

УДК 547.173+541.623+539.14

Таутомерные бензо-15-краун-5-содержащие хемосенсоры для катионов металлов

**В. И. Минкин, Т. Н. Грибанова, А. Д. Дубонос, В. А. Брень,
Р. М. Миняев, Е. Н. Шепеленко, А. В. Цуканов**

ВЛАДИМИР ИСААКОВИЧ МИНКИН — доктор химических наук, академик, директор НИИ физической и органической химии Ростовского государственного университета (НИИФОХ РГУ). Лауреат Государственной премии СССР и премии им. Л.А. Чугаева РАН, автор более 700 научных работ. Область научных интересов: молекулярная динамика, квантовая химия органических соединений, фотохромизм, стереохимия координационных соединений металлов, химия теллуриорганических соединений.

ТАТЬЯНА НИКОЛАЕВНА ГРИБАНОВА — кандидат химических наук, научный сотрудник лаборатории квантовой химии НИИФОХ РГУ. Автор 40 научных работ. Область научных интересов: квантовая химия органических соединений, неклассические структуры, таутомерия, металлоорганические комплексы.

АЛЕКСАНДР ДМИТРИЕВИЧ ДУБОНОСОВ — кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории реакционной способности органических соединений НИИФОХ РГУ. Автор более 100 научных работ. Область научных интересов: фотохромизм, таутомерия, хемосенсоры.

ВЛАДИМИР АЛЕКСАНДРОВИЧ БРЕНЬ — доктор химических наук, профессор, заместитель директора по научной работе НИИФОХ РГУ, заведующий лабораторией реакционной способности органических соединений. Автор более 250 научных работ. Область научных интересов: таутомерия, фотохромизм, органические хемосенсоры.

РУСЛАН МИХАЙЛОВИЧ МИНЯЕВ — доктор химических наук, профессор, заведующий лабораторией квантовой химии НИИФОХ РГУ. Автор более 200 научных работ. Область научных интересов: квантовая химия органических соединений, неклассические структуры, стереохимия координационных соединений.

ЕВГЕНИЙ НИКОЛАЕВИЧ ШЕПЕЛЕНКО — младший научный сотрудник лаборатории реакционной способности органических соединений НИИФОХ РГУ. Автор 60 научных работ. Область научных интересов: органический синтез, таутомерия, фотохромизм.

АЛЕКСЕЙ ВАЛЕНТИНОВИЧ ЦУКАНОВ — аспирант НИИФОХ РГУ. Область научных интересов: хемосенсоры, фотохромизм, таутомерия.

344090 Ростов-на-Дону, пр. Стачки, 194/2, НИИФОХ РГУ, факс (8632)285-667, E-mail dubon@ipoc.rsu.ru

Краунсодержащие соединения имеют большое значение в химии, химической технологии и экологии [1–3]. Наличие краун-эфирной рецепторной группировки в молекуле хемосенсора может вызывать существенные изменения спектральных и люминесцентных свойств при комплексообразовании с металлами, что делает их пригодными для определения различных катионов в химических и биологических средах [4–12]. В основе комплексообразования краун-эфиров лежит принцип структурного соответствия [13, 14], согласно которому селективность краун-эфира и устойчивость образующихся комплексов зависит от соответствия размеров и форм иона-комплексообразователя размерам полости макроцикла. Так, для предварительной оценки эффективности связывания краун-эфиров с катионами щелочных металлов существу-

ет простая зависимость между ионным радиусом и числом атомов кислорода в макроцикле: для катиона Li^+ наиболее подходящим является краун-эфир с четырьмя атомами кислорода, для Na^+ — с пятью, для K^+ — с шестью. Вместе с тем принцип геометрического соответствия не имеет абсолютного значения [3], поэтому для эффективного отбора и синтеза новых хемосенсорных систем необходимо всестороннее исследование факторов, определяющих селективность краун-эфиров различных структурных типов.

