

УДК 547.539.1+548.737

## РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ КОМПЛЕКСОВ 3-(1-АМИНО-2,2,2-ТРИФТОРЭТИЛИДЕН)-2-ИМИНО-1,1,4,5,6,7-ГЕКСАФТОРИНДАНА С ДИОКСАНОМ, ПИРАЗИНОМ И ПИРИДИНОМ

© 2007 Т.В. Рыбалова, В.М. Карпов\*, В.Е. Платонов, Ю.В. Гатилов\*

Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН

Статья поступила 30 мая 2006 г.

Получены монокристаллы комплексов 3-(1-амино-2,2,2-трифторэтилиден)-2-имино-1,1,4,5,6,7-гексафториндана (**1**) с 1,4-диоксаном, пиразином и пиридином и изучено их строение методом РСА. В кристалле комплекса с диоксаном соединение **1** содержится вместе со своим таутомером — 2-амино-3-(1-имино-2,2,2-трифторэтил)-1,1,4,5,6,7-гексафторинденом (**1a**), которые находятся, видимо, в равновесном соотношении ~60:40. Методом функционала плотности проведены газофазные квантовохимические расчеты возможного таутомерного равновесия енаминоимина **1** в соответствующих комплексах.

**Ключевые слова:** полифторированные енаминоимины, индан, инден, синтез, структура, рентгеноструктурный анализ, таутомеры, квантовохимические расчеты.

### ВВЕДЕНИЕ

Недавно методом РСА нами изучена молекулярная и кристаллическая структура 3-(1-амино-2,2,2-трифторэтилиден)-2-имино-1,1,4,5,6,7-гексафториндана **1** и его N-метил- и N,N'-диметилпроизводных **2—4** [ 1 ]. Их строение отражают формулы **1—4**, приведенные на схеме 1. Следует отметить, что в соединениях **1** и **2** как в кристалле, так и в растворе имеется внутримолекулярная водородная связь (ВМВС) N—H...N, а в соединениях **3** и **4** — отсутствует. При этом в растворе соединение **1** находится в равновесии со своим таутомером — 2-амино-3-(1-имино-2,2,2-трифторэтил)-1,1,4,5,6,7-гексафторинденом (**1a**) [ 2 ].

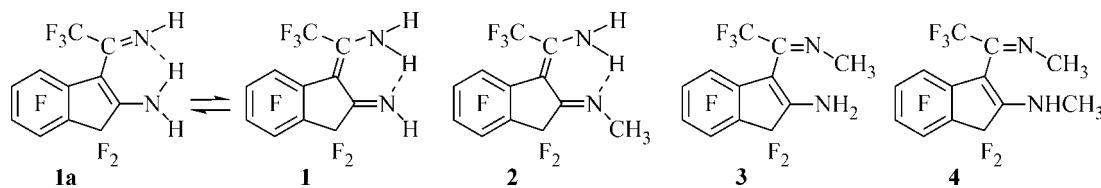


Схема 1

В связи с этим представляло интерес попытаться получить сокристаллы соединения **1** с какими-нибудь "растворителями" и изучить их методом РСА с целью обнаружения в кристаллическом состоянии таутомера (**1a**). Следует отметить, что в Кембриджской базе структурных данных (КБСД) содержится информация о большом количестве кристаллических структур комплексов металлов с енаминоимидами, в то время как данных о структуре свободных енаминоиминов существенно меньше [ 3 ]. При этом известны единичные случаи исследований такого рода соединений, содержащих обе незамещенные группы —NH<sub>2</sub> и =NH [ 4 ], а также соеди-

нений с трифторметильными группами, находящимися у атомов углерода енаминоиминной системы [ 5 ].

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Нам удалось получить кристаллические комплексы **5**, **6** и **7** соединения **1** с 1,4-диоксаном, пиразином и пиридином в соотношении 2:1 (**5**, **6**) и 1:1 (**7**) соответственно (схема 2) и провести для них рентгеноструктурный анализ.

