

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА  
НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

УДК 546.271

СИНТЕЗ И СТРОЕНИЕ ТРЕХЗАМЕЩЕННОГО КЛОЗО-ДЕКАБОРАНА  
[B<sub>10</sub>H<sub>7</sub>(1-IPh)(6(7),10-NHOCCN<sub>3</sub>)]<sup>-</sup>: ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ  
АНИОНА [2-B<sub>10</sub>H<sub>9</sub>NH=C(OH)CH<sub>3</sub>]<sup>-</sup> С PhI(OAc)<sub>2</sub>

© 2023 г. В. В. Воинова<sup>а</sup>, Н. А. Селиванов<sup>а</sup>, А. Ю. Быков<sup>а</sup>,  
А. С. Кубасов<sup>а</sup>, А. П. Жданов<sup>а</sup>\*, К. Ю. Жижин<sup>а</sup>, Н. Т. Кузнецов<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,  
Ленинский пр-т, 31, Москва, 119991 Россия

\*e-mail: zhdanov@igic.ras.ru

Поступила в редакцию 06.12.2022 г.

После доработки 23.12.2022 г.

Принята к публикации 27.12.2022 г.

Исследован процесс получения трехзамещенных клозо-декаборанов по реакции 1,2-бороксазолов с PhI(OAc)<sub>2</sub>. Показано, что данный процесс также может быть осуществлен *one pot* исходя из борированного иминола. Продукты реакций охарактеризованы методами <sup>1</sup>H, <sup>11</sup>B, <sup>13</sup>C ЯМР-спектроскопии. Строение соединения [B<sub>10</sub>H<sub>7</sub>(1-IPh)(6,10-NHOCCN<sub>3</sub>)]<sup>-</sup> установлено методом РСА.

**Ключевые слова:** клозо-декаборатный анион, бороксазолы, иодониевые производные

**DOI:** 10.31857/S0044457X22602309, **EDN:** UEWXML

## ВВЕДЕНИЕ

Разнообразные производные кластерных анионов бора вследствие проявления ими ряда важных свойств (низкая токсичность [1], высокая термодинамическая стабильность [2], пространственно-ароматический характер) привлекают большое внимание исследователей, так как они используются для создания веществ, обладающих каталитической активностью [3, 4], люминесцентными [5–7] и магнитными свойствами [8], применяются в медицине [9–11]. Особый интерес представляют замещенные производные клозо-декаборатного аниона, имеющие в своем составе два различных заместителя [12, 13]. Варьирование природы этих заместителей позволяет получать соединения, объединяющие в себе различные функции: транспортную, диагностическую, терапевтическую. Такой подход позволяет рассматривать кластерные анионы бора в качестве молекулярной платформы для создания новых тераностических препаратов [14–17]. И уж тем более интересными оказываются производные с тремя различными заместителями [18–20].

В связи с этим одним из важнейших направлений в химии бора является исследование методов функционализации кластерных анионов бора. Для получения производных аниона [B<sub>10</sub>H<sub>10</sub>]<sup>2-</sup> известно большое число способов синтетических подходов. Наибольшее внимание уделяется таким методам, как прямая функционализация [21], *inco-*

замещение [22–24] и модификация нитрильных и оксониевых заместителей [25–30]. За счет присутствия в составе заместителя активированной связи C≡N особый интерес представляют нитрильные производные клозо-декаборатного аниона, на основе которых реакцией нуклеофильного присоединения в мягких условиях могут быть получены соединения с заданными свойствами [31, 32].

Ранее [24] нами был изучен такой многообещающий класс соединений, как аннелированные 1,2-бороксазолы. В настоящей работе продолжено исследование процесса и условий их образования, а также изучены возможности их дальнейшей функционализации.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

**Элементный анализ.** Содержание углерода, водорода и азота определяли на элементном CHNS-анализаторе Eurovector EuroEA 3000 (Италия). На атомно-эмиссионном спектрометре с индуктивно связанной плазмой Thermo Scientific iCAP XR (Thermo Scientific, США) выполняли анализ содержания бора в образцах.

**Спектры ЯМР <sup>1</sup>H, <sup>11</sup>B, <sup>13</sup>C** растворов исследуемых веществ в CD<sub>3</sub>CN записывали на импульсном Фурье-спектрометре Bruker Avance-300 (ФРГ) на частотах 300.3, 96.32 и 75.49 МГц соответственно с внутренней стабилизацией по дейтерию. В

качестве внешних стандартов использовали тетраметилсилан или эфират трехфтористого бора.