Исследованные нами краунсодержащие имины **1** имеют по данным ИК- и ЯМР ^1H -спектроскопии (табл. 1) бензоидное строение. В растворах этих соединений устанавливается прототропное равновесие между бензоидной **1** и хиноидной **2** формами (схема 1, верхняя строка). Содержание хиноидного таутомера

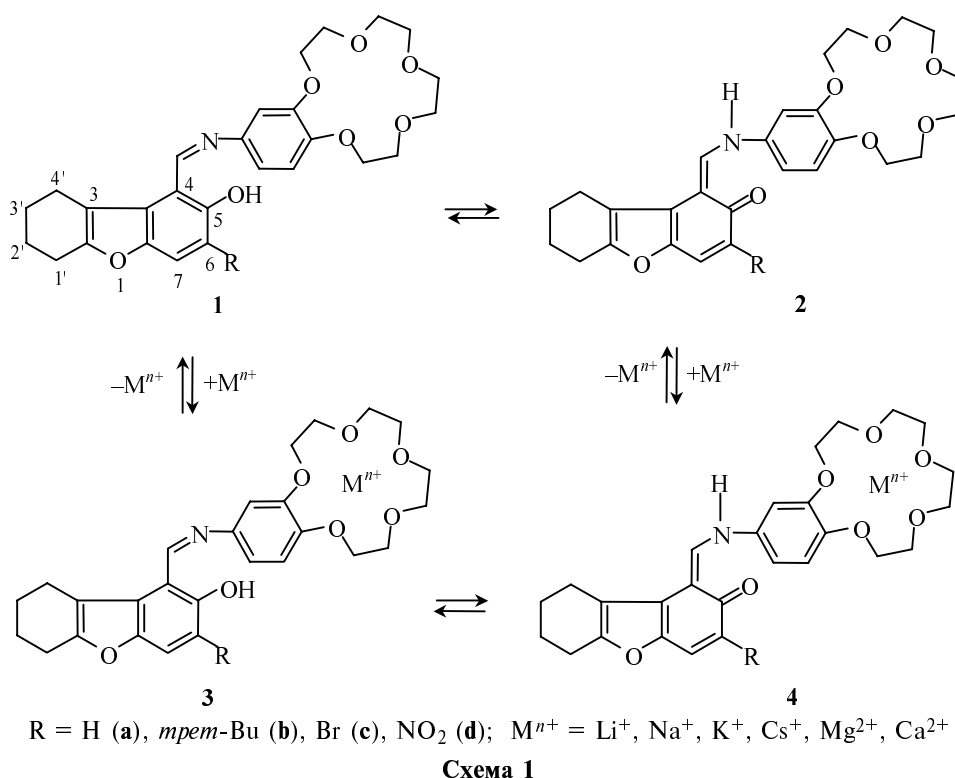


Таблица 1

Параметры ИК- и ЯМР ¹H-спектроскопии иминов 1a–d

Соединение	ИК-Спектр (вазелиновое масло) ν, см ⁻¹	Спектр ЯМР ¹ H (CDCl ₃) δ, м.д.						
		ОН	СН=	Н(7)	Ar	8 CH ₂ O	2 CH ₂ (1',4')	2 CH ₂ (2',3)
1a	1600, 1580	13,66 с	9,08 с	6,79–7,35 м		3,74–4,19 м	2,70–2,84 м	1,85–1,95 м
1b	1600, 1580	14,37 с	9,10 с	7,22 с	6,81–6,93 м	3,73–4,21 м	2,70–2,83 м	1,84–1,94 м
1c	1605, 1585	15,04 с	9,01 с	7,68 с	6,83–6,94 м	3,71–4,18 м	2,70–2,83 м	1,83–1,95 м
1d	1630, 1590	16,43 с	9,00 с	8,22 с	6,88–7,24 м	3,62–4,17 м	2,80–2,83 м	1,93–1,95 м

Таблица 2

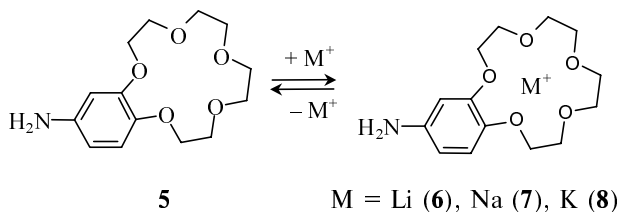
Электронные спектры поглощения иминов 1 и параметры равновесия 1 ⇌ 2