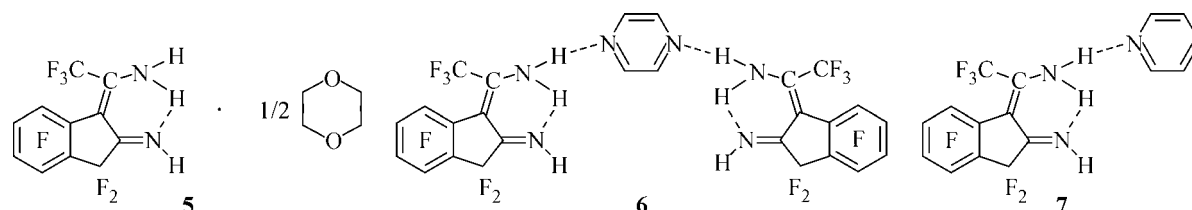


Схема 2

По данным РСА, молекулярные комплексы **5**—**7** образованы благодаря водородным связям между молекулами соединения **1** и соответствующего растворителя. Так, в случае комплекса **5** в образовании водородных связей типа N—H...O с молекулами 1,4-диоксана принимают участие как имино- (N1), так и амина- группы (N2) (рис. 1). Параметры связей N—H и водородных связей для N2—H2B...O1D следующие: N—H 0,91(4), H...O 2,16(4) Å, N2—H...O 158(3)° и для N1—H1A...O1D: N—H 0,84(3), H...O 2,21(4) Å, N1—H...O 164(3)°. За счет взаимодействия молекулы соединения **1** с двумя молекулами диоксана, расположенными в центрах симметрии, и за счет взаимодействия молекулы диоксана с четырьмя молекулами соединения **1** образуются ленты, направленные вдоль оси *c* (см. рис. 1).  $\pi$ -Стекинг-взаимодействия между бензольными кольцами (межплоскостное расстояние 3,56, межцентровое 3,880 Å) связывают между собой ленты, образуя 2D-мотив. При этом в  $\pi$ -стекинг-паре слегка сокращены контакты F1...F7 2,836 Å (сумма ВДВ-радиусов 2,92 Å [ 6 ]). Отметим также несколько сокращенные контакты H...F атомов водорода при C2D диоксана с атомами F6 (H...F 2,55 Å) и F1 (H...F 2,52 Å) (сумма ВДВ-радиусов 2,56 Å [ 6 ]).

В случае молекулярного комплекса **6** иминогруппа N1 в образовании H-связей не участвует. Для кристалла **6** можно говорить об образовании супермолекул, состоящих из двух молекул соединения **1** и молекулы пиразина (расположена в центре симметрии) и связанных H-связями N2—H2B...N1P с параметрами: N—H 0,88(3), H...N 2,15(4) Å, N1—H...N2 159(4)° (рис. 2).

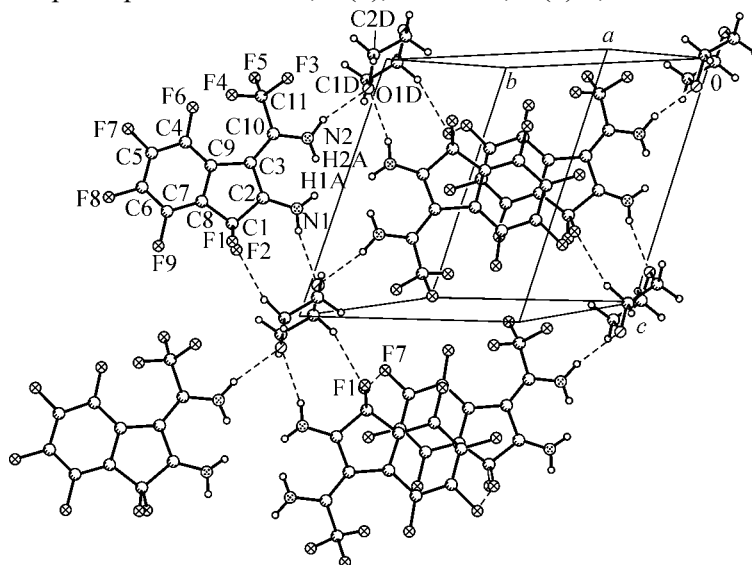


Рис. 1. Строение комплекса **5** (ленты молекул вдоль оси *c*,  $\pi$ -стекинг-взаимодействия между бензольными кольцами)