**ESI-масс-спектры** растворов исследуемых веществ в  $\text{CH}_3\text{CN}$  записывали на спектрометре LCMS-IT-TOF (Shimadzu, Япония). Спектры HRMS были получены в режиме прямого введения. Масс-спектры регистрировали в диапазоне  $m/z$  от 120 до 700 Да. Напряжение детектора 1.55 кВ, распыляющий газ 1.50 л/мин, температура CDL 200°C, напряжение ЭСИ 4.50 кВ. Настройку прибора (калибровку массы и проверку чувствительности) проводили перед анализом.

**Рентгеноструктурный анализ.** Набор дифракционных отражений для кристалла получен в Центре коллективного пользования ИОНХ РАН на автоматическом дифрактометре Bruker Smart Apex2 ( $\lambda\text{MoK}_\alpha$ , графитовый монохроматор,  $\omega$ - $\phi$ -сканирование). Данные были проиндексированы и интегрированы с помощью программы SAINT [33]. Применяли поправку на поглощение, основанную на измерениях эквивалентных отражений (SADABS) [34]. Структуры расшифрованы прямым методом с последующим расчетом разностных синтезов Фурье. Все неводородные атомы уточнены в анизотропном приближении, все атомы водорода – по модели “наездника” с тепловыми параметрами  $U_{\text{изо}} = 1.2U_{\text{экв}} (U_{\text{изо}})$  соответствующего неводородного атома ( $1.5U_{\text{изо}}$  для  $\text{CH}_3$ -групп).

Все расчеты проводили с использованием программы SHELXTL [35]. Структура расшифрована и уточнена с помощью программного комплекса OLEX2 [36].

Кристаллографические данные депонированы в Кембриджском банке структурных данных (CCDC № 2231706).

**Синтез.** Борилированные иминолы  $(\text{Bu}_4\text{N})[2\text{-V}_{10}\text{H}_9\text{NHC}(\text{OH})\text{CH}_3]$  (**1**),  $(\text{Bu}_4\text{N})[2\text{-V}_{10}\text{H}_9\text{NHC}(\text{OH})\text{C}_3\text{H}_7]$  (**2**) и 1,2-бороксазолы  $(\text{Bu}_4\text{N})[1,2\text{-V}_{10}\text{H}_8(\text{NHOCCH}_3)]$  (**3**),  $(\text{Bu}_4\text{N})[1,2\text{-V}_{10}\text{H}_8(\text{NHOC}^i\text{C}_3\text{H}_7)]$  (**4**) получали по методике [24].

**$[\text{V}_{10}\text{H}_7(1\text{-IPh})(6(7),10\text{-NHOCCH}_3)]$  (**5**).** Навеску 0.2 г (0.48 ммоль)  $(\text{Bu}_4\text{N})[2\text{-V}_{10}\text{H}_9(\text{NHC}(\text{OH})\text{CH}_3)]$  и 0.46 г (1.43 ммоль)  $\text{PhI}(\text{OAc})_2$  растворяли в 10 мл метанола. Реакционную массу перемешивали при комнатной температуре в течение 5 ч. Далее полученный реакционный раствор концентрировали на ротаторном испарителе, разбавляли дихлорметаном, дважды промывали раствор дистиллированной водой и сушили органическую фазу над безводным  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ . Раствор целевого вещества упаривали на ротаторном испарителе. Полученный сухой остаток перекристаллизовывали из смеси этанола и 2-пропанола. Получено 0.150 г  $[\text{V}_{10}\text{H}_7(1\text{-IPh})(6(7),10\text{-NHOCCH}_3)]$  (83%).

$^{11}\text{B}$  ЯМР-спектр ( $\text{CD}_3\text{CN}$ ),  $\delta$ , м. д.: 30.2 (с, 1В, В(10)),  $-4.8$  (с, 1В, В(1))  $-10.1$  (с, 1В, В(6)),  $-22.5$

(д, 2В, В(3, 4),  $J^{\text{B-H}} = 138$  Гц),  $-28.9$  (д, 4В, В(2, 5, 7, 9),  $J^{\text{B-H}} = 138$  Гц),  $-35.0$  (д, 1В, В(8),  $J^{\text{B-H}} = 139$  Гц);  $^1\text{H}$  ЯМР-спектр ( $\text{CD}_3\text{CN}$ ),  $\delta$ , м. д.: 8.04, 7.58, 7.40 (аром, 5H,  $\text{NCC}_6\text{H}_5$ ), 6.68 (1H,  $\text{NH}$ ), 2.45 (с, 3H,  $\text{NCCCH}_3$ );  $^{13}\text{C}$  ЯМР-спектр ( $\text{CD}_3\text{CN}$ ),  $\delta$ , м. д.: 186.7 ( $-\text{N}=\text{C}-\text{O}$ ), 135.3, 131.4, 130.9, 104.3 (Ph), 18.6 ( $\text{NH}-\text{C}-\text{CH}_3$ ); MS (ESI)  $m/z = 376.1204$  (соответствует пику  $\{[\text{V}_{10}\text{H}_7(\text{IPh})(\text{NHOCCH}_3)]-\text{H}\}$ , вычислено для  $\{[\text{A}]-\text{H}\}$  376,1201).

