
C ₍₉₎ N ₍₂₎ N ₍₁₎ C ₍₃₎	78.95(0.43)	77.96(0.48)	81.49(1.34)	76.49(0.55)	-114.98(0.17)
C ₍₉₎ N ₍₂₎ N ₍₁₎ H ₍₁₎	-123.57(0.39)	-71.72(0.46)	-95.26(0.97)	-99.43(0.52)	56.21(1.34)
XN ₍₂₎ N ₍₁₎ C ₍₃₎ *	-101.36(0.41)	-65.01(0.46)	-90.77(1.19)	-80.25(0.57)	114.39(1.54)
N ₍₂₎ N ₍₁₎ C ₍₃₎ N ₍₄₎	-177.66(0.30)	179.82(0.36)	-169.77(0.82)	-167.15(0.37)	174.95(0.14)
N ₍₂₎ N ₍₁₎ C ₍₃₎ N ₍₈₎	-3.56(0.51)	9.19(0.62)	17.10(1.36)	13.78(0.64)	-6.81(0.24)
N ₍₁₎ N ₍₂₎ C ₍₉₎ C ₍₁₀₎	-155.36(0.36)	-160.50(0.38)	-138.29(0.96)	-115.08(0.54)	-151.88(0.15)
C ₍₅₎ N ₍₄₎ C ₍₃₎ N ₍₈₎	5.83(0.50)	-13.47(0.81)	0.54(0.61)	1.15(0.72)	3.67(0.24)
C ₍₁₀₎ C ₍₉₎ C ₍₁₄₎ C ₍₁₃₎	3.32(0.64)	-2.47(0.74)	-10.20(1.17)	-0.03(0.92)	1.39(0.29)

* **1A–1C**, **3** X = H_(N2), **2** X = C₍₁₇₎.

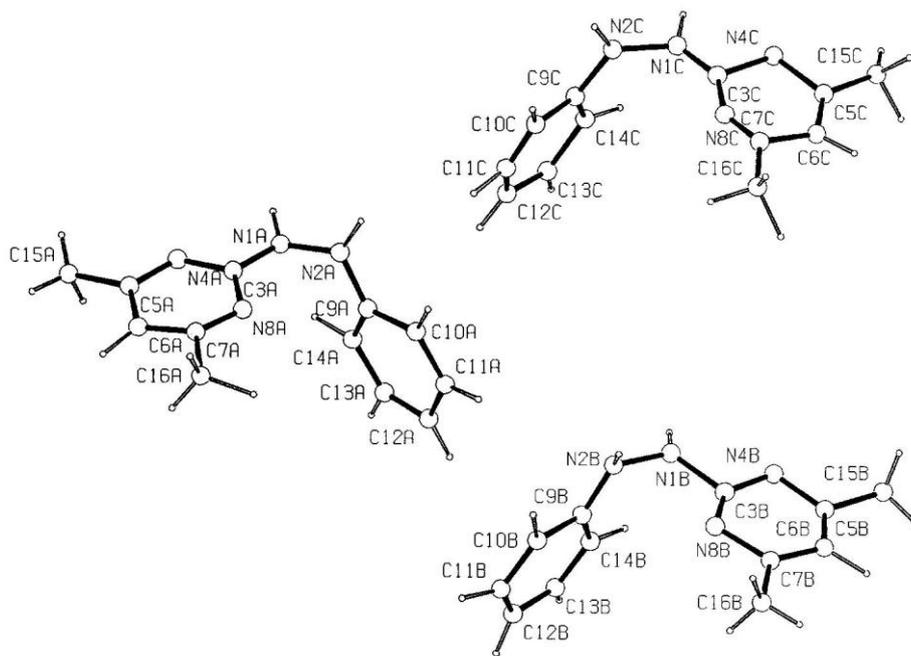


Рис. 1. Геометрия молекулы 4,6-диметил-2-(фенилгидразино)пиримидина 1

Длина связи $N_{(1)}-C_{(3)}$ в изученных соединениях 1–3 и гидразинах 6, 7 несколько меньше длины связи $N-C_{(sp^2)}$, что свидетельствует о сопряжении неподеленной электронной пары атома $N_{(1)}$ с пиримидиновым кольцом.