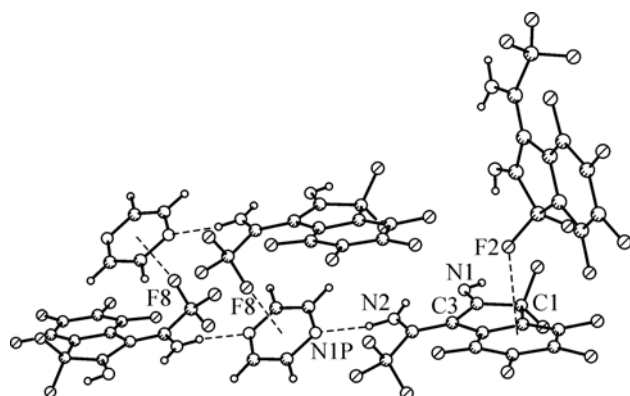


Рис. 2. Строение супермолекул в кристалле **6**. Показаны взаимодействия  $C10-F8 \dots \pi$ (пиразин) и  $C1-F2 \dots \pi$ (бензольное кольцо)

Взаимодействия  $C10-F8 \dots \pi$ (пиразин) с расстоянием  $F$  — центроид  $3,348 \text{ \AA}$  объединяют супермолекулы в цепочки вдоль оси  $a$ . При этом между цепочками наблюдаются сокращенные [6] контакты  $F8 \dots F8$  с расстоянием  $2,826 \text{ \AA}$ . Цепочки уложены в слои (рис. 3), для которых отметим межслоевые взаимодействия  $C1-F2 \dots \pi$ (бензольное кольцо) с расстояниями  $F$  — центроид  $3,177 \text{ \AA}$  (см. рис. 2).

При использовании пиридина в качестве растворителя естественно ожидать образования супермолекул, а не цепочек. Как видно на рис. 4, комплекс **7** представлен центросимметричными супермолекулами, состоящими из двух молекул соединения **1** и двух молекул пиридина, объединенных посредством водородных связей  $N \dots N$ . Необходимо отметить, что водородная связь  $N1-H \dots N1P$  с участием иминогруппы существенно слабее  $H$ -связи  $N2-H2B \dots N1P$  с участием аминогруппы. Параметры связей  $N-N$  и водородных связей для  $N1-N1A \dots N1P$  следующие:  $N-N$   $0,82(3)$ ,  $H \dots N$   $2,48(3) \text{ \AA}$ ,  $N-H \dots N$   $165(2)^\circ$ , а для  $N2-H2B \dots N1P$   $N-N$   $0,93(3)$ ,  $H \dots N$   $2,14(3) \text{ \AA}$ ,  $N1-H \dots N2$   $162(2)^\circ$ .  $\pi$ -Стекинг-взаимодействия между бензольными кольцами (межплоскостное расстояние  $3,54$ , межцентровое  $3,906 \text{ \AA}$ ) объединяют супермолекулы. Отметим также сокращенные контакты  $F1 \dots F4$   $2,850 \text{ \AA}$  между атомами фтора соседних супермолекул.

Углеродный скелет  $C1-C9$  молекулы соединения **1** в комплексах **5-7** плоский в пределах  $\pm 0,102(3)$ ,  $\pm 0,062(4)$  и  $\pm 0,114(3) \text{ \AA}$  соответственно. Указанная непланарность связана с конвертообразным искажением пятичленного цикла с углами перегиба цикла по линии  $C1-C3$   $8,5(3)$ ,  $4,4(3)$  и  $9,6(2)^\circ$  соответственно. Из анализа длин связей енаминоиминного фрагмента следует, что в комплексе **5** формально двойные связи  $N1=C2$  и  $C3=C10$  удлинены по сравнению с аналогичными связями в комплексах **6** и **7**, а формально ординарные связи  $C2-C3$  и  $C10-N2$ , напротив, укорочены (табл. 1). Такое распределение длин связей в комплексе **5** ближе всего к расчетной геометрии этого фрагмента для переходного состояния равновесия  $14 \rightleftharpoons 15$  (см. табл. 1). Отметим, что  $BMBC$   $N2-H \dots N1$  в гетерокристаллах **5-7 ослаблена по сравнению с гомокристаллом **1** (расстояния  $N1 \dots H$  и  $N1 \dots N2$  увеличены, см. табл. 1). Это ослабление**