	C	H	B	N
Найдено, %:	29.03;	4.23;	29.1;	3.68.
Вычислено, %:	29.04;	4.25;	29.0;	3.69.

**$[\text{V}_{10}\text{H}_7(1\text{-IPh})(6(7),10\text{-NHOC}^i\text{C}_3\text{H}_7)]$  (**6**)** получали по аналогичной методике. Навеску 0.2 г (0.47 ммоль)  $(\text{Bu}_4\text{N})[2\text{-V}_{10}\text{H}_9(\text{NHC}(\text{OH})\text{C}_3\text{H}_7)]$  и 0.43 г (1.34 ммоль)  $\text{PhI}(\text{OAc})_2$  растворяли в 10 мл метанола. Получено 0.147 г  $[\text{V}_{10}\text{H}_7(1\text{-IPh})(6(7),10\text{-NHOC}^i\text{C}_3\text{H}_7)]$  (81%).

$^{11}\text{B}$  ЯМР-спектр ( $\text{CD}_3\text{CN}$ ),  $\delta$ , м. д.: 30.2 (с, 1В, В(10)),  $-4.9$  (с, 1В, В(1)),  $-10.0$  (с, 1В, В(6)),  $-22.5$  (д, 2В, В(3, 4),  $J^{\text{B-H}} = 138$  Гц),  $-28.8$  (д, 4В, В(2, 5, 7, 9),  $J^{\text{B-H}} = 138$  Гц),  $-34.8$  (д, 1В, В(8),  $J^{\text{B-H}} = 139$  Гц);  $^1\text{H}$  ЯМР-спектр ( $\text{CD}_3\text{CN}$ ),  $\delta$ , м. д.: 8.04, 7.58, 7.40 (аром, 5H,  $\text{NCC}_6\text{H}_5$ ), 6.68 (1H,  $\text{NH}$ ), 2.64 (септ, 1H,  $-\text{CH}-(\text{CH}_3)_2$ ,  $J = 7$  Гц), 1.11 (д, 6H,  $\text{NC}(\text{CH}_3)_2$ ,  $J = 7$  Гц);  $^{13}\text{C}$  ЯМР-спектр ( $\text{CD}_3\text{CN}$ ),  $\delta$ , м. д.: 180.1 ( $-\text{N}=\text{C}-\text{O}$ ), 135.3, 131.4, 130.9, 104.3 (Ph), 34.0 ( $\text{NH}-\text{C}-\text{CH}-(\text{CH}_3)_2$ ), 18.4 ( $\text{NH}-\text{C}-\text{CH}-(\text{CH}_3)_2$ ); HRMS (ESI)  $m/z = 405.1601$  (соответствует иону  $[\text{V}_{10}\text{H}_7(\text{IPh})(\text{NHOC}^i\text{C}_3\text{H}_7)]^-$ , вычислено для  $\{[\text{A}]-\}$  405.1603).

	C	H	B	N
Найдено, %:	29.49;	4.99;	27.1;	3.42.
Вычислено, %:	29.47;	4.95;	27.0;	3.44.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Целевые трехзамещенные *клозо*-декабораны получали по реакции 1,2-дибороксазолов с полтора-кратным избытком  $\text{PhI}(\text{OAc})_2$  в среде метанола. Данная реакция также может быть проведена непосредственно из соответствующего борилированного иминола *one pot*, минуя стадию выделения 1,2-бороксазола. Реакция требует 3-кратного избытка фенилиодоацетата и увеличения времени процесса. Для подтверждения возможности протекания данной реакции и с другими бороксазолами (иминолами) процесс проводили также с участием аниона  $[2\text{-V}_{10}\text{H}_9\text{NHC}(\text{OH})\text{C}_3\text{H}_7]^-$ .

