

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 548.736

РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ $M(\text{Aet})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ ($M = \text{Sr}, \text{Ba}$)
И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА $[\text{Sr}(\text{Aet})(\text{OH}_2)_5](\text{Aet}) \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ © 2010 Э.Б. Миминошвили^{1*}, К.Э. Миминошвили¹, Л.А. Беридзе²,
С.Р. Зазашвили²¹Грузинский технический университет, Тбилиси²Тбилисский государственный медицинский университет

Статья поступила 29 января 2009 г.

Проведен рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ соединений $M(\text{Aet})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$, где $M(\text{II}) = \text{Sr}$ и Ba ; $(\text{Aet})^- = (\text{C}_{10}\text{H}_{11}\text{N}_4\text{O}_2\text{S}_2)^-$ — анион этазола (2-(*para*-аминобензолсульфамидо)-5-этил-1,3,4-тиадиазола). Установлена симметрия и параметры элементарной ячейки $\text{Sr}(\text{Aet})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ — $P2_1/c$, $Z = 4$, $a = 10,390(2)$, $b = 14,609(3)$, $c = 21,931(5)$ Å, $\beta = 92,42(2)^\circ$, $R = 0,041$, $\text{Ba}(\text{Aet})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ — $P2_1/c$, $Z = 4$, $a = 9,793(2)$, $b = 15,408(4)$, $c = 22,553(6)$ Å, $\beta = 94,98(2)^\circ$. Рассматриваемые соединения являются изоструктурными. Полностью изучена структура $\text{Sr}(\text{Aet})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$; кристаллы соединения построены из комплексных центросимметричных димерных катионов $[(\text{H}_2\text{O})_5\text{Sr}(\text{Aet})_2\text{Sr}(\text{OH}_2)_5]^{2+}$, анионов $(\text{Aet})^-$ и молекул воды, независимая часть структурной формулы соединения — $[\text{Sr}(\text{Aet})(\text{OH}_2)_5](\text{Aet}) \cdot 3\text{H}_2\text{O}$. Анион этазола координирован к атому металла-комплексобразователя атомами кислорода и азота с образованием четырехчленного цикла.

Ключевые слова: комплексные соединения, рентгеноструктурный анализ, $\text{Sr}(\text{II})$, $\text{Ba}(\text{II})$, этазол, сульфаниламиды.

Настоящая работа является продолжением исследований строения сульфаниламидсодержащих комплексов металлов. В ранее опубликованных работах [1—7] установлено, что с металлами $\text{Mg}(\text{II})$, $\text{Mn}(\text{II})$, $\text{Co}(\text{II})$, $\text{Ni}(\text{II})$, $\text{Cu}(\text{II})$, $\text{Zn}(\text{II})$ этазол (представитель сульфаниламидов) не образует комплексов, и в соединениях он существует как внешнесферный анион. В работе [7] представлены результаты исследований структуры этазолсодержащего соединения $[\text{Mn}(\text{OH}_2)_6](\text{Aet})_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ и высказано соображение о том, что в водных растворах возможна координация этазола к металлам большого радиуса, например, $\text{Sr}(\text{II})$ или $\text{Ba}(\text{II})$. Исходя из этого соображения решили синтезировать аналогичные комплексные соединения $\text{Sr}(\text{II})$ и $\text{Ba}(\text{II})$ и изучить их структуру.

Синтез соединений $\text{Sr}(\text{Aet})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Ba}(\text{Aet})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$. Для получения комплексных соединений металлов с этазолом к водному раствору хлорида соответствующего металла добавляли водный раствор натриевой соли этазола в молярном соотношении 1:2. Химический процесс можно выразить общим уравнением: $\text{MCl}_2 + 2\text{Na}(\text{Aet}) + n\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{M}(\text{Aet})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} + 2\text{NaCl}$. Через несколько суток из растворов выделялись крупные желтоватые кристаллы.

