

**БРОМИРОВАНИЕ АММОНИЕВЫХ СОЛЕЙ,
СОДЕРЖАЩИХ ПРОП-2-ИН-1-ИЛЬНУЮ ГРУППУ**

**А. Х. ГЮЛЬНАЗАРЯН, Т. А. СААКЯН, А. Б. ЕРЕМЯН, Г. М. МУРАДЯН,
Р. А. ТАМАЗЯН, А. Г. АЙВАЗЯН и Г. А. ПАНОСЯН**

Научно-технологический центр органической и фармацевтической химии
НАН Республики Армения
Армения, 0014, Ереван, пр. Азатутян, 26
E-mail: ara.gyulnazaryan@gmail.com

Поступило 18 V 2018

Исследовано бромирование аммониевых солей, содержащих пропаргильную группу. Установлено, что вопреки теоретическим представлениям, в основном, образуются продукты цис-присоединения.

Рис 1, библиографических ссылок 13.

Согласно имеющимся представлениям теории органической химии относительно бромирования тройной связи органических молекул, первоначально имеет место тыловая атака бром-аниона на промежуточно образующийся бромониевый катион, вследствие чего образуются продукты транс-присоединения.

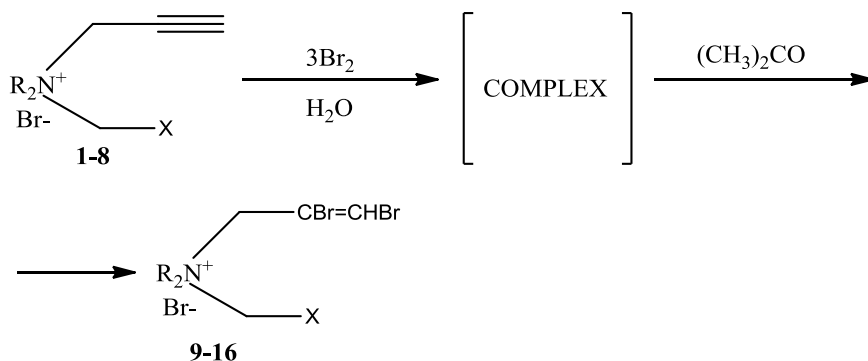
Следует отметить, что бромирование четвертичных аммониевых солей, содержащих в одном из радикалов ацетиленовую связь, изучалось довольно спорадически. До наших исследований [1,2], посвященных бромированию аммониевых солей, содержащих ацетиленовую группировку, были лишь одиночные примеры, опубликованные в конце XIX и середине XX столетий [3-5]. Практически в результате большинства проведенных исследований наблюдалось транс-присоединение, хотя японские авторы при использовании комплексных галоидирующих агентов зафиксировали образование продуктов E- и Z-бромирования [6].

Продукты транс-присоединения к ацетиленовой связи были получены также при бромировании гидробромидов (третичных аммониевых

солей) 1,4-бис-аминов, содержащих общую бутин-2-иленовую группу [7,8]. Транс-конфигурация полученных дибромсоединений была доказана рентгеноструктурным анализом.

Ранее нами было показано, что бромирование аммониевых солей, содержащих две пропаргильные группы, приводит к образованию циклических соединений — производных пирролиния, в которых два атома брома находятся у терминального атома углерода [9,10].

В продолжение исследований, посвященных превращениям аммониевых солей, содержащих группы пропаргильного типа [10], нами осуществлено бромирование аммониевых солей **1-8**, содержащих проп-2-инильные группы.