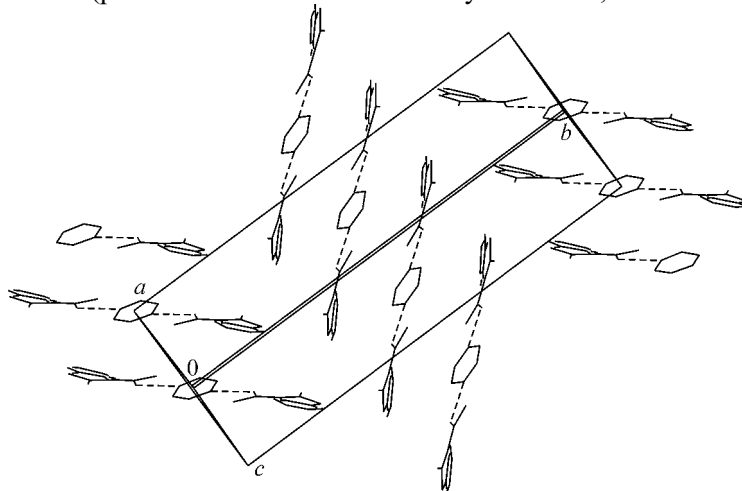
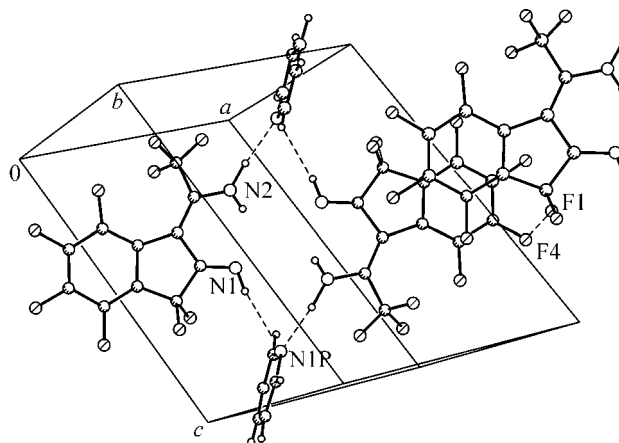


Рис. 3. Упаковка молекул комплекса **6** в кристалле (для упрощения рисунок атомы фтора и водорода не показаны)

Рис. 4. Строение супермолекул в кристалле 7  
( $\pi$ -стекинг-взаимодействия между бензольными кольцами)



вызвано, видимо, межмолекулярными водородными связями в гетерокристаллах.

С целью выяснения влияния растворителя/окружения на таутомерное равновесие для енаминомина **1** ( $1 \rightleftharpoons 1a$ ) мы провели газофазные квантовохимические расчеты молекулярных комплексов **1**:диоксан и **1**:пиридин в соотношениях 1:1 и 1:2 для каждого растворителя (схема 3).