Соединение	Растворитель	λ _{макс} , нм (ε _{макс} · 10 ⁻³ , л · моль ⁻¹ · см ⁻¹)	Содержание хиноидной формы 2, %	K ^o = [2]/[1]	ΔG ^o ₂₉₃ , кДж/моль
1a	Толуол	369 (23,8)	0	—	—
	Ацетонитрил	363 (28,6), 476 (0,3)	3	0,03	8,5
	2-Пропанол	363 (21,2), 476 (0,4)	4	0,04	7,8
	ДМСО	368 (23,2), 476 (0,2)	2	0,02	9,5
1b	Толуол	370 (27,6)	0	—	—
	Ацетонитрил	367 (28,6), 480 (0,3)	3	0,03	8,5
	2-Пропанол	367 (24,8), 480 (0,3)	3	0,03	8,5
	ДМСО	370 (24,0), 480 (0,2)	2	0,02	9,5
1c	Толуол	375 (28,0), 476 (0,2)	2	0,2	9,5
	Ацетонитрил	370 (29,4), 476 (0,8)	7	0,075	6,3
	2-Пропанол	370 (12,9), 476 (0,6)	5	0,05	7,3
	ДМСО	358 (13,9), 455 (3,5)	31	0,45	1,9
1d	Толуол	377 (23,4), 490 (0,8)	3	0,03	8,5
	Ацетонитрил	377 (23,6), 490 (4,4)	15,5	0,18	4,2
	2-Пропанол	377 (20,6), 490 (4,4)	15,5	0,18	4,2
	ДМСО	379 (19,0), 490 (7,0)	25	0,33	2,7

увеличивается с ростом полярности растворителя и с увеличением электроотрицательности заместителя R: $H \approx \text{трет-Bu} < \text{Br} < \text{NO}_2$ (табл. 2).

Добавление к растворам иминов **1** в ацетонитриле иодидов лития, натрия, цезия и перхлоратов магния и кальция приводит к установлению нового равновесия $3 \rightleftharpoons 4$ (схема 1, нижняя строка), характеризующегося уменьшением содержания хиноидной формы в ряду катионов $\text{Cs}^+ < \text{K}^+ < \text{Na}^+ < \text{Li}^+ \approx \text{Ca}^{2+} < \text{Mg}^{2+}$, причем заметное влияние на равновесие оказывают в основном Li^+ , Mg^{2+} и Ca^{2+} . Изменения в спектрах поглощения аналогичных по строению фенилиминов, не имеющих краун-эфирного кольца, в этих условиях не наблюдались. Наибольшую сенсорную активность проявляет 6-нитропроизводное **1d**. Так, уменьшение молярного коэффициента экстинкции длинноволновой полосы поглощения хиноидной формы **1d** в области 490 нм составляет $\Delta\epsilon = 7\%$ (Li^+), 6% (Ca^{2+}), 15% (Mg^{2+}). В ДМСО заметное влияние на состояние бензоидно-хиноидного равновесия оказывает исключительно катион Li^+ , причем наблюдается увеличение содержания хиноидной формы. Возбуждение молекулы имиона **1d** в ацетонитриле светом с длиной волны полосы поглощения бензоидной формы ($\lambda_{\text{возб}} = 370$ нм) приводит к появлению интенсивной флуоресценции в области 560 нм с аномальным Stokes-сдвигом ($\Delta\nu = 8459 \text{ см}^{-1}$), обусловленной внутримолекулярным переносом протона в возбужденном состоянии. Добавление иодида лития к указанному раствору вызывает гипсохромное смещение флуоресценции до $\lambda_{\text{макс}} = 550$ нм ($\Delta\nu = 8134 \text{ см}^{-1}$). Эти специфические изменения Stokes-сдвига флуоресценции и положения равновесия (см. схему 1) для катионов Li^+ не зависят от присутствия в растворе катионов других щелочных металлов в сравнимых концентрациях.

Избирательное действие соединения **1d** в отношении катиона лития не находит объяснения в рамках принципа структурного соответствия. Для выявления факторов, определяющих селективность действия систем такого структурного типа, мы изучили взаимодействие модельной системы **5** с катионами Li^+ , Na^+ , K^+ .