Аналитические данные. Соединение $\text{Sr}(\text{Aet})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O} = \text{Sr}(\text{C}_{20}\text{H}_{22}\text{N}_8\text{O}_4\text{S}_4) \cdot 8\text{H}_2\text{O}$, $M_r = 798,452$. Найдено, %: Sr 11,02, C 30,12, H 4,82, N 14,15. Вычислено, %: Sr 10,97, C 30,08, H 4,79, N 14,03. Соединение $\text{Ba}(\text{Aet})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O} = \text{Ba}(\text{C}_{20}\text{H}_{22}\text{N}_8\text{O}_4\text{S}_4) \cdot 8\text{H}_2\text{O}$; $M_r = 848,159$. Найдено, %: Ba 16,24, C 28,45, H 4,70, N 13,11. Вычислено, %: Ba 16,19, C 28,32, H 4,51, N 13,21.

Рентгенофазовый анализ. РФА (проведен на автоматическом дифрактометре HZG-4, $\lambda\text{CuK}\alpha$, β -фильтр, $2\theta/\theta$ непрерывная съемка, $2\theta = 10\text{—}40^\circ$) показал, что порошки полученных

* E-mail: mimino@gtu.edu.ge

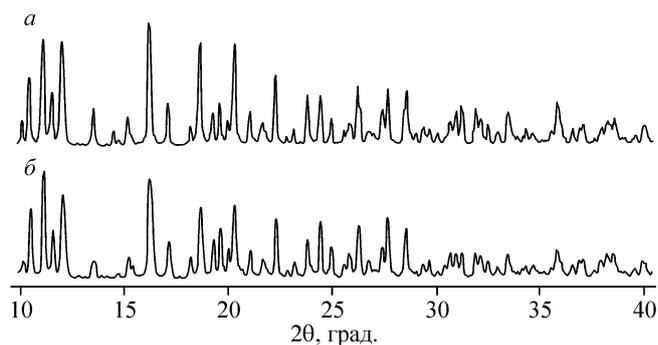


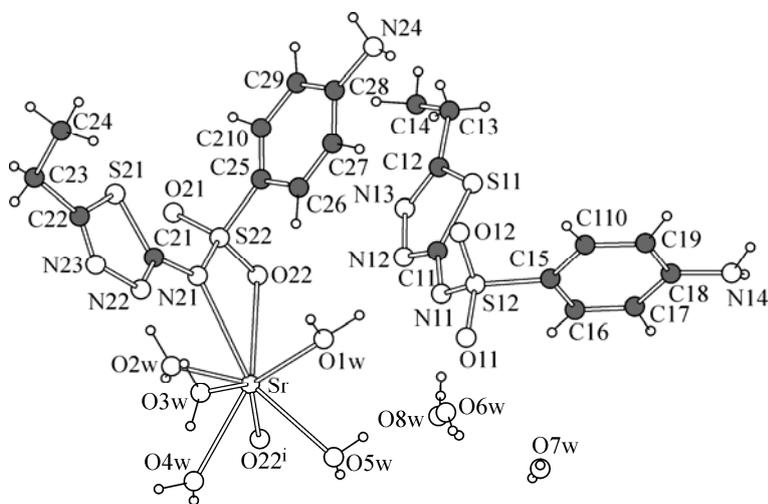
Рис. 1. Дифрактограммы: $\text{Sr}(\text{Aet})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ (а), $\text{Ba}(\text{Aet})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ (б)

соединений не содержат исходных компонентов и являются новыми индивидуальными кристаллическими веществами. Формула соединения $\text{Sr}(\text{Aet})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ установлена при определении кристаллической структуры методом РСА. Результаты РФА указывают на изоструктурность соединений $\text{Sr}(\text{Aet})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Ba}(\text{Aet})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ (рис. 1). Некоторое отличие интенсивностей, видимо, связано с разным поглощением Си-излучения образцами.