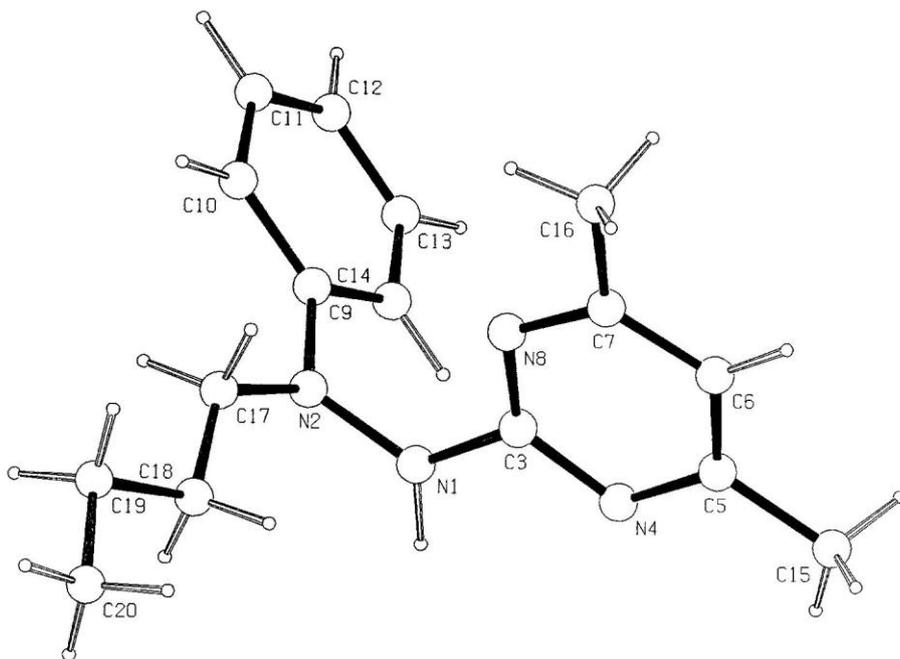


Рис. 2. Геометрия молекулы 2-(2-бутил-2-фенилгидразино)-4,6-диметилпиримидина 2

Параметры водородных связей соединений 1–3

Соединение	Связь	Операции симметрии	$d(\text{H}-\text{A}), \text{Å}$	$d(\text{D}-\text{A}), \text{Å}$	$\angle(\text{DNA}), \text{град.}$
1	$\text{N}_{(1\text{A})}-\text{H}_{(1\text{A})}\cdots\text{N}_{(4\text{B})}$	$1-x, 1/2+y, 1/2-z$	2.20	3.026(4)	155
	$\text{N}_{(1\text{B})}-\text{H}_{(1\text{B})}\cdots\text{N}_{(4\text{A})}$	$1-x, -1/2+y, 1/2-z$	1.84	2.991(4)	157
	$\text{N}_{(2\text{B})}-\text{H}_{(2\text{B})}\cdots\text{N}_{(4\text{B})}$	$1-x, -y, 1-z$	2.60	3.416(5)	127
2	$\text{N}_{(1)}-\text{H}_{(1)}\cdots\text{N}_{(4)}$	$-x, 2-y, -z$	2.08	3.049(6)	165
3	$\text{N}_{(2)}-\text{H}_{(2)}\cdots\text{O}_{(2)}$	$1/2+x, 1/2-y, 1/2+z$	2.19(2)	2.972(2)	148.4(2)
	$\text{N}_{(1)}-\text{H}_{(1)}\cdots\text{N}_{(4)}$	$1-x, -y, 2-z$	2.14(2)	3.019(2)	179.1(2)
	$\text{N}_{(8)}-\text{H}_{(8)}\cdots\text{N}_{(2)}$	ВМС	2.37(2)	2.701(2)	101.8(2)
	$\text{N}_{(8)}-\text{H}_{(8)}\cdots\text{O}_{(1)}$	$1/2-x, 1/2+y, 3/2-z$	1.95(2)	2.800(2)	157(2)

Длины связей, значения валентных и торсионных углов в бензольных кольцах обычные. Бензольные кольца плоские в пределах $0.1(5) \text{Å}$, т. е. в пределах экспериментальной погрешности. В пиримидиновом цикле соединений **1–3** наблюдается небольшое отклонение от плоскости (например, см. значения торсионного угла $\text{C}_{(5)}\text{N}_{(4)}\text{C}_{(3)}\text{N}_{(8)}$ в табл. 3).