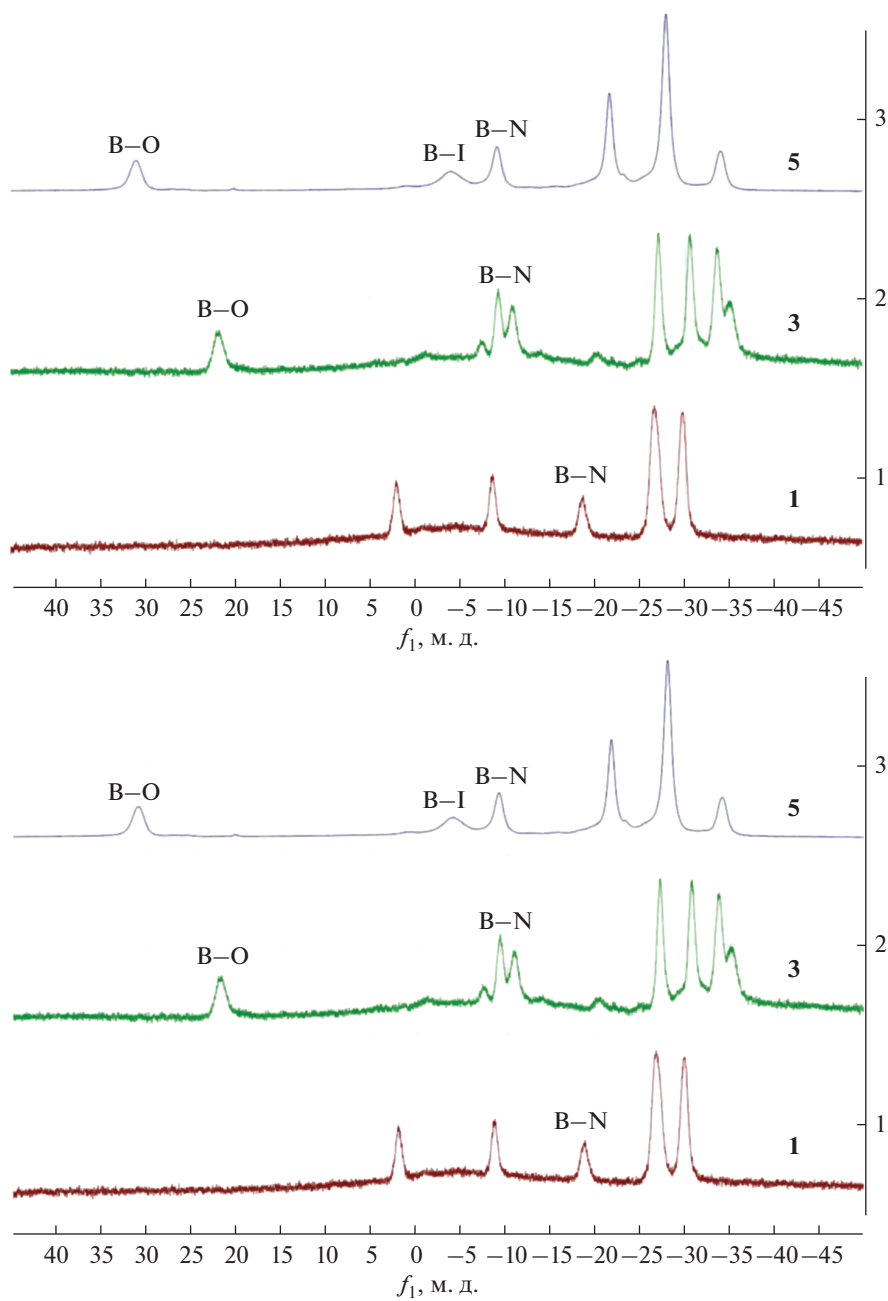


Рис. 1.  $^{11}\text{B}\{^1\text{H}\}$  ЯМР-спектры иминола (1), 1,2-бороксазола (3) и *клозо*-декаборана (5).

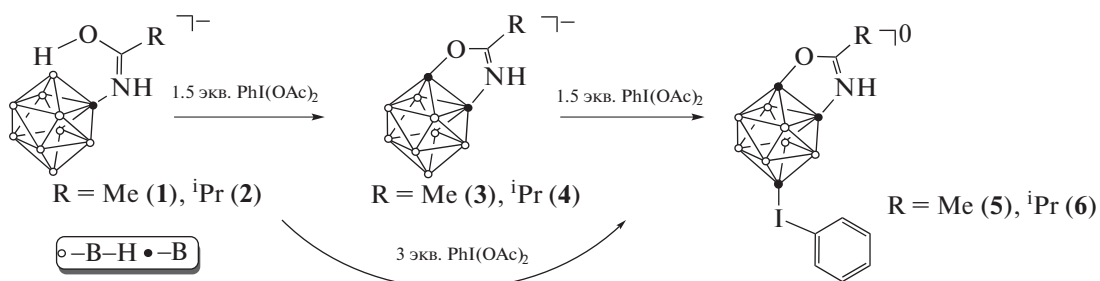


Схема 1.