Кристаллографические данные. Валовый состав $\text{C}_{20}\text{H}_{38}\text{N}_8\text{O}_{12}\text{S}_4\text{Sr}$, формульный вес $M_r = 798,4$, симметрия моноклинная, пространственная группа $P2_1/c$, $Z = 4$, $T = 293 \text{ K}$, $a = 10,390(2)$, $b = 14,609(3)$, $c = 21,931(5) \text{ \AA}$, $\beta = 92,42(2)^\circ$, $V = 3326(1) \text{ \AA}^3$, $D_{\text{выч}} = 1,59 \text{ г/см}^3$, $\mu(\text{MoK}\alpha) = 19,69 \text{ см}^{-1}$. Набор экспериментальных данных получен на автоматическом дифрактометре SYNTEX P-1 ($\lambda_{\text{MoK}\alpha} = 0,71069 \text{ \AA}$, графитовый монохроматор). Метод съемки — $\theta/2\theta$ -сканирование ($2\theta_{\text{max}} = 48^\circ$). Из 3208 независимых отражений в уточнении использовались 3021 $I \geq 2\sigma(I)$. Модель структуры неводородных атомов определена прямым статистическим методом, положения атомов водорода найдены из разностного синтеза. Уточнение структуры проведено полноматричным МНК в анизотропном приближении тепловых колебаний неводородных атомов и в изотропном — для атомов Н. Окончательное значение R -фактора 0,041. В расчетах использован комплекс программ SHELXTL [8]. Координаты и температурные факторы U_{eq} и $U_{\text{H(изо)}}$ приведены в табл. 1. Обозначения атомов независимой части структуры показаны на рис. 2, длины связей и значения валентных углов в структуре $\text{Sr}(\text{Aet})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ приведены в табл. 2. Для $\text{Ba}(\text{Aet})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ установлена симметрия и параметры элементарной ячейки: $P2_1/c$, $Z = 4$, $T = 293 \text{ K}$, $a = 9,793(2)$, $b = 15,408(4)$, $c = 22,553(6) \text{ \AA}$, $\beta = 94,98(2)^\circ$, $V = 3390(1) \text{ \AA}^3$, $D_{\text{выч}} = 1,66 \text{ г/см}^3$. Кристаллографические данные подтверждают сходство структур соединений Sr и Ba.

Описание структуры. Структура исследованного соединения $\text{Sr}(\text{Aet})_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ принадлежит к типу ионных. В соединении кристаллографически независимая структурная единица содержит: комплексный катион $[\text{Sr}(\text{Aet})(\text{OH}_2)_5]^+$, один анион этазола $(\text{Aet})^-$ и три молекулы кристаллизационной воды (см. рис. 2).

Координационное число Sr(II) равно восьми: пять мест занимают молекулы воды, два — атомы N(21) и O(22) аниона этазола, а дополнение координационного числа до восьми осуществляется атомом O(22)ⁱ ($i = -x, 1-y, -z$), связанным центром симметрии с O(22) атомом лиганда соседнего комплекса. Атомы O(22) и O22ⁱ выполняют роль мостиков между двумя атомами стронция, связанными тем же центром симметрии, т.е. получается центросимметричный димерный катион $[(\text{H}_2\text{O})_5\text{Sr}(\text{Aet})_2 \times \text{Sr}(\text{OH}_2)_5]^{2+}$ (рис. 3).



Атомы O(22) и O22ⁱ выполняют роль мостиков между двумя атомами стронция, связанными тем же центром симметрии, т.е. получается центросимметричный димерный катион $[(\text{H}_2\text{O})_5\text{Sr}(\text{Aet})_2 \times \text{Sr}(\text{OH}_2)_5]^{2+}$ (рис. 3).

Рис. 2. Обозначения атомов независимой части структуры $[\text{Sr}(\text{Aet}) \times (\text{OH}_2)_5](\text{Aet}) \cdot 3\text{H}_2\text{O}$; (ⁱ $-x, 1-y, -z$)

Т а б л и ц а 1

Координаты ($\times 10^4$ для неводородных атомов и $\times 10^3$ для атомов H) и тепловой фактор ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) атомов в структуре $[\text{Sr}(\text{Aet})(\text{OH}_2)_5](\text{Aet}) \cdot 3\text{H}_2\text{O}$

Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	U_{eq}	Атом	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{\text{eq}}/U_{\text{H}}$
Sr	1764,1(6)	4759,8(4)	-222,6(3)	26,7(3)	O(6w)	3302(5)	6912(4)	1116(2)	71(4)
S(11)	2087(1)	4667(1)	2920,8(8)	49(1)	O(7w)	5165(6)	8166(4)	1476(2)	45(4)
S(12)	4703(1)	5248(1)	2262,8(7)	31,5(9)	O(8w)	902(10)	7504(8)	983(10)	45(4)
S(21)	1174(1)	1004(1)	70,8(9)	42(1)	H(131)	-8(7)	364(5)	333(3)	60(30)
S(22)	228(1)	2991(1)	550,8(7)	29,2(9)	H(132)	-73(7)	459(5)	351(3)	50(50)
O(11)	4943(4)	4346(3)	2510(2)	39(2)	H(141)	-174(6)	369(4)	263(3)	80(30)
O(12)	5626(4)	5556(3)	1835(2)	44(2)	H(142)	-213(6)	455(4)	300(4)	80(30)
O(21)	-871(4)	2440(3)	347(2)	38(2)	H(143)	-222(7)	381(4)	322(3)	80(30)
O(22)	-14(4)	3973(2)	566(1)	33(2)	H(16)	369(6)	699(5)	250(3)	50(30)
C(11)	2259(5)	5052(4)	2176(2)	29(3)	H(17)	385(7)	803(5)	328(3)	50(30)
C(12)	449(6)	4517(5)	2741(3)	46(4)	H(19)	602(7)	619(5)	425(3)	40(30)
C(13)	-422(8)	4169(7)	3208(4)	78(7)	H(110)	597(7)	520(5)	340(3)	40(30)
C(14)	-1810(9)	4085(9)	2981(5)	86(6)	H(14N1)	545(7)	767(5)	467(3)	80(30)
C(15)	4749(6)	6012(4)	2884(2)	32(3)	H(14N2)	437(7)	824(5)	440(3)	90(30)
C(16)	4099(6)	6839(5)	2852(3)	40(5)	H(231)	307(7)	-53(5)	-74(3)	50(30)
C(17)	4202(6)	7449(4)	3330(3)	40(4)	H(232)	164(7)	-58(5)	-52(3)	50(30)
C(18)	4951(6)	7239(4)	3857(3)	35(3)	H(241)	264(7)	-92(5)	44(3)	70(30)
C(19)	5573(6)	6399(5)	3889(3)	39(4)	H(242)	317(7)	-157(5)	5(3)	80(40)
C(110)	5474(6)	5785(4)	3410(3)	35(4)	H(243)	392(7)	-64(5)	30(3)	80(30)
C(21)	1837(6)	2085(4)	-62(3)	29(3)	H(26)	247(7)	306(5)	127(3)	40(30)
C(22)	2391(6)	538(4)	-343(3)	35(4)	H(27)	311(7)	269(5)	229(3)	50(40)
C(23)	2557(7)	-479(4)	-422(3)	47(4)	H(29)	-46(7)	165(5)	246(3)	50(40)
C(24)	3164(9)	-921(5)	130(4)	70(6)	H(210)	-103(6)	198(5)	148(3)	40(30)
C(25)	656(6)	2616(4)	1291(2)	32(3)	H(24N1)	125(7)	147(5)	315(3)	100(60)
C(26)	1907(6)	2803(5)	1535(3)	41(4)	H(24N2)	240(7)	206(4)	318(3)	80(30)
C(27)	2224(7)	2554(5)	2125(3)	49(5)	H(1w1)	336(7)	470(5)	112(3)	110(50)
C(28)	1333(8)	2149(5)	2494(3)	54(5)	H(1w2)	362(7)	412(5)	72(3)	70(30)
C(29)	87(8)	1972(6)	2234(3)	58(5)	H(2w1)	-67(7)	362(5)	-65(3)	80(30)
C(210)	-240(7)	2211(5)	1641(3)	47(4)	H(2w2)	-86(7)	460(5)	-101(3)	90(30)
N(11)	3344(4)	5348(3)	1911(2)	33(3)	H(3w1)	415(7)	398(5)	-96(3)	100(60)
N(12)	1148(4)	5055(3)	1858(2)	35(3)	H(3w2)	385(7)	318(5)	-56(3)	90(50)
N(13)	135(4)	4736(4)	2186(2)	41(3)	H(4w1)	252(7)	563(5)	-148(3)	100(50)
N(14)	5108(5)	7881(4)	4332(2)	45(3)	H(4w2)	237(6)	489(6)	-167(3)	100(50)
N(21)	1419(4)	2908(3)	123(2)	30(3)	H(5w1)	247(7)	672(5)	-16(3)	60(20)
N(22)	2858(5)	2033(3)	-391(2)	37(3)	H(5w2)	299(6)	637(5)	30(3)	60(30)
N(23)	3159(5)	1141(3)	-551(2)	37(3)	H(6w1)	406(7)	702(5)	105(3)	60(30)
N(24)	1635(7)	1963(6)	3107(3)	88(6)	H(6w2)	252(6)	684(4)	117(4)	50(30)
O(1w)	3352(4)	4593(3)	689(2)	44(3)	H(7w1)	443(7)	842(5)	135(3)	50(30)
O(2w)	-500(4)	4243(3)	-731(2)	46(3)	H(7w2)	591(7)	793(5)	151(3)	50(30)
O(3w)	3627(4)	3824(3)	-636(2)	53(3)	H(8w1)	52(7)	811(5)	101(4)	70(30)
O(4w)	2088(4)	5247(4)	-1349(2)	53(3)	H(8w2)	49(7)	715(5)	129(3)	80(30)
O(5w)	2893(4)	6315(3)	-74(2)	41(2)					