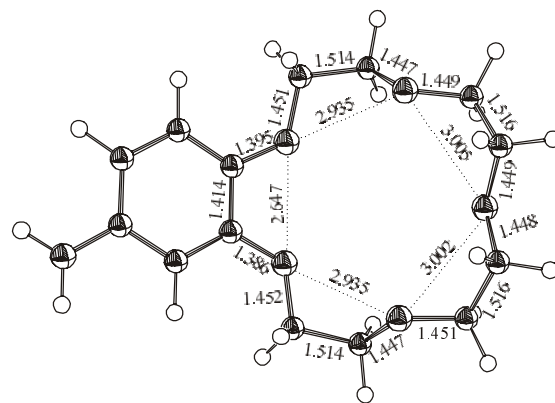


При помощи расчетов методом теории функционала плотности DFT (B3LYP/6-31G) [15] были исследованы энергетические и геометрические характеристики исходного краун-эфира **5** и его комплексов **6–8**, проведен сравнительный анализ относительной устойчивости их структурных изомеров и изучены факторы, определяющие эффективность комплексообразования в таких системах. Расчеты проводили методом DFT с трехпараметрическим обменно-корреляционным потенциалом (B3LYP) в базисе 6-31G с использованием пакета программ Gaussian-98 [16]. Стационарные точки на поверхности потенциальной энергии (ППЭ) идентифицировали путем расчета матрицы вторых производных (силовых констант), проводившегося аналитически. Графические изображения молекуляр-

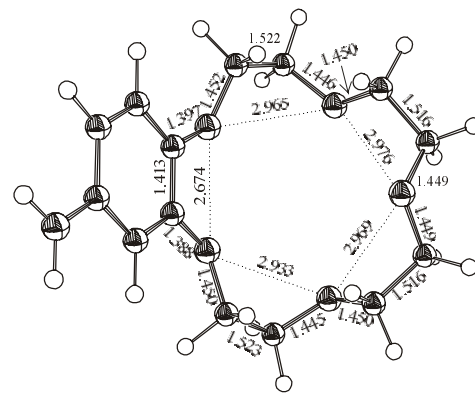
ных структур получены при помощи программы PD (режим PLUTO) в рамках пакета программ PC MODEL [17], в которой в качестве входных параметров использовали конечные декартовы координаты атомов, полученные в результате оптимизации геометрии.

4'-Аминобензо-15-краун-5

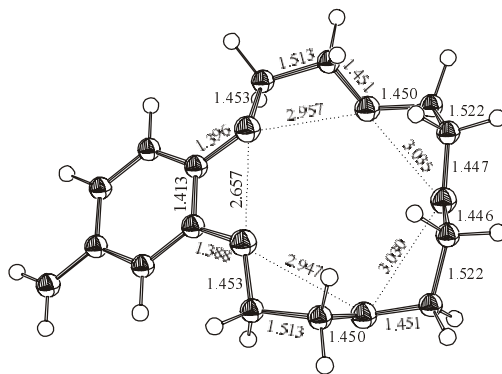
Как показали расчеты, 4'-аминобензо-15-краун-5 **5** может существовать в виде ряда конформеров, соответствующих энергетическим минимумам ($\lambda = 0$, здесь и далее λ обозначает число отрицательных собственных значений матрицы Гессе в данной стационарной точке) на ППЭ. Энергетические характеристики обнаруженных конформеров краун-эфира **5** приведены в табл. 3, их геометрические параметры отражают структуры.