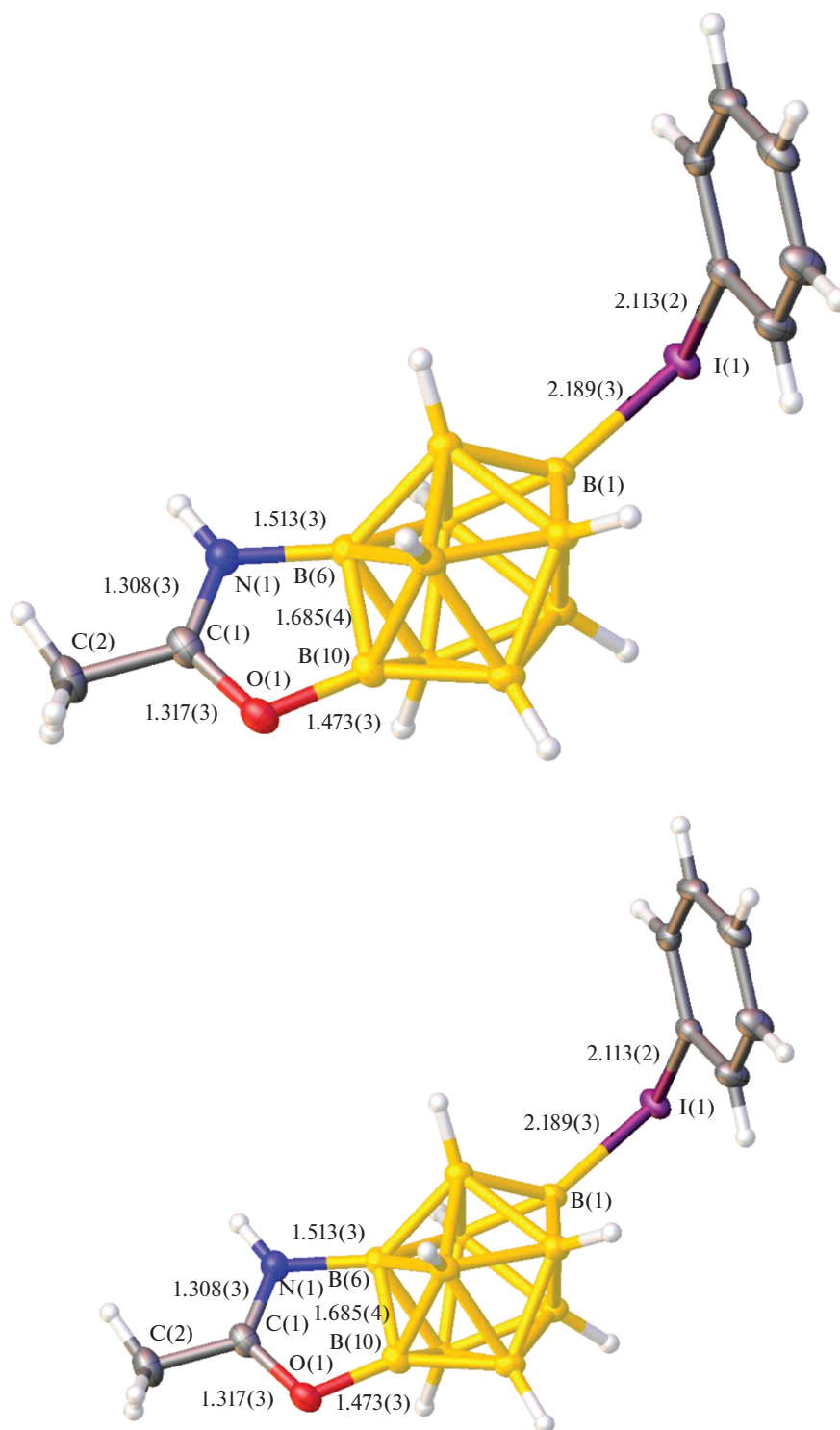


Рис. 2. Строение соединения  $[B_{10}H_7(1-IPh)(6,10-NHOCCH_3)]$  по данным РСА.