Координационный полиэдр стронция по δ , ω , φ критериям [9] ($\delta_1 = 59^\circ$, $\delta_3 = 35^\circ$, $\delta_2 = \delta_4 = 55^\circ$, $\omega = 66^\circ$, $\varphi = 16^\circ$) и внешнему виду ближе всего к значительно искаженному додекаэдру. Найденные длины связей Sr—Lig (в пределах 2,549(4)—2,836(4) \AA) сравнимы с расстоянием,

Т а б л и ц а 2

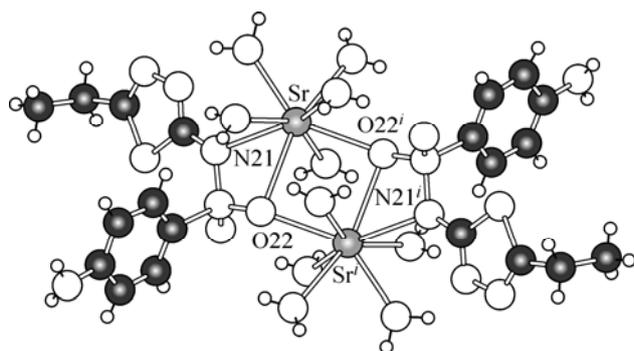
Межатомные расстояния (d , Å) и валентные углы (ω , град.) структуры $[\text{Sr}(\text{Aet})(\text{OH}_2)_5](\text{Aet}) \cdot 3\text{H}_2\text{O}$

Связь	d	Угол	ω	Угол	ω	Угол	ω
Sr—O(1w)	2,549(4)	O(22)SrO(1w)	84,2(1)	O(1w)SrO(4w)	131,6(1)	O(3w)SrO(4w)	71,4(1)
Sr—O(2w)	2,669(4)	O(22)SrO(2w)	63,5(1)	O(1w)SrO(5w)	73,0(1)	O(3w)SrO(5w)	99,7(1)
Sr—O(3w)	2,566(4)	O(22)SrO(3w)	121,4(1)	O(1w)SrN(21)	77,5(1)	O(3w)SrO(N21)	72,1(1)
Sr—O(4w)	2,608(4)	O(22)SrO(4w)	143,6(1)	O(1w)SrO(22) ¹	134,1(1)	O(3w)SrO(22) ¹	141,4(1)
Sr—O(5w)	2,572(4)	O(22)SrO(5w)	126,0(1)	O(2w)SrO(3w)	111,5(1)	O(4w)SrO(5w)	78,6(1)
Sr—N(21)	2,836(4)	O(22)SrN(21)	49,9(1)	O(2w)SrO(4w)	80,1(1)	O(4w)SrN(21)	122,5(1)
Sr—O(22)	2,827(3)	O(22)SrO(22) ¹	90,0(1)	O(2w)SrO(5w)	133,8(1)	O(4w)SrO(22) ¹	70,0(1)
Sr—O(22) ¹	2,680(3)	O(1w)SrO(2w)	146,1(1)	O(2w)SrN(21)	73,9(1)	O(5w)SrN(21)	150,6(1)
		O(1w)SrO(3w)	75,7(1)	O(2w)SrO(22) ¹	60,1(1)	O(4w)SrO(22) ¹	74,1(1)
						N(21)SrO(22) ¹	129,9(1)

