

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 542.953.3:547.855.7:548.737

МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА  
3,7-ДИМЕТИЛ-9-ТИА-3,7-ДИАЗАБИЦИКЛО[3.3.1]НОНАН-9,9-ДИОКСИДАЛ.И. Власова<sup>1</sup>, Н.З. Байбулатова<sup>1</sup>, С.А. Грабовский<sup>1</sup>, М. Хаукка<sup>2</sup>,  
В.А. Докичев<sup>1</sup>, Ю.В. Томилов<sup>3</sup><sup>1</sup>Институт органической химии Уфимского научного центра РАН, Уфа

E-mail: dokichev@anrb.ru

<sup>2</sup>Department of Chemistry, University of Eastern Finland, Joensuu, Finland<sup>3</sup>Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва

Статья поступила 16 февраля 2012 г.

Методом РСА установлена молекулярная структура 3,7-диметил-9-тиа-3,7-диазабицикло[3.3.1]нонан-9,9-диоксида, находящегося в конформации *кресло-кресло* с диэкваториальным расположением метильных групп при атомах азота. Соединение **1** C<sub>8</sub>H<sub>16</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>S кристаллизуется в пространственной группе *Pnma* с параметрами ячейки:  $a = 11,0262(3)$ ,  $b = 14,4490(3)$ ,  $c = 6,1780(3)$  Å.

**Ключевые слова:** рентгеноструктурный анализ, 3,7-диметил-9-тиа-3,7-диазабицикло[3.3.1]нонан-9,9-диоксид.

Значительный интерес к соединениям 3,7-диазабицикло[3.3.1]нонанового ряда вызван, в первую очередь, проявляемой ими высокой физиологической активностью широкого спектра действия (антиаритмической, анальгетической и т.д.) [1–3], во-вторых, возможностью использования этих бициклических гетероциклов в качестве новых полидентатных комплексных лигандов и в синтезе супрамолекулярных архитектур [4]. В кристаллических структурах 3,7-диазабицикло[3.3.1]нонанов наиболее характерной и предпочтительной является конформация *кресло-кресло*, однако некоторые производные, например, содержащие кетогруппу, принимают конформацию *кресло-ванна* [5, 6]. Ранее нами был разработан метод получения неизвестного класса бициклических азотистых гетероциклов, содержащих SO<sub>2</sub>-группу в 9-положении — 9-тиа-3,7-диазабицикло[3.3.1]нонан-9,9-диоксидов [7].

В настоящем сообщении излагаются результаты рентгеноструктурного анализа 3,7-диметил-9-тиа-3,7-диазабицикло[3.3.1]нонан-9,9-диоксида **1**, проведенного с целью установления влияния SO<sub>2</sub>-фрагмента на конформацию молекулы, ориентацию метильных заместителей при атомах N3 и N7, а также длины связей и валентных углов.

**Экспериментальная часть.** Синтез 3,7-диметил-9-тиа-3,7-диазабицикло[3.3.1]нонан-9,9-диоксида **1** и его характеристики описаны в работе [7].

**Рентгеноструктурный анализ соединения 1.** Бесцветные кристаллы C<sub>8</sub>H<sub>16</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>S ( $M = 204,29$ ),  $a = 11,0262(3)$ ,  $b = 14,4490(3)$ ,  $c = 6,1780(3)$  Å,  $V = 984,26(6)$  Å<sup>3</sup>, пространственная группа *Pnma*,  $Z = 4$ ,  $d_{\text{выч}} = 1,379$  г/см<sup>3</sup>,  $\mu = 0,300$  мм<sup>–1</sup>,  $F(000) = 440$ . Экспериментальный набор 14093 отражений получен на автодифрактометре Nonius KappaCCD при 100 К ( $\lambda$ MoK $_{\alpha}$ -излучение,  $\theta_{\text{max}} = 30,07^\circ$ ) с монокристалла размером 0,55×0,40×0,31 мм. Для уточнения параметров элементарной ячейки и предварительной обработки данных использовался пакет программ Denzo-Scalepac [8]. Структура расшифрована прямым методом в рамках комплекса программ