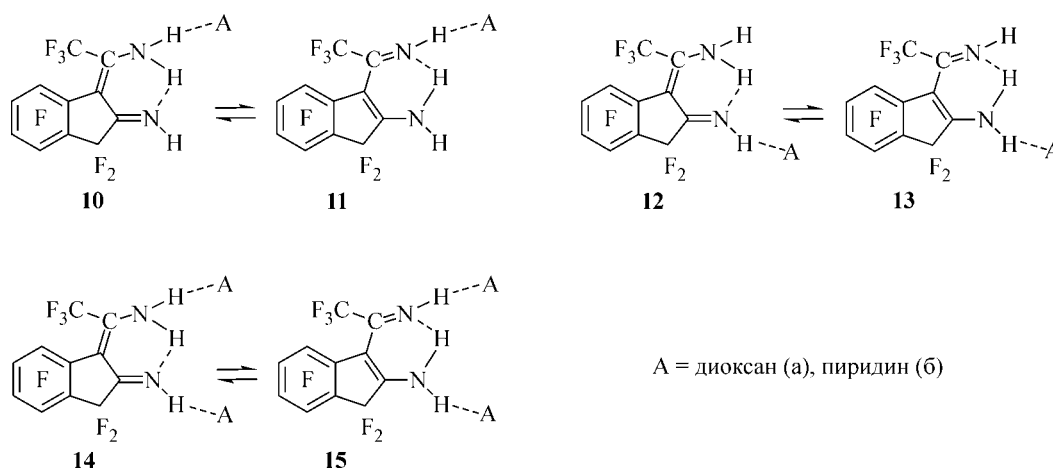


Схема 3

Т а б л и ц а 1

Экспериментальные (для соединения **1** и комплексов **5—7**) и рассчитанные (для переходного состояния  $14A \rightleftharpoons 15A$ ) длины связей (Å) фрагмента N1C2C3C10N2 и параметры ВМВС

Связь	1	5	6	7	$14A \rightleftharpoons 15A$
N1—C2	1,297(7)	1,286(4)	1,278(5)	1,278(3)	1,307
C2—C3	1,442(6)	1,431(3)	1,459(5)	1,445(3)	1,427
C3—C10	1,393(6)	1,399(4)	1,384(4)	1,389(3)	1,426
N2—C10	1,327(7)	1,305(4)	1,331(5)	1,318(3)	1,320
N2—H2A	1,13(7)	0,81(4)	0,79(5)	0,86(3)	1,308
N1...H2A	1,65(7)	2,03(4)	2,04(3)	2,04(3)	1,247
N1...N2	2,644(7)	2,683(4)	2,652(6)	2,690(3)	2,447

При оптимизации геометрии этих супермолекул в качестве стартовой брали их геометрию в кристалле. Проведенные расчеты (табл. 2) показали, что в случае комплексов с соотношением 1:1 предпочтительным является взаимодействие молекулы растворителя с аминогруппой, а не с иминогруппой. При этом равновесие заметно сдвигается в сторону таутомера, в котором с молекулой растворителя связана аминогруппа. В соответствии с этим повышаются (до 6,6 ккал/моль) барьеры перегруппировок  $10 \rightarrow 11$  и снижаются (до 2,8 ккал/моль) барьеры  $12 \rightarrow 13$  по сравнению с барьером (4,6 ккал/моль [1]) в свободной молекуле **1**. Однако для ком-

Т а б л и ц а 2  
*Рассчитанные относительные энергии  $\Delta E$  и барьеры  $\Delta E^\ddagger$  таутомерного переноса ( $\rightarrow$ ) атома водорода, ккал/моль*

Соединение	Диоксан (а)		Пиридин (б)	
	$\Delta E$	$\Delta E^\ddagger$	$\Delta E$	$\Delta E^\ddagger$
<b>10</b>	0,0 <sup>а</sup>	6,1	0,0 <sup>б</sup>	6,6
<b>11</b>	4,1		4,9	
<b>12</b>	1,4	3,2	1,8	2,8
<b>13</b>	0,5		0,1	
<b>14</b>	0,0 <sup>с</sup>	4,6	0,0 <sup>д</sup>	4,5
<b>15</b>	1,3		1,2	
<b>1</b>	0,0 <sup>с</sup>	4,6 <sup>с</sup>		
<b>1а</b>	1,9 <sup>с</sup>			

<sup>а,б,с,д</sup>) Полные энергии (Н): <sup>а</sup>)  $E = -1735,571413$ ,

<sup>б</sup>)  $E = -1676,224142$ , <sup>с</sup>)  $E = -2042,987515$ ,

<sup>д</sup>)  $E = -1924,291281$ .

<sup>с</sup>) Для молекул без диоксана [ 1 ].

плексов **14**, **15** с соотношением 1:2 происходит взаимная компенсация влияния растворителя, связанного с двумя азотсодержащими функциональными группами соединения **1**, и термодинамика перегруппировок **14**  $\rightleftharpoons$  **15** близка к таковой для свободной молекулы **1**. Проведенные расчеты согласуются с наличием разупорядоченности атома водорода Н1А-Н2А в кристалле **5** (см. рис. 1) и отсутствием разупорядоченности в кристаллах **6** и **7**, в которых иминогруппа N1 практически не участвует в образовании водородных связей.