Связь	$d(\text{I})$	$d(\text{II})$	Угол	$\omega(\text{I})$	$\omega(\text{II})$	Угол	$\omega(\text{I})$	$\omega(\text{II})$
C(4)—C(3)	1,510(7)	1,506(7)	C(4)C(3)C(2)	113,6(7)	112,3(5)	O(1)S(2)O(2)	114,8(2)	114,7(2)
C(3)—C(2)	1,486(5)	1,488(8)	C(3)C(2)S(1)	120,2(5)	122,6(4)	O(1)S(2)C(5)	106,7(2)	106,0(2)
C(2)—N(3)	1,287(7)	1,286(7)	C(3)C(2)N(3)	126,9(6)	124,0(5)	O(2)S(2)C(5)	108,0(2)	108,9(2)
C(2)—S(1)	1,744(6)	1,727(6)	N(3)C(2)S(1)	112,8(4)	113,2(4)	S(2)C(5)C(6)	121,0(4)	118,9(4)
N(3)—N(2)	1,380(6)	1,387(6)	C(2)N(3)N(2)	114,1(4)	113,8(4)	S(2)C(5)C(10)	119,1(4)	120,2(4)
S(1)—C(1)	1,742(4)	1,751(5)	C(2)S(1)C(1)	88,0(2)	88,0(2)	C(6)C(5)C(10)	119,7(5)	120,5(5)
N(2)—C(1)	1,323(6)	1,310(7)	S(1)C(1)N(2)	111,9(3)	111,8(4)	C(6)C(5)C(10)	119,7(5)	120,5(5)
C(1)—N(1)	1,360(6)	1,347(7)	S(1)C(1)N(1)	128,5(3)	128,3(3)	C(5)C(6)C(7)	120,2(5)	119,2(5)
N(1)—S(2)	1,586(4)	1,588(4)	N(2)C(1)N(1)	119,5(4)	119,7(4)	C(6)C(7)C(8)	120,6(5)	121,5(6)
S(2)—O(1)	1,443(3)	1,452(4)	N(3)N(2)C(1)	113,0(4)	112,9(4)	C(7)C(8)C(9)	118,5(5)	117,7(6)
S(2)—O(2)	1,440(4)	1,457(3)	C(1)N(1)S(2)	119,9(3)	120,9(3)	C(7)C(8)N(4)	120,5(5)	121,0(7)
S(2)—C(5)	1,760(5)	1,752(4)	N(1)S(2)O(1)	113,7(2)	113,4(2)	C(9)C(8)N(4)	120,8(5)	121,1(6)
C(5)—C(6)	1,384(3)	1,411(8)	N(1)S(2)O(2)	104,9(2)	103,1(2)	C(8)C(9)C(10)	121,0(5)	121,3(7)
C(6)—C(7)	1,376(9)	1,370(9)	N(1)S(2)C(5)	108,2(2)	110,4(2)	C(9)C(10)C(5)	119,7(5)	119,6(6)
C(7)—C(8)	1,399(9)	1,387(9)						
C(8)—C(9)	1,387(9)	1,415(9)						
C(9)—C(10)	1,380(9)	1,374(9)						
C(5)—C(10)	1,390(8)	1,366(9)						
C(8)—N(4)	1,406(8)	1,394(9)						

¹ $-x, -y+1/2, -z$.

найденным другими исследователями (например, [10 и 11]). Сравнимо и расстояние Sr—Sr 3,897(3) Å в димере (что на 0,407 Å меньше наименьшего расстояния между атомами стронция



в структуре металла — 4,304 Å) с литературными данными (3,8263(9) Å в [12]).

Анионы этазола образуются депротонированием группы NH. Один из них (I) — внешнесферный анион, другой (II) координирован к атому металла атомами N(21) и O(22), выполняя роль мостикового биден-

Рис. 3. Строение катиона $[(\text{H}_2\text{O})_5\text{Sr}(\text{Aet})_2\text{Sr}(\text{OH}_2)_5]^{2+}$

Т а б л и ц а 3

Параметры водородных связей в структуре [Sr(Aet)(OH₂)₅](Aet)·3H₂O

D—H...A	<i>d</i> (D—H), Å	<i>d</i> (H...A), Å	<i>d</i> (D...A), Å	Угол (DHA), град.
O(1w)—H(1w1)...N(11)	0,958(9)	1,977(9)	2,898(7)	160(2)
O(5w)—H(5w2)...O(6w)	0,826(9)	1,971(9)	2,767(7)	161(2)
O(1w)—H(1w2)...N(14) ¹	0,747(9)	2,247(9)	2,972(4)	163(2)
O(2w)—H(2w2)...N(12) ²	0,876(9)	1,937(9)	2,733(7)	150(1)
O(5w)—H(5w1)...O(21) ²	0,756(9)	2,091(9)	2,822(4)	162(1)
N(14)—H(14N2)...O(5w) ³	0,946(9)	2,063(9)	2,937(4)	152(1)