1,9 R=CH₃, X=H; **2,10** R=C₂H₅, X=CH₃; **3,11** R₂=(CH₂)₅, X=CN; **4,12** R₂=O(CH₂)₄, X=COC₆H₅; **5,13** R₂=O(CH₂)₄, X=COOCH₃; **6,14** R₂=O(CH₂)₄N, X=CN; **7,15** R₂N=(CH₂)₅, X=COOCH₃; **8,16** R=C₂H₅, X=CN; **9**. Z:E = 90:10%, **10**. E=100%, **11**. Z:E=50:50%, **12**. Z:E = 80:20%, **13**. Z:E = 80:20%, **14**. Z:E = 50:50%, **15**. Z:E = 50:50%, после перекристаллизации **15a** Z = 100%, **15b** E=100%, **16**. E=100%

Результаты бромирования оказались довольно неожиданными. В шести из восьми исследованных соединений сигналы водорода группы CHBr в спектрах ЯМР ¹H проявляются в виде двух отдельных синглетов в областях 7.8-7.9 и 8.00-8.20 м.д., что, по нашему мнению, свидетельствует об образовании цис- и транс-изомерных соединений. Однако сделать выбор между возможными изомерами, опираясь лишь на данные ЯМР ¹H спектроскопии, было бы некорректно. Однако нам удалось перекристаллизацией соли **15** из этилового спирта разделить эти изомеры и с помощью NOEZY спектроскопии однозначно доказать, что сигналы в области 7.97-8.00 относятся к цис-изомеру. Следует отметить, что строение соединения **15a** нам удалось подтвердить рентгеноструктурным анализом полученного монокристалла, в котором атомы брома находятся в цис-положении к двойной связи.

Рентгенструктурным анализом соединения **15a** выявлено, что молекула исследуемого соединения является солью с положительно заряженным четвертичным атомом азота (N1) и анионом брома (Br1) (рис.). Молекула имеет Z-конфигурацию, атомы брома (Br2, Br3) аллильной группы расположены в цис-конфигурации. Конформационные расчеты показали, что пиперидиниевое кольцо имеет конформацию кресла, атомы C2, C3, C5 и C6 расположены в плоскости (максимальное отклонения 0,0079(2)Å), а атомы N1 и C4 отклонены от плоскости кресла на 0.6823(2) и -0.6764(2)Å, соответственно.

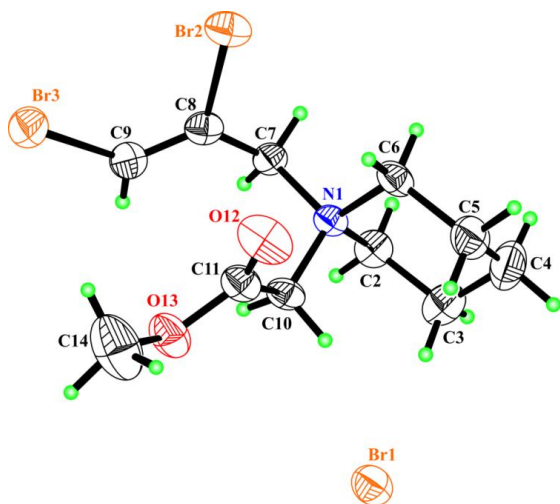


Рис. Структура молекулы **15a** с нашей нумерацией атомов, эллипсоиды анизотропных тепловых колебаний представлены на уровне 50% вероятности.

В стабилизации упаковки участвуют ионное взаимодействие аниона Br1⁻ и четвертичного атома азота N1⁺. А остальные межмолекулярные взаимодействия в основном обусловлены вандерваальсовскими силами.

Из общей картины выпадали соли **2** и **8**, бромирование которых привело к транс-продуктам присоединения, что было доказано с помощью спектров ЯМР ¹H и NOEZY.

У нас нет однозначного ответа относительно наблюдаемой аномалии, однако можно полагать, что этильные группы у аммонийного азота оказывают стерическое влияние на ход реакции.

Исходя из вышесказанного можно констатировать, что бромирование аммониевых солей, содержащих пропаргильную группу, приводит как к цис-, так и к транс-продуктам присоединения.

Экспериментальная часть

ИК-спектры сняты на приборе "Specord IR-75" в вазелиновом масле или в тонком слое.