5a



5b



5c

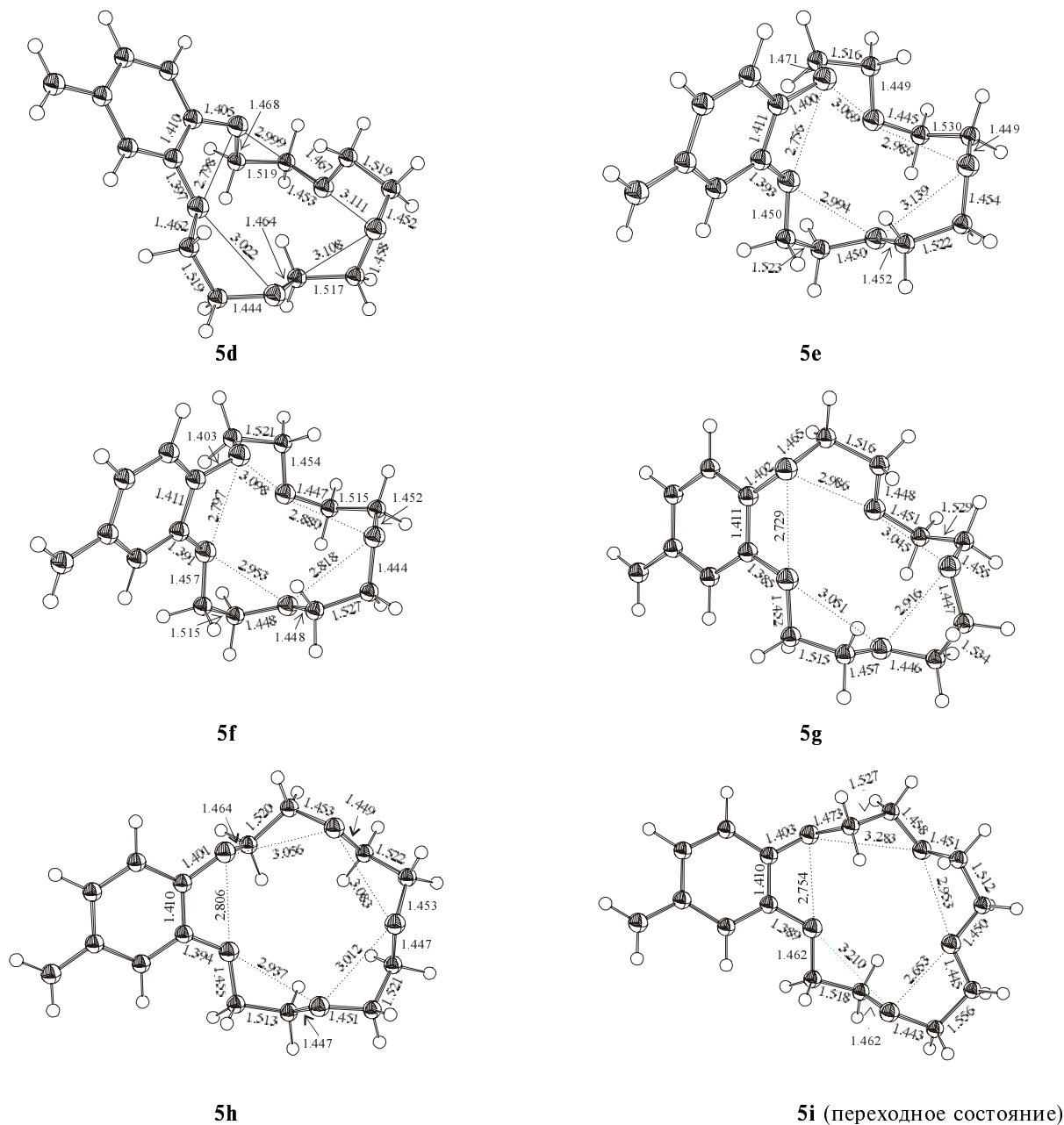


Таблица 3

Энергетические параметры* структур 5, рассчитанные методом DFT (B3LYP/6-31G)

Структура	$E_{\text{полн}}$	ZPE	ΔE	λ	ω_1
5a	-976,635128	0,347934	5,24	0	29,8
5b	-976,628942	0,348145	9,13	0	25,8
5c	-976,632876	0,348338	6,66	0	28,9
5d	-976,643487	0,349004	0	0	27,4
5e	-976,629092	0,348414	9,03	0	22,0
5f	-976,628881	0,348203	9,17	0	27,2
5g	-976,626945	0,348652	10,38	0	25,7
5h	-976,632220	0,348316	7,07	0	31,2
5i	-976,626170	0,347780	10,87	1	$i160,1$

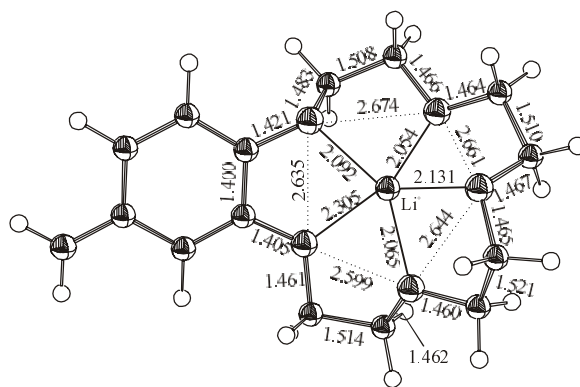
* $E_{\text{полн}}$ — полная энергия, а.е. (1 а.е. = 627,5095 ккал/моль); ZPE — энергия нулевых гармонических колебаний, а.е.; ΔE — относительная энергия, ккал/моль; λ — число отрицательных собственных значений гессиана; ω_1 ($i\omega$) — наименьшая (или мнимая) гармоническая частота, см^{-1}