Контроль за ходом реакции осуществляли с помощью  $^{11}B$  ЯМР-спектроскопии (рис. 1). Так, в спектре  $^{11}B$  ЯМР целевого *клозо*-декаборана (**1**) наблюдаются три сигнала от замещенных позиций: при 30.2 м. д. от апикального атома кластера,

связанного с кислородом бороксазольного фрагмента, сильно уширенный синглет при  $-4.8$  м. д. от апикального атома бора с иодониевым заместителем и при  $-10.1$  м. д. от замещенного экваториального атома бора. Незамещенные атомы бо-

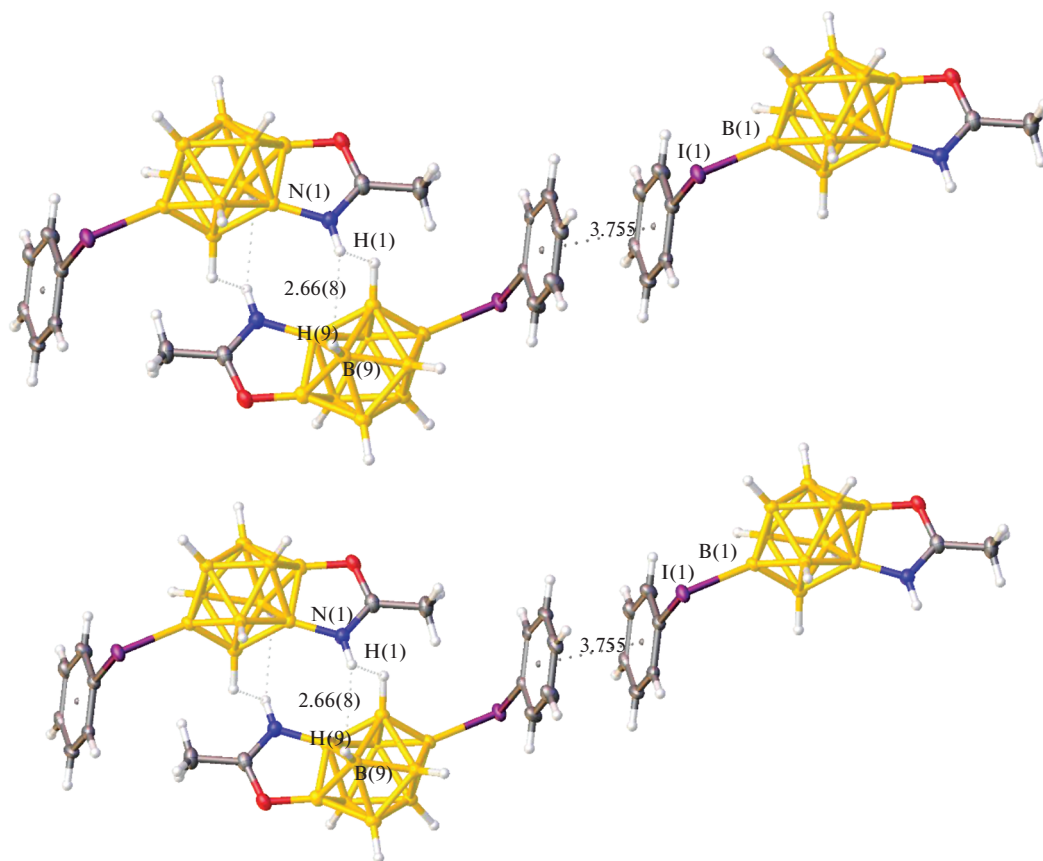


Рис. 3. Слабые взаимодействия в структуре соединения  $[B_{10}H_7(1-Ph)(6,10-NHOCCH_3)]$  по данным РСА.

ра кластерного остова проявляются в виде группы сигналов с соотношением интегральных интенсивностей 2 : 3 : 1.

Строение заместителей в полученных *клозо*-боранах устанавливали с помощью мультаядерной спектроскопии ЯМР. Так, в  $^1H$  ЯМР-спектре соединения **5** наблюдаются две группы сигналов от атомов водорода заместителей. Бороксазольный фрагмент представлен синглетом метильной группы ( $I = 3$ ) при 2.45 м. д. и уширенным синглетом иминного протона ( $I = 1$ ) при 6.68 м. д. Фенильное кольцо дает три мультиплета в области ароматических протонов при 8.04 ( $I = 2$ ), 7.58 ( $I = 1$ ) и 7.40 м. д. ( $I = 2$ ).