Спектры ЯМР получены на спектрометре Varian "Mercury – 300VX" с рабочей частотой 300 (^1H) и 75.453 (^{13}C) в $\text{DMCO-}d_6$. Химические сдвиги приведены относительно внутреннего стандарта – ТМС. Анализ методом ТСХ осуществлен на пластинках "Silufol UV-254" в системе растворителей *n*-бутанол – этанол – вода – уксусная кислота, 10:7:6:4. Проявитель – пары йода. Температуры плавления измеряли на микронагревательном столике "Voetius" с наблюдательным устройством "РНМК-0.5". УФ-спектры получены на спектрометре "Specord M-40".

Исходные аммониевые соли **1-8** синтезированы согласно [1,8].

Дифракционные измерения проведены при комнатной температуре на автодифрактометре "Enraf-Nonius CAD-4" (графитовый монохроматор, Mo-K_α излучение, $\theta/2\theta$ -сканирование). Параметры триклинной элементарной ячейки определены и уточнены по 25 рефлексам с $13.9 < \theta < 15.8$. Структура расшифрована прямым методом. Учет поглощения проведен по методу пси-скана [11]. Координаты атомов водорода определены по геометрическим расчетам и уточнены по модели «наездника» со следующими условиями: длина связей $\text{C-H} = 0.96 \div 0.97 \text{ \AA}$, $U_{\text{iso}}(\text{H}) = 1.2 \div 1.5 U_{\text{eq}}(\text{C})$. Структура уточнена полноматричным МНК в анизотропном приближении для неводородных атомов и изотропном – для атомов водорода. Все структурные расчеты проведены по комплексу программ SHELXTL [12].

Кристаллографические данные в формате CIF депонированы в Кембриджском центре кристаллографических данных, номер депозита CCDC 1829659.

Общая методика бромирования аммониевых солей 1-8. К раствору 0.025 моля исходной соли в 50 мл воды при комнатной температуре и интенсивном перемешивании добавляли по каплям 16 г (0.1 моля) брома. Фильтрованием выделяли образовавшиеся комплексы брома с аммониевыми солями. В УФ-спектрах комплексов имеются поглощения в областях 220 и 270 нм, характерные для анионов Br_3^- [13]. Комплексы аммониевых солей с бромом отфильтровывали и сушили. После разложения комплексов ацетоном марки "х.ч." выделяли продукты бромирования, промывали абс. эфиром и сушили в эксикаторе. Выходы количественные.

(Z,E)-2,3-Дибром-N,N,N-триметилпроп-2-ен-1-аммоний бромид (9) получен бромированием соли **1**, т.пл. 200°C . R_f 0.276. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 1580, 1600 (=CBr), Спектр ЯМР ^1H , δ , м.д.: 3.25(9H, с, N^+CH_3), 4.62(0.2 H, с, $\text{CH}_2\text{CBr}=\text{}$), 4.85 (1.8 H, с, $\text{CH}_2\text{CBr}=\text{}$), 7.68 (0.1 H, с, CHBr), 8.21 (0.9 H, с, CHBr). М 337.9. М(найдено) 340.5. Найдено, %: N 4.41; Br(общ.) 70.00. $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{NBr}_3$. Вычислено, %: N 4.14; Br(общ.) 70.96.

(E)-2,3-Дибром-N,N,N-триэтилпроп-2-ен-1-аммоний бромид (10) получен бромированием соли **2**, т. пл. 160°C . R_f 0.29. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 1580, 1600 (=CBr), Спектр ЯМР ^1H , δ , м.д., Гц: 4.42(9H, т, $\text{N}^+\text{CH}_2\text{CH}_3$, J=7,0),

3.59(6 Н, κ, CH_2CH_3), 4.48(2Н, с, $\text{CH}_2\text{CBr=}$), 7.65 (1Н, с, CHBr). ^{13}C 7.97 (CH_3), 54.02 ($\text{N}^+(\text{CH}_3)$), 59.390 (CH_2CBr), 110.77 ($=\text{CBr}$), 118.38($=\text{CH}$). Согласно спектру NOEZY, транс-соединение. М 379.967. М(найдено) 381.5. Найдено, %: N 3.75; Br(общ.) 62.50. $\text{C}_9\text{H}_{18}\text{NBr}_3$. Вычислено, %: N 3.69; Br(общ.) 63.09.