Таким образом, нами получены сокристаллы 3-(1-амино-2,2,2-трифторэтилиден)-2-имино-1,1,4,5,6,7-гексафториндана **1** с диоксаном, пиразином и пиридином, изучена их молекулярная и кристаллическая структура. Методом функционала плотности проведены квантовохимические расчеты возможного таутомерного равновесия в этих комплексах и получены низкие барьеры перехода атома водорода для комплекса соединения **1** с диоксаном.

#### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Квантовохимические расчеты методом функционала плотности PBE с базисом TZ2P проведены с помощью программы PRIRODA [ 7 ].

**Получение монокристаллов. Комплекс 5.** Смесь 0,1 г соединения **1** ( $T_{пл} = 67\text{—}68\text{ }^\circ\text{C}$  [ 1 ]) и 0,04 г 1,4-диоксана растворяли при нагревании в  $\text{CCl}_4$  и затем охлаждали до комнатной температуры. Получали кристаллы комплекса **5** с  $T_{пл} = 68\text{—}86\text{ }^\circ\text{C}$ .

**Комплекс 6.** Аналогично предыдущему эксперименту из 0,045 г соединения **1** и 0,015 г пиразина получали кристаллы комплекса **6** с  $T_{пл} = 77\text{—}85\text{ }^\circ\text{C}$ .

**Комплекс 7.** Монокристаллы комплекса **7** ( $T_{пл} = 42\text{—}48\text{ }^\circ\text{C}$ ) получали при медленном испарении  $\text{CCl}_4$  из раствора 0,05 г соединения **1** и 0,03 г пиридина.

**Рентгеноструктурный анализ.** Рентгеноструктурное исследование комплексов провели на дифрактометре Bruker P4 ( $\text{MoK}_\alpha$ -излучение, графитовый монохроматор,  $\theta/2\theta$ -сканирование) при комнатной температуре. Для предотвращения разрушения кристаллы покрывали тонким слоем клея ПВА. Структуры комплексов **5—7** расшифровали прямым методом по программе SHELXS-97 и уточнили методом наименьших квадратов в анизотропно-изотропном приближении по программе SHELXL-97. Положения атомов водорода в комплексах **5—7** взяли из разностного синтеза. Кристаллографические данные соединений **5—7** и параметры рентгенодифракционных экспериментов приведены в табл. 3, координаты неводородных атомов — в табл. 4—6.

После уточнения структуры комплекса **5** в имино(N1)-аминном(N2) варианте рассмотрение пиков разностного синтеза показало, что первый по величине пик расположен у атома N1 (см. рис. 1). Это навело на мысль о возможной разупорядоченности атома водорода вследствие таутомерного переноса. Уточнение структуры в этом варианте привело к соотношению факторов занятости позиции 0,38(5):0,62(5) для атомов Н1а и Н2а. В случае соединений **6** и **7** у атома N1 находился более слабый пик разностного синтеза, уточнение фактора занятости которого дало в пределах погрешности нулевое значение. В качестве литературного примера разупорядоченности атома водорода вследствие кето-енольной таутомерии можно привести прецизионные исследования ацетилацетона [ 8 ].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 06-03-32229).

Т а б л и ц а 3

## Кристаллографические данные соединений и параметры экспериментов

Параметр	5	6	7
Химическая формула	$C_{11}H_3F_9N_2$ + $1/2(C_4H_8O_2)$	$C_{11}H_3F_9N_2$ + $1/2(C_4H_4N_2)$	$C_{11}H_3F_9N_2$ + $1(C_3H_5N)$
Мол. вес	378,21	374,20	413,25
Сингония	Триклинная	Моноклинная	Триклинная
Пространственная группа	$P-1$	$P2_1/c$	$P-1$
Область $\theta$ , град.	2,12—22,49	2,60—25,00	2,44—25,09
Параметры ячейки			
$a$ , Å	8,7162(6)	6,465(1)	8,380(2)
$b$ , Å	8,7898(8)	25,972(3)	9,030(3)
$c$ , Å	10,4109(8)	8,249(1)	12,344(3)
$\alpha$ , град.	77,461(7)		69,10(2)
$\beta$ , град.	69,353(5)	95,57(2)	73,42(2)
$\gamma$ , град.	78,722(6)		77,58(2)
$V$ , Å <sup>3</sup>	722,4(1)	1378,6(3)	829,6(4)
$Z$	2	4	2
$\rho$ (расч.), г/см <sup>3</sup>	1,739	1,803	1,654
$\mu$ , мм <sup>-1</sup>	0,191	0,196	0,171
Размер кристалла, мм	0,6×0,4×0,2	1,0×0,4×0,4	0,9×0,5×0,3
Число отражений измерен./независ.	2033/1882	2614/2413	3089/2876
Учет поглощения	Эмпирически	Эмпирически	Эмпирически
Трансмиссия	0,9693—0,9450	0,9858—0,8120	0,9924—0,6062
Число отражений [ $I > 2\sigma(I)$ ]	1348	1543	2261
Число уточняемых параметров	260	247	266
$R_1$ для [ $F > 4\sigma(F)$ ]	0,0326	0,0597	0,0425
$wR_2$ для всех отражений	0,0882	0,1880	0,1205
GOOF	1,032	1,037	1,025