Молекулярная структура соединения  $[B_{10}H_7(1-Ph)(6,10-NHOCCH_3)]$  установлена методом рентгеноструктурного анализа монокристалла (рис. 2). Данные РСА подтверждают расположение и строение заместителей. Фенилиодониевый заместитель находится в апикальном положении, а бороксазольное кольцо образовано с участием апикальной грани  $B(6)B(10)$ . Длины связей  $B(1)I(1)$ ,  $B(6)N(1)$  и  $B(10)O(1)$  составляют 2.113(2), 1.513(3) и 1.473(3) Å соответственно, что указывает на их ординарный характер и отсутствие дополнитель-

ного сопряжения с ароматической электронной плотностью кластерного остова.

В бороксазольном фрагменте длины связей  $N(1)C(1)$  и  $C(1)O(1)$  составляют 1.308(3) и 1.317(3) Å, что указывает на промежуточный характер кратности связей [37] и наличие сопряжения в фрагменте  $N(1)C(1)O(1)$ , а также делокализации на нем положительного заряда.

Необходимо отметить, что в структуре наблюдаются два типа слабых взаимодействий (рис. 3). Диводородные связи между протонами бороксазольных колец и атомами водорода в экваториальном поясе соседнего кластера длиной  $\sim 2.66$  Å обуславливают образование centrosymmetricheskikh димеров. В структуре также наблюдаются стейкинг-взаимодействия между фенильными кольцами иодониевых заместителей соседних кластеров. Заместители расположены антипараллельно, межплоскостное расстояние составляет 3.755 Å со сдвигом центров на 1.614 Å.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе впервые получен трехзамещенный нейтральный *клозо*-декаборан, содержащий фе-

нилиодониевый заместитель в апикальном положении и бороксазольный цикл, аннелированный к апикальной грани В(6)В(10). Структура полученного производного установлена методом РСА. Данный класс соединений представляет удобную платформу для дальнейшей модификации клозодекаборатного аниона.

#### БЛАГОДАРНОСТЬ

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП ФМИ ИОНХ РАН, функционирующего при поддержке государственного задания ИОНХ РАН в области фундаментальных научных исследований.

#### ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (21-13-00450).

#### КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Couto M., Alamón C., García M. et al. // *Cells*. 2020. V. 9. № 6. P. 1408. <https://doi.org/10.3390/cells9061408>
2. Golub I.E., Filippov O.A., Kulikova V.A. et al. // *Molecules*. 2020. V. 25. № 12. P. 2920. <https://doi.org/10.3390/molecules25122920>
3. Knapp C. Weakly Coordinating Anions: Halogenated Borates and Dodecaborates // *Comprehensive Inorganic Chemistry II*. Elsevier, 2013. P. 651. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-097774-4.00125-X>
4. Fisher S.P., Tomich A.W., Lovera S.O. et al. // *Chem. Rev.* 2019. V. 119. № 14. P. 8262. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00551>
5. Shen Y., Kong X., Yang F. et al. // *Inorg. Chem.* 2022. V. 61. № 42. P. 16707. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.2c02467>
6. Wang Z., Chen B., Zhang H. et al. // *Mater. Chem. Front.* 2022. V. 6. № 6. P. 783. <https://doi.org/10.1039/D1QM01567B>
7. Tanaka K., Gon M., Ito S. et al. // *Coord. Chem. Rev.* 2022. V. 472. P. 214779. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2022.214779>
8. Mori T. // *J. Solid State Chem.* 2019. V. 275. P. 70. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2019.03.046>
9. Ali F., S Hosmane N., Zhu Y. // *Molecules*. 2020. V. 25. № 4. P. 828. <https://doi.org/10.3390/molecules25040828>
10. Dymova M.A., Taskaev S.Y., Richter V.A. et al. // *Cancer Commun.* 2020. V. 40. № 9. P. 406. <https://doi.org/10.1002/cac2.12089>
11. Shakerzadeh E., Tahmasebi E., van Duong L. et al. // *Boron Clusters in Biomedical Applications: A Theoretical Viewpoint // Characteristics and Applications of Boron*. IntechOpen, 2022. <https://doi.org/10.5772/intechopen.106215>
12. Авдеева В.В., Полякова И.В., Гоева Л.В. и др. // *Журн. неорган. химии*. 2014. Т. 59. С. 1491.
13. Kapuściński S., Hietsoi O., Pietrzak A. et al. // *Chem. Commun.* 2022. V. 58. № 6. P. 851. <https://doi.org/10.1039/D1CC06485A>
14. Isono A., Tsuji M., Sanada Y. et al. // *ChemMedChem*. 2019. V. 14. № 8. P. 823. <https://doi.org/10.1002/cmdc.201800793>
15. Shi Y., Li J., Zhang Z. et al. // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2018. V. 10. № 50. P. 43387. <https://doi.org/10.1021/acsami.8b14682>
16. Shi Y., Fu Q., Li J. et al. // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2020. V. 12. № 50. P. 55564. <https://doi.org/10.1021/acsami.0c15251>
17. Rykowski S., Gurda-Woźna D., Orlicka-Płocka M. et al. // *Int. J. Mol. Sci.* 2021. V. 22. № 5. P. 1. <https://doi.org/10.3390/ijms22052772>
18. Hamilton E.J.M., Leung H.T., Kultyshev R.G. et al. // *Inorg. Chem.* 2012. V. 51. № 4. P. 2374. <https://doi.org/10.1021/ic2023709>
19. Laila Z., Abi-Ghaida F., al Anwar S. et al. // *Main Group Chem.* 2015. V. 14. № 4. P. 301. <https://doi.org/10.3233/MGC-150173>
20. Varkhedkar R., Yang F., Dontha R. et al. // *ACS Cent. Sci.* 2022. V. 8. № 3. P. 322. <https://doi.org/10.1021/acscentsci.1c01132>
21. Неумолотов Н.К., Селиванов Н.А., Быков А.Ю. и др. // *Журн. неорган. химии*. 2022. Т. 67. С. 1417.
22. Rzeszutarska E., Novozhilova I., Kaszyński P. // *Inorg. Chem.* 2017. V. 56. № 22. P. 14351. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.7b02477>
23. Kapuscinski S., Abdulmojeed M.B., Schafer T.E. et al. // *Inorg. Chem. Front.* 2021. V. 8. № 4. P. 1066. <https://doi.org/10.1039/d0qi01353f>
24. Voinova V.V., Selivanov N.A., Plyushchenko I.V. et al. // *Molecules*. 2021. V. 26. № 1. P. 248. <https://doi.org/10.3390/molecules26010248>
25. Nelyubin A.V., Klyukin I.N., Novikov A.S. et al. // *Mendeleev Commun.* 2021. V. 31. № 2. P. 201. <https://doi.org/10.1016/j.mencom.2021.03.018>
26. Нелюбин А.В., Селиванов Н.А., Быков А.Ю. и др. // *Журн. неорган. химии*. 2022. Т. 67. С. 1588.
27. Prikaznov A.V., Shmal'ko A.V., Sivaev I.B. et al. // *Polyhedron*. 2011. V. 30. № 9. P. 1494. <https://doi.org/10.1016/j.poly.2011.02.055>
28. Semioshkin A.A., Sivaev I.B., Bregadze V.I. // *Dalton Trans.* 2008. V. 11. № 8. P. 977. <https://doi.org/10.1039/b715363e>
29. Yorov K.E., Zhdanov A.P., Kamilov R.Kh. et al. // *ACS Appl. Nano Mater.* 2022. V. 5. № 8. P. 11529. <https://doi.org/10.1021/acsanm.2c02550>
30. Stepanova M., Dobrodumov A., Averianov I. et al. // *Polymers (Basel)*. 2022. V. 14. № 18. P. 3864. <https://doi.org/10.3390/polym14183864>

31. *Нелюбин А.В., Соколов М.С., Селиванов Н.А. и др.* // Журн. неорган. химии. 2022. Т. 67. С. 1562.
32. *Nelyubin A.V., Selivanov N.A., Vykov A.Yu. et al.* // Int. J. Mol. Sci. 2021. V. 22. № 24. P. 13391.  
<https://doi.org/10.3390/ijms222413391>
33. *Bruker, SAINT*, Bruker AXS Inc., Madison, WI, 2018.
34. *Krause L., Herbst-Irmer R., Sheldrick G.M. et al.* // J. Appl. Crystallogr. 2015. V. 48. № 1. P. 3.  
<https://doi.org/10.1107/S1600576714022985>
35. *Sheldrick G.M.* // Acta Crystallogr., Sect. A. 2015. V. 71. № 1. P. 3.  
<https://doi.org/10.1107/S2053273314026370>
36. *Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J. et al.* // J. Appl. Crystallogr. 2009. V. 42. № 2. P. 339.  
<https://doi.org/10.1107/S0021889808042726>
37. *Allen F.H., Kennard O., Watson D.G. et al.* // J. Chem. Soc., Perkin Trans. II 1987. P. S1.  
<https://doi.org/10.1039/p298700000s1>