(Z,E)-1-(Цианметил)-1-(2,3-дибромаллил)пиперидин-1-ониум бромид (11) получен бромированием соли **3**, т.пл. 112-113°C. R_f1 0.29, R_f2 0.35. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 1590,1600 ($=\text{CBr}$), 2240 (CN), Спектр ЯМР ^1H , δ , м.д.: 1.65-2.2 (6Н, м, $\beta,\beta,\gamma\text{-CH}_2$ кольца), 3.65-4.05 (4Н, м, $\alpha,\alpha\text{-CH}_2$), 4.95(1Н, с, CHCBr=), 5.20 (1Н, с, CHCBr=), 5.39 и 5.42 (2Н, с, CH_2CN), 7.80 (0.5 Н, с, CHBr), 8.47 (0.5 Н, с, CHBr), ^{13}C : 19,05 (2С, $\beta,\beta'\text{-CH}_2$), 19.85(2С, $\gamma\text{-CH}_2$), 49.6(NCH_2), 60.0(2С, $\alpha,\alpha'\text{-CH}_2$), 62,45 (CH_2CBr), 110,99 ($=\text{CBr}$), 120,52($=\text{CH}$). Согласно спектру NOEZY, смесь цис-транс-изомеров. М 402.97. М(найдено) 405.5. Найдено, %: N 7.13; Br 19.58. $\text{C}_{10}\text{H}_{15}\text{NBr}_3$. Вычислено, %: N 6.95; Br 19.85.

(Z,E)-4-(2,3-Дибромаллил)-4-(2-оксо-2-фенилэтил)морфолин-4-ониум бромид (12) получен бромированием соли **4**. Гигр., R_f 0.585. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 690, 710 (монозамещенное бензольное кольцо), 14870, 1600 (C_6H_5), 1590.1605 ($=\text{CBr}$), 1695(C=O), Спектр ЯМР ^1H , δ , м.д.: 3.77-4.21 (4Н, м, $\text{N}^+\text{CH}_2\text{-морф.}$), 4.31-6.21 (4Н, м, $\text{OCH}_2\text{-морф.}$), 5.02 (1.6 Н, с) и 5.21 (0,4 Н, с, $\text{CH}_2\text{C=O}$), 5.81 (0,4 Н, с) и 5.99 (1,6 Н, с, $\text{CH}_2\text{CBr=}$), 7.45-7.75 (5 Н, м, C_6H_5), 7.92 (0.2 Н, с, CHBr), 8.05 (0.8 Н, с, CHBr). М 484.03. М(найд.) 487.5. Найдено, %: N 2.56; Br(общ.) 49.05. $\text{C}_{15}\text{H}_{18}\text{NO}_2\text{Br}_3$. Вычислено, %: N 2.89; Br(общ.) 49.58.

(Z,E)-4-(2,3-Дибромаллил)-4-(2-метокси-2-оксиэтил)морфолин-4-ониум бромид (13) получен бромированием соли **5**. Т.пл. 142-133°C. R_f1 0.448, R_f2 0.586. 54,93. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 1720 (C=O), 1590.1600 ($=\text{CBr}$), Спектр ЯМР ^1H , δ , м.д.: 3.66-3.77 (2Н, м), 3.83-3.92(2Н, м) и 3.94-4.08 (4Н, м, $\text{O}(\text{CH}_2\text{CH}_2)_2\text{N}$), 3.79 (3Н, с, OCH_3), 4.77 (1.6 Н, с) и 4.84(0.4 Н, с, $\text{N}+\text{CH}_2\text{CO}$), 4.87 (0.4 Н, с) и 4.97 (1.6 Н, с, $\text{N}^+\text{CH}_2\text{C=}$), 7.91 (0.2 Н, с) и 8.00 (0.8 Н, с, CHBr). М 437.96. М(найд.) 436.36. Найдено, %: N 7.13; Br(общ.) 54.93. $\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{NO}_3\text{Br}_3$. Вычислено, %: N 3.13; Br(общ.) 54.79.