Т а б л и ц а 4

Атомные координаты ( $\times 10^4$ ) и тепловые параметры ( $\text{Å}^2 \times 10^3$ ) неводородных атомов комплекса 5

Атом	$x$	$y$	$z$	$U_{\text{экв}}$	Атом	$x$	$y$	$z$	$U_{\text{экв}}$
C(1)	1752(3)	3530(3)	6390(3)	61(1)	F(1)	2762(2)	2507(2)	7027(2)	80(1)
C(2)	1347(3)	2733(3)	5423(2)	56(1)	F(2)	369(2)	3920(2)	7460(2)	82(1)
C(3)	2067(3)	3480(3)	4024(2)	55(1)	F(3)	3654(3)	1915(3)	799(2)	117(1)
C(4)	3234(3)	6186(3)	3158(3)	64(1)	F(4)	4683(2)	3547(2)	1407(2)	92(1)
C(5)	3632(3)	7407(4)	3565(4)	74(1)	F(5)	2593(2)	4324(3)	685(2)	101(1)
C(6)	3496(4)	7386(4)	4918(4)	80(1)	F(6)	3330(2)	6374(2)	1813(2)	86(1)
C(7)	2934(4)	6111(4)	5883(3)	74(1)	F(7)	4125(2)	8663(2)	2604(2)	102(1)
C(8)	2527(3)	4905(3)	5490(3)	60(1)	F(8)	3896(3)	8587(2)	5282(2)	118(1)
C(9)	2689(3)	4885(3)	4103(3)	56(1)	F(9)	2769(2)	6078(2)	7226(2)	101(1)
C(17)	2113(3)	2785(3)	2921(3)	62(1)	O(1D)	472(3)	61(3)	1148(2)	85(1)
C(18)	3263(4)	3165(4)	1444(3)	77(1)	C(1D)	-820(7)	1143(5)	783(4)	108(2)
N(1)	505(3)	1566(4)	5851(3)	74(1)	C(2D)	1641(5)	-439(6)	-78(4)	102(1)
N(2)	1231(4)	1666(4)	3109(3)	80(1)					

Т а б л и ц а 5

Атомные координаты ( $\times 10^4$ ) и тепловые параметры ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) неводородных атомов комплекса 6

АТОМ	x	y	z	$U_{\text{ЭКВ}}$	АТОМ	x	y	z	$U_{\text{ЭКВ}}$
N(1)	-7865(6)	6788(2)	42(5)	74(1)	F(1)	-3303(4)	6923(1)	97(3)	86(1)
C(1)	-4397(6)	7007(1)	1408(5)	55(1)	F(2)	-4701(4)	7527(1)	1450(4)	86(1)
N(2)	-9644(5)	5989(2)	1348(4)	60(1)	F(3)	-4960(5)	5957(1)	6036(3)	100(1)
C(3)	-6467(5)	6350(1)	2527(4)	44(1)	F(4)	-1238(5)	6220(1)	7363(3)	96(1)
C(4)	-3815(7)	6261(2)	5164(5)	61(1)	F(5)	1186(4)	6896(1)	5912(3)	81(1)
C(5)	-1908(7)	6419(2)	5891(4)	62(1)	F(6)	-283(4)	7320(1)	3008(3)	78(1)
C(6)	-679(6)	6762(2)	5177(5)	58(1)	F(7)	-9085(5)	5130(1)	2820(4)	112(1)
C(7)	-1430(6)	6970(1)	3700(5)	54(1)	F(8)	-6038(5)	5312(1)	3775(3)	82(1)
C(8)	-3292(5)	6809(1)	2961(4)	46(1)	F(9)	-8583(5)	5604(1)	4965(3)	96(1)
C(9)	-4551(5)	6440(1)	3624(4)	46(1)	N(1P)	-13185(6)	5264(1)	548(4)	67(1)
C(10)	-8005(5)	5977(1)	2456(4)	46(1)	C(2P)	-13498(8)	4777(2)	965(5)	68(1)
C(11)	-7923(7)	5508(2)	3538(5)	62(1)	C(3P)	-15304(7)	4518(2)	415(5)	65(1)