Структуры трех конформеров (**5a**–**5c**) обладают выраженной симметрией относительно плоскости, перпендикулярной плоскости бензольного кольца и проходящей через наиболее удаленный от него кислородный центр; другие конформеры сильно искажены. Только один из обнаруженных конформеров, **5a**, характеризуется заметным уплощением цикла O_5 , где наиболее удаленный от бензольного кольца кислородный центр выведен из плоскости четырех других атомов кислорода не более чем на 15° . Отличительной особенностью рассматриваемых систем является сильное сближение связанных с бензольным кольцом кислородных центров, расстояния между которыми составляют $2,6$ – $2,8$ Å и в случае симметричных конформеров **5a**– $5c$ меньше суммы ван-дер-ваальсовых радиусов двух атомов кислорода ($2,8$ Å [18]). Остальные расстояния $O\dots O$ между соседними донорными центрами в конформерах **5** заметно длиннее и составляют $2,9$ – $3,1$ Å. Максимальными межатомными расстояниями $O\dots O$ (максимальным объемом макроциклической полости) характеризуется конформер **5d**, являющийся термодинамически наиболее выгодным. Остальные конформеры стабилизированы относительно **5d** на 5 – 10 ккал/моль.

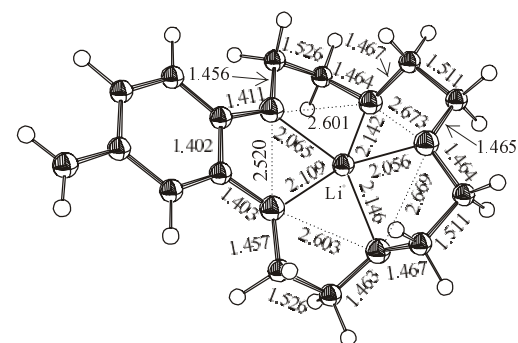
Рассчитанные значения наименьших колебательных частот конформеров **5** достаточно низки (табл. 3), что свидетельствует о небольшой глубине соответствующих минимумов и позволяет характеризовать краун-эфир **5** как стереохимически нежесткую систему, способную к низкобарьерным конформационным превращениям. Так, рассчитанный нами энергетический барьер изомеризации **5a** → **5b** через переходную структуру **5i** составляет $5,62$ ккал/моль, обратный процесс протекает с барьером $1,74$ ккал/моль.

Комплексы краун-эфира **5** с катионом Li^+

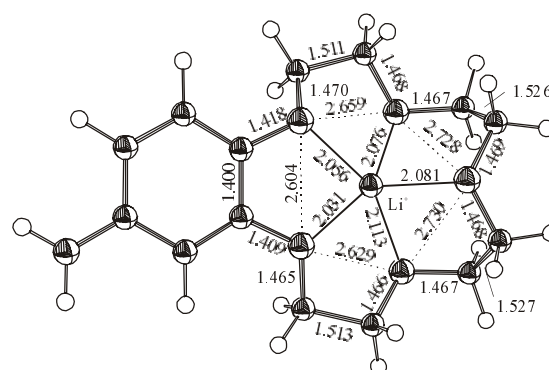
Как показывают расчеты, взаимодействие краун-эфира **5** с катионом Li^+ может приводить к комплексам **6a**, **6b**, **6c**, **6d**, **6e**, образованным конформерами **5e**, **5d**, **5b**, **5g** и **5a** соответственно. Энергетические параметры комплексов **6a**–**e** приведены в табл. 4.