(Z,E)-4-(Цианметил)-4-(2,3-дибромаллил)морфолин-4-ониум бромид (14) получен бромированием соли **6**. Т.пл. 105-106°C (разл.). R_f1 0.40, R_f 2 0.70. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 2240 (CN), 1580.1600 ($=\text{CBr}$), Спектр ЯМР ^1H , δ , м.д.: 3.65-4.00 (4Н, м) и 4.02-4.10, (4Н, м, $\text{O}(\text{CH}_2\text{CH}_2)_2\text{N}$), 4.19 (1Н, с) и 4.41 (1н, с, CH_2CN), 5.00 (1Н, с) и 5.40 (1Н, с, CH_2CBr), 7.00 (0.5 Н, с) и 8.15 (0.5 Н, с, CHBr). М 404.94. М(найд.) 401.26. Найдено, %: N 6.48; Br- 17.80. $\text{C}_9\text{H}_{13}\text{N}_2\text{OBr}_3$. Вычислено, %: N 6.91; Br- 17.51.

(Z,E)-1-(2,3-Дибромаллил)-1-(2-метокси-2-этоксиэтил)пиперидин-1-ониум бромид (15) получен бромированием соли **7**. Согласно ЯМР ^1H непрерывно кристаллизованного продукта, смесь цис- и транс-изомеров. М 435.99. М(найд.) 438. Найдено, %: N 3.11; Br- 18.51. $\text{C}_{11}\text{H}_{18}\text{NO}_2\text{Br}_3$. Вычислено, %:

N 3.21; Br- 18.51. После перекристаллизации из спирта удалось разделить изомеры. Ниже приводятся данные разделенных изомеров.

(Z)-1-(2,3-Дибромаллил)-1-(2-метокси-2-этоксигетил)пиперидин-1-оний бромид (15a). Т.пл. 174-175°C. R_f 0.33, ИК-спектр, ν , см^{-1} : 1720 ($\text{C}=\text{O}$), 1590, 1600 ($=\text{CBr}$), Спектр ЯМР ^1H , δ , м.д.: 1.46-1.66 (2H, м) и 1.82-1.96 (4H, м, $(\text{CH}_2)_3$, пипер.), 3.53-3.66 (2H, м) и 3.76- 3.86 (2H, м, $\text{N}+(\text{CH}_2)_2$, пипер.), 3.78 (3H, с, OCH_3), 4.59 (2H, с, $\text{CH}_2\text{COOCH}_3$), 4.82 (2H, с, $\text{CH}_2\text{CBr}=\text{)$, 7.97 (1H, с, $=\text{CH}$). ^{13}C : 19.0 ($2.\text{CH}_2$), 20.4 (CH_2), 52.9 (OCH_3), 55.2 (NCH_2), 60.3 ($\text{N}(\text{CH}_2)_2$), 66.0 (NCH_2), 117.3(CBr), 125.1 (CHBr), 165.4(CO). Наличие интенсивного ЯЭО между протонами экзоциклической метиленовой группы и двойной связи свидетельствует о цис-конфигурации атомов брома.