Переходя к описанию конформации соединений **1–3**, следует отметить, что молекулы в целом являются неплоскими за счет разворота по связи $\text{N}_{(1)}-\text{N}_{(2)}$ (углы разворота по связи $\text{N}_{(1)}-\text{N}_{(2)}$ в соединениях **1–3**, соответственно, $68, -90, 85^\circ$), и существенно различаются. Атом $\text{N}_{(1)}$ во всех молекулах близок к копланарному расположению с пиримидиновым фрагментом, тогда как атом $\text{N}_{(2)}$ значительно отклонен от плоскости фенильного кольца (табл. 3). Кроме того, торсионный угол $\text{N}_{(1)}\text{N}_{(2)}\text{C}_{(9)}\text{C}_{(10)}$ в алкилированном производном **2** отличается от аналогичного торсионного угла в молекулах **1, 3** примерно на 40° (табл. 3), вследствие стерических затруднений, возникающих из-за присутствия в молекуле **2** при атоме $\text{N}_{(2)}$ бутильного заместителя. Неподделенные пары электронов атомов $\text{N}_{(1)}$ и $\text{N}_{(2)}$ в соединениях **2** и **3** практически ортогональны (табл. 3), как и в молекулах незамещенного, а также метил-, 1,1- и 1,2-диметилгидразинов и 1,2-диацил-1-арилгидразинов ($87-89^\circ$) [2, 9–13]. Но даже в соединении **1** отсутствуют условия для образования единой сопряженной системы. Сопряжение n - π -электронов реализуется только в пределах аминокпиримидинового и, отдельно, анилинового фрагментов, тогда как молекула, например, 1,2-диформилгидразина (единое π - n - π -сопряжение) – плоская [4].

Асимметрическая часть кристаллической ячейки соединения **1** содержит три независимые молекулы (**A**, **B** и **C**), причем одна из молекул – молекула **C** – разупорядочена. Молекулы **A** и **B** имеют примерно одинаковую конформацию (см. рис. 1), но численные значения геометрических параметров в них несколько различаются (см. табл. 1–3). Следует отметить, что в структурах с разупорядоченными фрагментами реальная погрешность измерения геометрических параметров часто бывает выше, чем вычисленная в процедуре уточнения. Необходимо отметить, что довольно большие различия в геометрических параметрах молекул **A** и **B** (см. табл. 1) также могут быть связаны с реальной погрешностью измерения. Взаимное расположение ароматических циклов

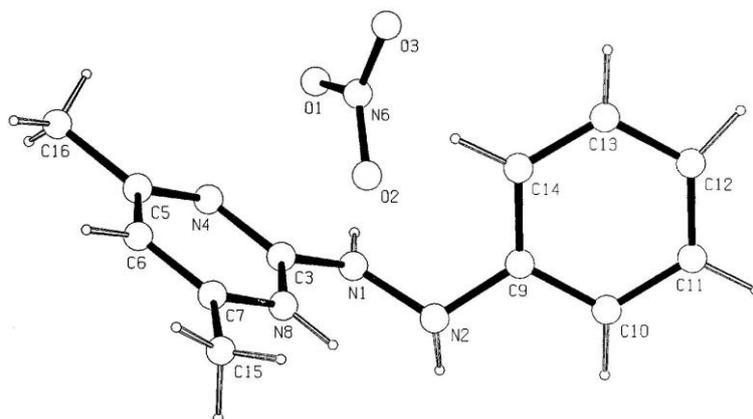


Рис. 3. Геометрия молекулы **3**

в молекулах одинаковое, значения диэдральных углов между бензольным циклом и пиримидиновым гетероциклом равны $91.2(2)$ и $92.0(2)^\circ$, соответственно, для молекул **A** и **B**. Конформация молекул относительно связи $N_{(1)}-N_{(2)}$ одинаковая (торсионные углы близки по абсолютному значению -78.9 и -71.9° соответственно). Фрагмент $N_{(2)}N_{(1)}C_{(3)}N_{(8)}$ имеет заслоненную конформацию: торсионные углы равны -3.6 и -9.19° , соответственно, для молекул **A** и **B**.