Т а б л и ц а 6

Атомные координаты ( $\times 10^4$ ) и тепловые параметры ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) неводородных атомов комплекса 7

АТОМ	x	y	z	$U_{\text{ЭКВ}}$	АТОМ	x	y	z	$U_{\text{ЭКВ}}$
N(1)	3046(7)	3994(7)	5643(6)	77(2)	F(2)	-68(5)	2749(4)	7065(3)	86(1)
C(1)	874(8)	2253(8)	6116(6)	66(2)	F(3)	-11(5)	4000(5)	2223(4)	97(1)
N(2)	4223(9)	5295(8)	3286(6)	84(2)	F(4)	-2686(5)	2531(5)	2919(4)	111(2)
C(2)	2089(8)	3410(7)	5303(6)	61(2)	F(5)	-3807(5)	799(6)	5225(4)	119(2)
C(3)	1979(8)	3709(7)	4084(5)	59(2)	F(6)	-2095(5)	547(5)	6864(4)	104(2)
C(4)	-413(9)	3110(8)	3372(7)	71(2)	F(7)	5059(6)	4709(6)	1308(4)	118(2)
C(5)	-1847(10)	2375(9)	3732(8)	81(2)	F(8)	2510(6)	5681(5)	1260(3)	101(1)
C(6)	-2422(9)	1520(9)	4878(9)	83(2)	F(9)	3188(5)	3149(5)	1844(3)	98(1)
C(7)	-1530(9)	1397(8)	5705(7)	76(2)	N(1P)	3302(9)	2491(10)	8460(6)	102(2)
C(8)	-127(8)	2112(7)	5376(6)	63(2)	C(2P)	3832(11)	988(15)	8480(7)	107(3)
C(9)	527(8)	2981(7)	4172(6)	62(2)	C(3P)	3238(13)	-312(12)	9395(10)	118(3)
C(10)	3157(9)	4501(8)	3163(6)	66(2)	C(4P)	2035(14)	-19(14)	10295(8)	117(3)
C(11)	3475(10)	4512(10)	1887(7)	81(2)	C(5P)	1451(11)	1481(14)	10296(8)	109(3)
F(1)	1734(5)	810(4)	6660(3)	83(1)	C(6P)	2129(12)	2684(10)	9353(8)	104(3)

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Карпов В.М., Платонов В.Е., Рыбалова Т.В., Гатилов Ю.В. // Журн. структур. химии – 2006. – 47, № 3. – С. 532 – 539.
2. Чуйков И.П., Карпов В.М., Платонов В.Е. // Изв. АН СССР. Сер. хим. – 1990. – № 8. – С. 1856 – 1865.
3. Cambridge Structural Database. Version 5.26. University of Cambridge, UK.
4. Zhou M., Liu D.-S., Huang S.-P., Tong H.-B. // Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online. – 2003. – 59, N 3. – P. o310 – o311.
5. Carey D.T., Cope-Eatough E.K., Vilapana-Mafe E. et al. // Dalton Trans. – 2003. – P. 1083 – 1093.
6. Rowland R.S., Taylor R. // J. Phys. Chem. – 1996. – 100. – P. 7384 – 7391.
7. Laikov D.N. // Chem. Phys. Lett. – 1997. – 281. – P. 151 – 156.
8. Boese R., Antipin M.Yu., Blaeser D., Lyssenko K.A. // J. Phys. Chem. – 1998. – B102. – P. 8654 – 8660.