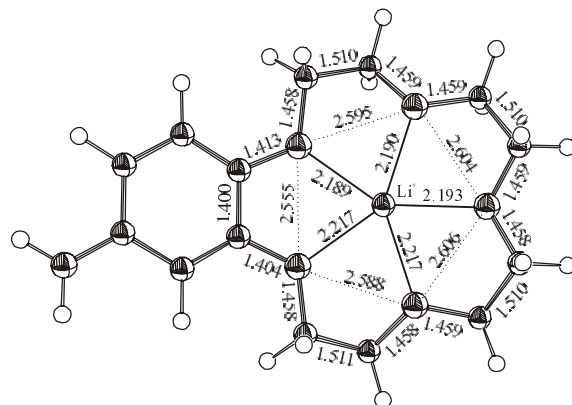
6b



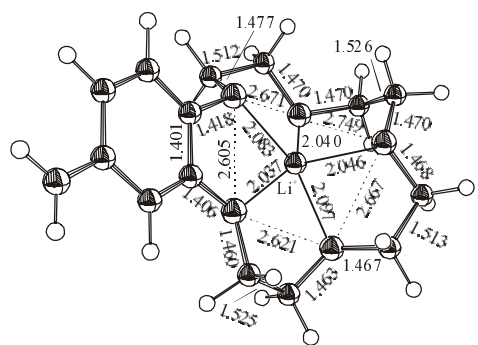
6c



6d



6e



6a

Таблица 4

Энергетические параметры* комплексов 6–8, рассчитанные методом DFT (B3LYP/6-31G)

Структура	$E_{\text{полн}}$	ZPE	ΔE	$E_{\text{компл}}$	ω_1	$E_{nO} \rightarrow p_{Li}$	q
6a	-984,128653	0,353798	0	134,93	34,7	43,33	0,504
6b	-984,128204	0,353596	0,28	125,62	29,8	25,96	0,501
6c	-984,127824	0,353948	0,52	134,50	29,8	35,25	0,522
6d	-984,125722	0,353690	1,84	134,44	28,7	41,97	0,528
6e	-984,125078	0,353281	2,24	128,90	24,8	23,71	0,532
7a	-1138,885232	0,352143	0	105,97	31,6	24,51	0,612
7b	-1138,883667	0,352029	0,98	99,74	32,4	24,48	0,615
7c	-1138,879744	0,351979	3,44	103,94	33,4	21,78	0,638
7d	-1138,877380	0,351950	4,93	104,96	28,5	23,44	0,637
8a	-1576,474432	0,350991	0	67,10	31,6	11,93	0,759
8b	-1576,473187	0,351190	0,78	72,98	18,4	11,16	0,778
8c	-1576,468832	0,350452	3,51	68,83	26,5	13,13	0,752
8d	-1576,474066	0,350961	0,23	73,94	32,1	11,02	0,767

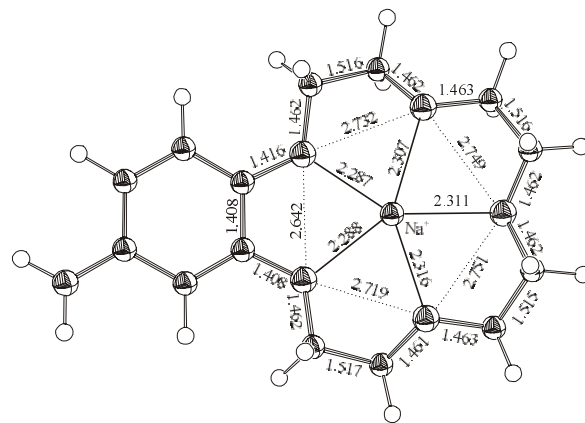
* $E_{\text{компл}}$ — энергия комплексообразования, ккал/моль; $E_{nO} \rightarrow p_{Li}$ — энергия орбитального взаимодействия, рассчитанная по схеме NBO, ккал/моль; q — заряд на атоме металла, e