Отклонения валентных углов от стандартных значений небольшие (табл. 2), а сами углы совпадают с наблюдаемыми в молекулах гидразинов, близких по типу замещения. Судя по значению валентных углов (табл. 2), конфигурация связей атомов $N_{(1)}$ и $N_{(2)}$ в гидразинах **1–3** плоско-тригональная, характерная для соединений подобного типа. Исключение составляет лишь атом $N_{(2)}$ в нитрате **3**. Его конфигурация существенно отличается от плоской и атом $N_{(2)}$ имеет степень пирамидальности $C_{\pi}^N = 0.55$ [14]. Это происходит за счет образования внутримолекулярной водородной связи $N_{(8)}-H_{(N8)}\dots N_{(2)}$, повлекшего за собой изменение валентных углов

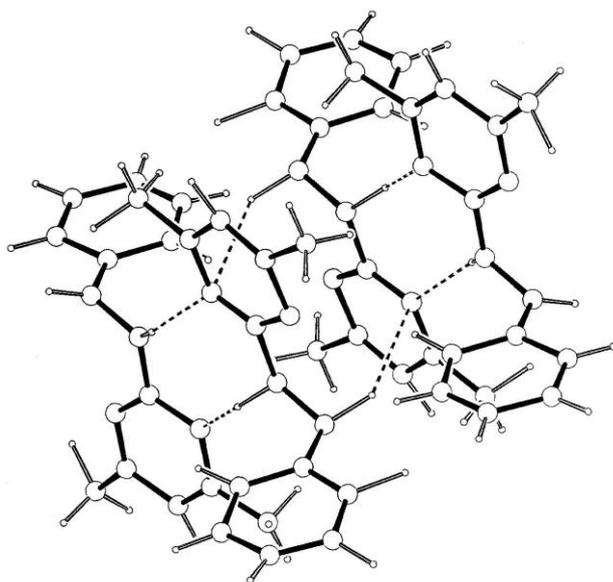


Рис. 4. Система водородных связей в кристаллах соединения **1**

(табл. 2) при атоме N₍₂₎. Уменьшение угла N₍₂₎C₍₉₎C₍₁₄₎ и увеличение угла N₍₂₎C₍₉₎C₍₁₀₎ в алкилированном гидразине **2** по сравнению с углами гидразина **1** и соли **3** объясняется увеличением угла разворота относительно связи N₍₂₎-C₍₉₎, за счет, как уже отмечалось выше, стерических факторов.

Анализ межмолекулярных контактов типа D-H...A, проведенный с помощью программы PLATON [15], показывает наличие в кристалле гидразина **1** водородных связей N-H...N типа (рис. 4). Параметры водородных связей приведены в табл. 4. При участии амидиновых фрагментов молекула **A** образует с молекулой **B** псевдодимер, а два таких псевдодимера связаны между собой в centrosymmetric димер псевдодимеров. Классических водородных связей с участием молекулы **C** не обнаружено, что может быть связано с ее разупорядоченностью.

Молекулы бутильного производного **2** и катиона соли **3** в кристаллах связаны в centrosymmetric димеры, образованные за счет межмолекулярных водородных связей N₍₁₎-H_(N1)...N₍₄₎ при участии амидиновых фрагментов молекул (рис. 5). Подобные димеры наблюдались в кристаллах соединений **4**, **5**. Параметры водородных связей приведены в табл. 4. Помимо межмолекулярных водородных связей, в катионе соли **3** имеется укороченный невалентный контакт N₍₈₎...N₍₂₎ 2.701(2) Å, который указывает на существование межмолекулярной водородной связи N₍₈₎-H_(N8)...N₍₂₎ с параметрами: N₍₈₎-H_(N8) 0.90(2), H_(N8)...N₍₂₎ 2.37(2) Å, угол N₍₈₎-H_(N8)...N₍₂₎ 102(2)°.

В кристалле гидразина **1** также имеются π-π-взаимодействия между пиримидиновыми циклами. Причем в данном виде взаимодействий участвуют молекулы **A** и **C'** с соответствующими молекулами **C** и **A'**, связанными операцией симметрии (2-x, 1/2+y, 1/2-z), за счет чего образуются пары молекул. Параметры данных коротких контактов для взаимодействующих пар одинаковы: расстояния между центрами циклов 4.39(2) Å, диэдральный угол между плоскостями 1.2(3)° и угол между нормалью к одной из плоскостей и вектором, связывающим центры колец, 39.6(2)°.

