

ОПЕЧАТКА

По техническим причинам в ходе переписки с авторами при редакторской правке и корректировке статьи «АСИММЕТРИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ БРОМ- И ФТОРЗАМЕЩЕННЫХ (S)-ТИРОЗИНОВ И ИХ N-ВОС-ЗАЩИЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ», опубликованной в «Химическом журнале Армении», 2007 год, т.60, №1, стр. 61-72, из списка авторов статьи случайно была удалена одна из фамилий и на месте текста описания рентгеноструктурного эксперимента для комплекса **5a** оказался текст из статьи тех же авторов «Диастереоселективное присоединение Ni^{II}-комплекса основания Шиффа (S)-2-[N-(N'-бензил-пролил)амино]бензофенона и глицина к связи C=C этилового эфира α-бромакриловой кислоты» в журнале «Изв. РАН» сер. хим., 2004, №4.

Правильным следует считать следующий список авторов: "А.С. Сагиян, Э.П. Бабалян, А.В. Геолчанян, А.М. Оганесян, В.Н. Хрусталёв, Д.А. Припадчев и В.И. Малеев"

Корректные данные рентгеноструктурного эксперимента приведены ниже.

Рентгеноструктурный анализ комплекса 5a. Параметры элементарной ячейки и интенсивности 29662 ($R_{\text{int}} = 0.046$) отражений измерены на автоматическом дифрактометре Bruker SMART 1000 CCD ($T = 120$ K, $\lambda\text{MoK}\alpha$ -излучение, графитовый монохроматор, φ и ω -сканирование). Для полученных данных проведен учет поглощения рентгеновского излучения по программе SADABS [12]. Основные кристаллоструктурные данные представлены в таблице. Структура определена прямыми методами и уточнена полноматричным методом наименьших квадратов в анизотропном приближении для неводородных атомов. Кристалл содержит сольватную молекулу ацетонитрила. Атомы водорода сольватной молекулы ацетонитрила локализованы объективно в разностных фурье-синтезах и включены в уточнение в изотропном приближении с фиксированными позиционными и тепловыми ($U_{\text{изо}}(\text{H}) = 1.5U_{\text{экв}}(\text{C})$) параметрами. Положения остальных атомов водорода рассчитаны геометрически и уточнены в изотропном приближении с фиксированными позиционными (модель «наездника») и тепловыми ($U_{\text{изо}}(\text{H}) = 1.5U_{\text{экв}}(\text{C})$ для CH_3 -групп и $U_{\text{изо}}(\text{H}) = 1.2U_{\text{экв}}(\text{C})$ для всех остальных групп) параметрами. Абсолютная конфигурация асимметрических центров определена объективно уточнением параметра Флэка (таблица 2). Все расчеты проведены с использованием комплекса программ SHELXTL PLUS (Version 5.10) [13]. Таблицы координат атомов, длин связей, валентных углов и анизотропных температурных параметров для соединения **5a** x CH_3CN депонированы в Кембриджском Банке Структурных Данных.

Атом Ni имеет плоскоквадратную координацию с небольшим искажением вследствие стерических факторов (наличие замещенного бензильного фрагмента при атоме углерода C(2)). Это искажение можно описать как тетраэдрическое скручивание на 11.5° .

Пятичленный металлоцикл Ni(1)-O(1)-C(1)-C(2)-N(1) имеет конформацию конверта с отклонениями атома N(1) от плоскости остальных атомов цикла на 0.186 Å и с псевдоаксиальным расположением более объемистого заместителя при атоме углерода C(2). Шестичленный металлоцикл Ni(1)-N(1)-C(11)-C(12)-C(13)-N(2) имеет конформацию несим-

метричной полуванны (атомы Ni(1) и N(1) выходят из плоскости остальных атомов цикла в одну сторону на 0.618 и 0.371 Å). Конформация пятичленного металлоцикла Ni(1)-N(2)-C(24)-C(25)-N(3) – конверт с отгибом атома N(3) на 0.477 Å. Конформация пролинового гетероцикла N(3)-C(25)-C(26)-C(27)-C(28) также представляет конверт с отгибом атома C(25) на 0.617 Å.

Асимметрические атомы C(2), N(3) и C(25) в молекуле **5a** имеют абсолютные конфигурации *S*, *R* и *S*, соответственно. Наибольший интерес представляет ориентация заместителя CH₂Ph при атоме азота N(3). Этот заместитель имеет эндоориентацию относительно связи N(3)-C(29) с торсионным углом Ni(1)-N(3)-C(29)-C(30) -55.1(2)°. Таким образом, ароматическое ядро находится над атомом никеля, образуя с его средней координационной плоскостью двугранный угол 33.2°. Подобная ориентация реализуется в кристаллах всех ранее изученных аналогичных комплексов никеля с *S*-аминокислотным центром. Отметим, что эндоконформация заместителя CH₂Ph порождает весьма короткие невалентные контакты между атомом никеля и атомами углерода C(30) и C(31) фенильной группы: Ni(1)...C(30) 3.203(3) Å и Ni(1)...C(31) 3.359(3) Å.

Таблица

Основные кристаллографические данные и параметры комплекса **5a**

Соединение	5a x CH ₃ CN
брутто-формула	C ₃₇ H ₃₅ N ₄ O ₄ NiBr
молекулярная масса	738.31
Т, К	120
сингония	ромбическая
пространственная группа	<i>P</i> 2 ₁ 2 ₁ 2 ₁
<i>a</i> , Å	9.0855(6)
<i>b</i> , Å	11.9491(8)
<i>c</i> , Å	30.983(2)
α, град.	90
β, град.	90
γ, град.	90

Продолжение таблицы

$V, \text{\AA}^3$	3363.6(4)
Z	4
$d_c, \text{\AA} \cdot \text{см}^{-3}$	1.458
$F(000)$	1520
$\mu, \text{мм}^{-1}$	1.811
$2\theta_{\text{max}}, \text{град.}$	56
число измеренных отражений	29662
число независимых отражений	8061
число наблюдаемых отражений с $I > 2\sigma(I)$	6161
число уточняемых параметров	425
$R_1 (I > 2\sigma(I))$	0.0374
wR_2 (все данные)	0.0774
GOF	1.023
Параметр Флэка	0.000(7)
$T_{\text{min}}; T_{\text{max}}$	0.660; 0.716