(E)-1-(2,3-Дибромаллил)-1-(2-метокси-2-этоксигетил)пиперидин-1-оний бромид (15b). Т.пл. 111-112°C. R_f 0.36, ИК-спектр, ν , см^{-1} : 1720 ($\text{C}=\text{O}$), 1590, 1600 ($=\text{CBr}$), Спектр ЯМР ^1H , δ , м.д.: 1.61-1.79 (2H, м), 1.83-1.95 (2H, м) и 2.00-2.16 (2H, м, $(\text{CH}_2)_3$), 3.77-3.88 (2H, м) и 4.707-4.15 (2H, м, $\text{N}^+(\text{CH}_2)_2$, пипер.), 3.83 (3H, с, OCH_3), 4.85 (2H, с, $\text{CH}_2\text{COOCH}_3$), 4.87 (2H, с, $\text{CH}_2\text{CBr}=\text{)$, 7.68 (1H, с, $=\text{CH}$). Отсутствие ЯЭО между протонами экзоциклической метиленовой группы и двойной связи свидетельствует о транс-конфигурации атомов брома.

(E)-2,3-Дибром-N-(цианметил)-N,N-диметилпроп-2-ен-1-аммоний бромид (16) получен бромированием соли **8**. Т.пл. 130°C. R_f 0.54. 62.00. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 2240 $1]]] (\text{CN})$, 1580.1600 ($=\text{CBr}$), Спектр ЯМР ^1H , δ , м.д.: 1.45 (6H, т, $\text{N}^+\text{CH}_2\text{CH}_3$, $J=7,0$), 3.85 (6H, к, CH_2CH_3), 4.79 (2H, с, CH_2CN), 5.39 (2H, с, $\text{CH}_2\text{CBr}=\text{)$, 7.80 (1H, с, CHBr). ^{13}C : 8.28 (CH_3), 56.73 (CH_2CH_3), 62.39 (CH_2CBr), 109.39 (CN), 111.39 ($=\text{CBr}$), 120.20 ($=\text{CH}$). М 390.96. М(найд.) 392.16. Найдено, %: N 3.48; Br(общ.) 62.00. $\text{C}_9\text{H}_{15}\text{NBr}_3$. Вычислено, %: N 3.58; Br(общ.) 61.38.

ՊՐՈՊ-2-ԻՆ-1-ԻՆ ԽՈՒՄԲ ՊԱՐՈՒՆԱԿՈՂ ԱՄՈՆԻՈՒՄԱՅԻՆ ԱՂԵՐԻ ԲՐՈՄԱՅՈՒՄԸ

Ա. Խ. ԳՅՈՒՆԱԶԱՐՅԱՆ, Տ. Ա. ՍԱՎԿՅԱՆ, Ա. Բ. ԵՐԵՄՅԱՆ, Գ. Մ. ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ,
Ռ. Ա. ԹԱՄԱԶՅԱՆ, Ա. Գ. ԱՅՎԱԶՅԱՆ և Ն. Ա. ՓԱՆՈՍՅԱՆ

Ուսումնասիրվել է պրոպին-2-ին-1-ինիլ խումբ պարունակող մի շարք ամոնիումային աղերի բրոմացումը: Հաստատվել է, որ արդյունքում, համաձայն ՄՄՊ սպեկտրոսկոպիայի տվյալների, առաջանում են բրոմացման երկու արգասիքներ՝ ցիս- և տրանս-տարածական իզոմերներ: Պրոպարգիային և կարբոնիթօքսիմիթիլ խմբեր պարունակող պրոպիլիդինիումային աղի բրոմացման արգասիքի վերաբյուրեղացումից անջատված ցիս- և տրանս-ինդիվիդուալ իզոմերներից առաջինի ունեցնականությունից անալիզի արդյունքների հիման վրա հաջողվել է նույնականացնել ցիս-իզոմերների ազդանշանի տիրույթը և եզրակացնել, որ հակառակ տեսական պատկերացումների, մեծամասամբ, ստացվում են ցիս-միացման արգասիքներ:

BROMINATION OF AMMONIUM SALTS CONTAINING PROP-2-YN-1-YL GROUP

A. Kh. GYULNAZARYAN, T. A. SAHAKYAN, A. B. YEREMYAN, G. M. MURADYAN,
R. A. TAMAZYAN, A. G. AYVAZYAN and H. A. PANOSYAN

The Scientific Technological Centre of Organic and
Pharmaceutical Chemistry NAS RA
26, Azatutyan Str., Yerevan, 0014, Armenia
E-mail: ara.gyulnazaryan@gmail.com

Bromination of a number of ammonium salts containing propyn-2-yn-1-yl group has been studied. NMR spectroscopy revealed that two bromination products are formed as spatial cis and trans isomers. Based on the X-ray structural analysis of the individual cis and trans-products of bromination of the piperidinium salt containing carbmethoxymethyl and propargyl groups isolated by recrystallization process, location of the signals in the ^1H NMR spectra related to cis-products was determined and a conclusion was made that, contrary to theoretical assumptions, cis-addition products are mainly formed.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Гюльназарян А.Х. / Автореф. дисс. "Некоторые закономерности галоидирования, дегидрогалоидирования и щелочного расщепления непредельных аммониевых солей" доктора хим. наук, Ереван, 1997 г.
- [2] Гюльназарян А.Х., Хачатрян Н.Г., Саакян Т.А., Киноян Ф.С., Паносян Г.А., Бабалян А.Т. // ЖОрХ, 1988, т. 24, вып. 3, с. 504.
- [3] Bode J. // Ann., 1892, B. 267, S. 268.
- [4] Pat. USA N 3678055 (1972), Passel F., Tomson A.J. РЖ Хим., 1973, 10Н177п.
- [5] Braun J.V., Kühn M. // Ber., 1925, B. 58 B, S. 2168. С.А. 1926, v. 20, p. 899.
- [6] Negoro T., Ikeda J. // Bull.Chem.Soc.Japan, 1986, v. 9, p. 2547.
- [7] Саакян Т.А., Гюльназарян А.Х., Кочарян С.Т., Маркарян Н.О., Паносян Г.А., Карапетян А.А. // ЖОХ, 2005, т. 75, вып. 5, с. 768.
- [8] Гюльназарян А.Х., Саакян Т.А., Тамазян Р.А., Айвазян А.Г., Паносян Г.А., Еремян А.Б.// ЖОХ, 2017, т. 87, вып. 10, с. 1622. Gyulnazaryan A.Kh., Sahakyan T.A., Tamazyan R.A., Ayvazyan A.G., Panosyan G.A., Yeremyan A.B. // Russian Journal of General Chemistry, 2017, v.87, №10, p. 2282, DOI: 10.1134/S1070363217100061
- [9] Гюльназарян А.Х., Саакян Т.А., Саргсян Г.Т., Григорян Дж.В., Айвазян А.Г., Тамазян Р.А. // ЖОХ, 2014, т. 84, вып. 10, с. 1660. Gyul'nazaryan A.Kh., Sahakyan T.A., Sargsyan G.T., Grigoryan J.V., Aivazyan A.G., Tamanyan R.A., Russian Journal of General Chemistry, 2014, v. 84, №10, p. 193, DOI: 10.1134/S1070363214100132
- [10] Гюльназарян А.Х., Саакян Т.А., Саргсян Г.Т., Григорян Дж.В., Мурадян Г.М., Петросян А.М., Паносян Г.А. // ЖОХ, 2016, т. 86, вып. 9, с. 1503, Gyul'nazaryan A.Kh., Sahakyan T.A., Sargsyan G.T., Grigoryan J.V., Muradyan G.M., Petrosyan A.M., Panosyan G.A. // Russian Journal of General Chemistry, 2016, v. 86, №9, p. 2067, DOI: 10.1134/S1070363216090140
- [11] North A.C.T., Phillips D.C., Mathews F.S. // A Acta Cryst., 1968, v. A24, p. 351.
- [12] Sheldrick G.M. // Acta Cryst., 2015, v. A71, p. 3.
- [13] Свердлова О.В. Электронные спектры в органической химии, Л., Химия, 1973, с. 18.