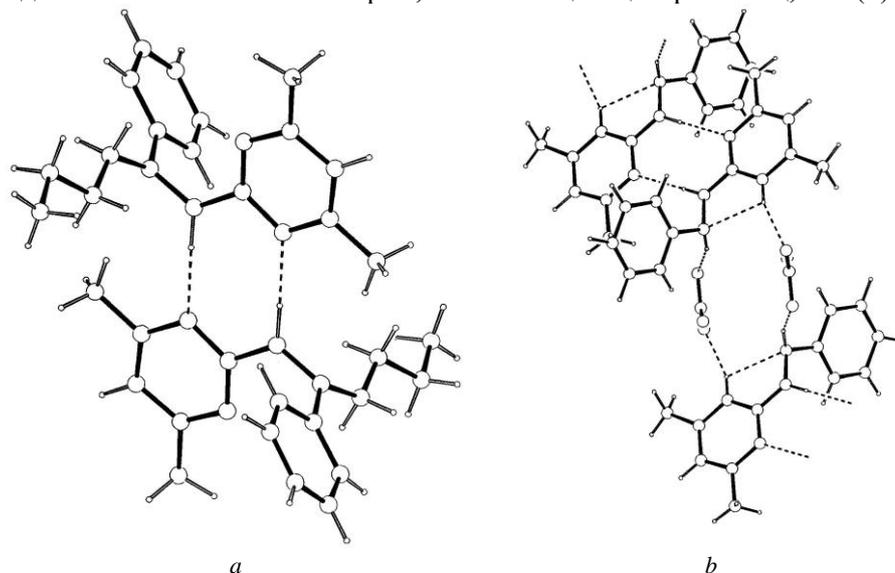


Рис. 5. Система водородных связей в кристаллах соединений **2** (a) и **3** (b)

Параметры кристаллов соединений 1–3 и условия рентгеноструктурных экспериментов*

Параметр	Соединение		
	1	2	3
Сингония	Моноклинные	Моноклинные	Моноклинные
Пространственная группа	$P2_1/c$	$P2_1/c$	$P2_1/n$
Параметры элементарной ячейки			
a , Å	10.748(1)	8.359(1)	11.0774
b , Å	21.802(6)	9.971(6)	10.4760
c , Å	14.830(2)	18.914(2)	12.3049
β , град	95.44(1)	96.72(1)	107.02
V , Å ³	3559(1)	1565(1)	1365.40
Z	12	4	4
M	214.27	270.38	277.28
$\rho_{\text{расч}}$, г/см ³	1.23	1.15	1.15
Коэффициент поглощения, $F(000)$, см ⁻¹	0.73	0.66	7.995
Излучение, λ , Å	MoK α , λ 0.71073	MoK α , λ 0.71073	CuK α , λ 1.54184
Интервал θ	$2.12 \leq \theta \leq 26.3$	$2.12 \leq \theta \leq 26.3$	$3.12 \leq \theta \leq$
Сканирование	$\omega/2\theta$	$\omega/2\theta$	$\omega/2\theta$
Угол сканирования	$0.68 + 0.4 \text{ tg}\theta$	$0.68 + 0.4 \text{ tg}\theta$	$1.2 + 0.35 \text{ tg}\theta$
Стандартные рефлексы	Два контрольных по ориентации и три контрольных по интенсивности через каждые 200 отражений		
Интервал измерения индексов	$-13 \leq h \leq 13$ $-27 \leq k \leq 0$ $0 \leq l \leq 18$	$-8 \leq h \leq 4$ $-12 \leq k \leq 9$ $-18 \leq l \leq 18$	$0 \leq h \leq 14$ $0 \leq k \leq 12$ $-15 \leq l \leq 14$
Измерено отражений	3271	3992	3093
Число наблюдаемых отражений с $I > 3\sigma(I)$	3145	756	2345
Условия задания и уточнения атомов водорода**	Выявлены из разностного ряда, не уточнялись, учтены с фиксированными параметрами	Выявлены из разностного ряда, не уточнялись, учтены с фиксированными параметрами	Выявлены из разностного ряда, уточнялись изотропно
Окончательные значения факторов расходимости			
R	0.087	0.048	0.054
R_w	0.098	0.051	0.069
Параметр подгонки	3.009	1.439	2.324
$\Delta/\sigma_{\text{max}}$	0.1	0.2	0
Отношения числа отражений к числу уточняемых параметров	6.26	6.022	8.37

* Эмпирический учет поглощения; коррекция падения интенсивностей контрольных отражений не применялась; используемые программы PCA MoIEN [16], Alpha Station 200; прямой метод расшифровки, программа SIR [17]; уточнение – полноматричный МНК; минимизируемая функция $\sum_{\omega} (|F_o| - |F_c|)^2$; учет экстинкции не применялся; весовая схема $4F_o^2 / [\sigma(I)^2 + (0.04F_o^2)]^2$.