Пр и м е ч а н и е. Операторы симметрических преобразований генерации эквивалентных положений атомов: ¹ $-x+1, y+1/2, -z+1/2$, ² $-x, -y+1, -z$, ³ $x, y+3/2, z+1/2$.

татно-циклического лиганда. В образующемся четырехчленном цикле угол N(21)SrO(22) 49,9(1)° (по сравнению с другими углами при атоме металла) резко сокращен. Аналогичное значение угла в четырехчленных циклах для координационного числа восемь замечено и другими исследователями: 47,9(2) [12], 48,43(5) и 48,63(5)° [13]. Различие в кристаллохимической роли анионов этазола (координированного и внешнесферного) не сказывается на их геометрических параметрах. Пяти- и шестичленные кольца имеют практически плоское строение. Двугранные углы между плоскостями бензольного и пиримидинового колец (угол *ванны* — Θ) равны: 83,47° (I) и 89,40° (II). Двугранные углы (угол *гош*-конформации — Φ) между C(5)S(2)N(1) и S(2)N(1)C(1) равны: 69,48° (I) и 71,62° (II). В целом в анионах этазола валентные линейные и угловые параметры в пределах погрешности хорошо согласуются с литературными данными.

Молекулы воды в структуре образуют трехмерную систему водородных связей типа OH...O, OH...N и NH...O. Параметры, подтверждающие реальность водородных связей, приведены в табл. 3.

Проведенное исследование подтверждает высказанное нами ранее предположение о том, что в водном растворе этазол может образовывать комплексы с металлами, имеющими большие радиусы (катионы Sr²⁺ и Ba²⁺) [7].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Швелашвили А.Е., Миминошвили Э.Б., Соболев А.Н. и др. // Сообщения АН ГССР. – 1986. – **121**, № 1. – С. 85 – 88.
2. Швелашвили А.Е., Цкитишвили М.Г., Микадзе И.И. и др. // Изв. АН ГССР. – 1986. – **12**, № 1. – С. 17 – 24.
3. Цкитишвили М.Г., Микадзе И.И., Чрелашивили М.В. и др. Сб. Исследования в области химии комплексных и простых соединений некоторых переходных и редких металлов. – Тбилиси: Мецниереба, 1987. – С. 110 – 119.
4. Швелашвили А.Е., Миминошвили Э.Б., Бельский В.К. и др. // Тез. докл. Национал. кристаллохим. конф. – Черноголовка: ИПХ РАН, 1998. – С. 228.
5. Shvelashvili A., Tskitishvili M., Kviciani M. et al. // *Bullet. Georg. Acad. Sci.* – 2001. – **163**, № 1. – С. 74 – 77.
6. Миминошвили Э.Б., Едидберидзе Д.А., Миминошвили К.Э., Зазашивили С.Р. // *Georg. Engin. News.* – 2007. – **1**. – С. 51 – 54.
7. Миминошвили Э.Б., Миминошвили К.Э., Беридзе Л.А. // *Журн. структур. химии.* – 2009. – **50**, № 1. – С. 177 – 182.
8. *Sheldrick G.M. User manual, Revision 4, Nicolet XRD Corporation, USA, 1983.*
9. Порай-Кошиц М.А., Асланов Л.А. // *Журн. структур. химии.* – 1972. – **13**, № 2. – С. 266 – 276.
10. Kuratieva N.V., Naumova M.I., Podberezskaya N.V., Naumov D.Yu. // *Acta Crystallogr.* – 2005. – **C61**. – P. i14 – i16.
11. Stein I., Ruschewitz U. // *Ibid.* – **E61**. – P. i141 – i143.
12. Paluchowska B., Maurin J.K., Leciejewicz J. // *Ibid.* – 1996. – **C52**. – P. 342 – 347.
13. Lengauer C.L., Giester G. // *Ibid.* – 1997. – **C53**. – P. 870 – 872.