** По параметрам тепловых колебаний атомов азота молекулы **С** соединения **1**, а также по большому числу пиков в разностном ряду электронной плотности вокруг центральной части молекулы **С**, можно предположить о ее статистической разупорядоченности. К сожалению, не удалось разделить отдельные положения разупорядоченных атомов этой молекулы, в результате геометрические параметры молекулы **С** установлены с большой экспериментальной погрешностью. Впоследствии из разностных рядов электронной плотности выявлены атомы водорода молекул **А** и **В**, атомы **Н** молекулы **С** помещены в вычисленные положения.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Рентгеноструктурное исследование соединений **1–3** выполнено на автоматическом четырехкружном дифрактометре Enraf-Nonius CAD-4. Параметры кристаллов соединений **1–3** и условия рентгеноструктурных экспериментов приведены в табл. 5.

Кристаллы соединения **1** ($C_{12}H_{14}N_4$, т. пл. 166–169 °С) выращены из гептана, соединения **2** ($C_{16}H_{22}N_4$, т. пл. 138 °С) – из смеси ДМФА–гептан, соединения **3** ($C_{12}H_{15}N_5O_3$, т. пл. 78–79 °С) – из смеси пропанол-2–вода, 1:1.

Методики синтеза соединений **2** и **3**, спектральные характеристики соединений **1–3** и данные элементного анализа будут приведены в следующей работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. F. N. Allen, O. Kennard, D. G. Watson, L. Brammer, A. G. Orpen, R. Taylor, *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2*, 1 (1987).
2. Б. И. Бузыкин, А. Т. Губайдуллин, И. А. Литвинов, Н. Г. Газетдинова, Л. П. Сысоева, *ЖОХ*, **68**, 1972 (1998).
3. A. Cousson, F. Nectoux, V. Bachel, V. Kokel, M. Hubert-Habart, *Acta Crystallogr.*, **C50**, 1753 (1994).
4. T. Ottersen, *Acta chem. scand.*, **A28**, 1145 (1974).
5. В. Х. Кравцов, В. И. Лозан, Ю. А. Симонов, О. А. Болога, Н. В. Гарбэлэу, Т. И. Малиновский, *Журн. структ. химии*, **35**, № 3, 94 (1994).
6. Ю. П. Китаев, Б. И. Бузыкин, *Гидразоны*, Наука, Москва, 1974, 80.
7. Б. И. Бузыкин, Н. Н. Быстрых, А. П. Столяров, С. А. Флегонтов, В. В. Зверев, Ю. П. Китаев, *ХГС*, 402 (1976).
8. Б. И. Бузыкин, Н. Н. Быстрых, А. П. Столяров, Л. В. Белова, Ю. П. Китаев, *ХГС*, 699 (1978).
9. Л. В. Вилков, В. С. Матрюков, Н. И. Садова, *Определение геометрической структуры свободных молекул*, Химия, Ленинград, 1978, 224.
10. A. Yamaguchi, J. Ishishima, J. Shimanouchi, S. Mizushima, *J. Chem. Phys.*, **31**, 843 (1959).
11. R. P. Lattimer, M. D. Harmony, *J. Chem. Phys.*, **53**, 4575 (1970).
12. О. А. Литвинов, Л. В. Ермолаева, В. В. Зверев, В. А. Наумов, *Журн. структ. химии*, **30**, № 2, 64 (1989).
13. M. Nakata, H. Takeo, S. Matsumura, K. Yamanouchi, K. Kuchitsu, T. Furuyama, *Chem. Phys. Lett.*, **83**, 246 (1981).
14. И. А. Литвинов, Ю. Т. Стручков, Н. Н. Быстрых, Ю. П. Китаев, Б. И. Бузыкин, *ХГС*, 977 (1982).
15. A. L. Spek, *Acta Crystallogr.*, **A46**, 34 (1990).
16. L. H. Straver, A. J. Schierbeer, MolEN. Structure Determination System. Program Description. Nonius B. V. Delft, 1994, **1**, 180.
17. A. Altomare, G. Casciarano, C. Giacovazzo, D. Viterbo, *Acta Crystallogr.*, **A47**, 744 (1991).

Институт органической и физической
химии им. А. Е. Арбузова
Казанского научного центра РАН,
Казань 420088, Россия
e-mail: litvin@iorc.kcn.ru

Поступило в редакцию 24.02.2000