Взаимодействие катиона лития с краун-эфиром **5** приводит к значительному сжатию полости краун-эфира и уменьшению межатомных дистанций O...O по сравнению с исходной системой. Укорочение межатомных расстояний O...O в случае связанных с бензольным кольцом кислородных центров составляет 0,10–0,16 Å; сокращение остальных связей O...O еще более существенно (0,19–0,47 Å). Наибольшее сжатие макроцикла наблюдается в комплексе **6b**, сформированном на основе конформера **5d** с максимальным размером полости. Размеры полости макроцикла комплекса **6b** оказываются слишком велики для катиона лития, что приводит к формированию неэквивалентных связей Li...O, одна из которых (2,3 Å) сильно удлинена по сравнению с другими (2,1 Å). Все остальные литиевые комплексы характеризуются выравненными связями Li...O. Наибольшими межатомными расстояниями Li...O (2,2 Å) характеризуется комплекс **6e**, сформированный на основе конформера **5a** с уплотненным узлом O₅, в других комплексах расстояния Li...O заметно короче и составляют 2,0–2,1 Å. Комплекс **6e** сохраняет уплотненную конформацию связей при литиевом центре, в то время как все остальные изомеры имеют неплоскую конфигурацию узла Li⁺O₅ с катионом лития в центре полости.

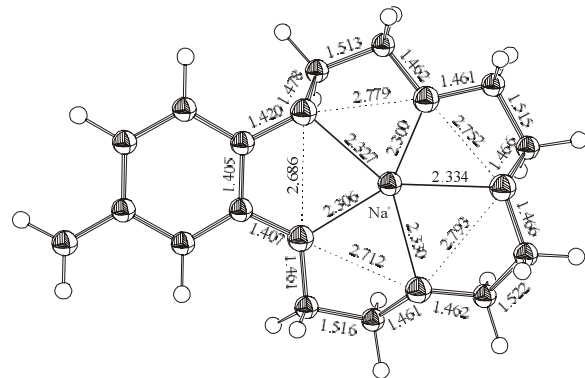
В ряду изомеров **6** уплотненный комплекс **6e** является термодинамически наименее выгодным и дестабилизирован относительно наиболее устойчивого изомера **6a** на 2,24 ккал/моль. Энергии комплексообразования систем **6**, рассчитанные как разность между полной энергией комплекса **6** и суммарной энергией катиона Li⁺ и соответствующего конформера **5**, составляют 126±135 ккал/моль. Наименьшей энергией комплексообразования характеризуется изомер **6b** с максимальным размером макроцикла: несоответствие размера катиона размеру макроциклической полости в данном случае требует значительных структурных перестроек исходного краун-эфира при формировании литиевого комплекса.

Комплексы краун-эфира **5** с катионом Na⁺

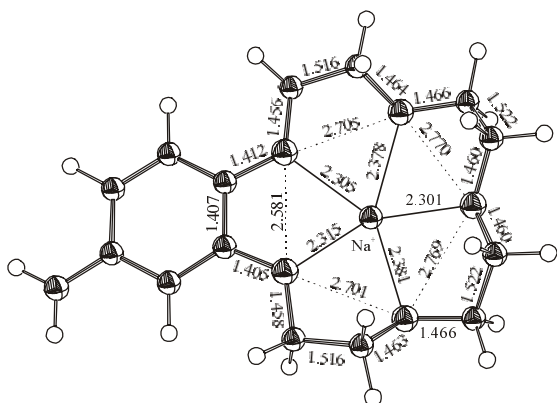
Взаимодействие краун-эфира **5** с катионом Na⁺ согласно расчетам может приводить к комплексам **7a**, **7b**, **7c** и **7d**, образованных конформерами **5a**, **5d**, **5c** и **5f** соответственно. Энергетические характеристики комплексов **7a–d** приведены в табл. 4.



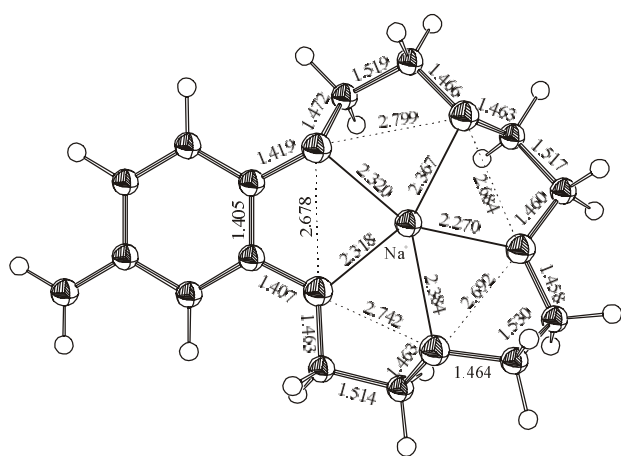
7a



7b



7c



7d

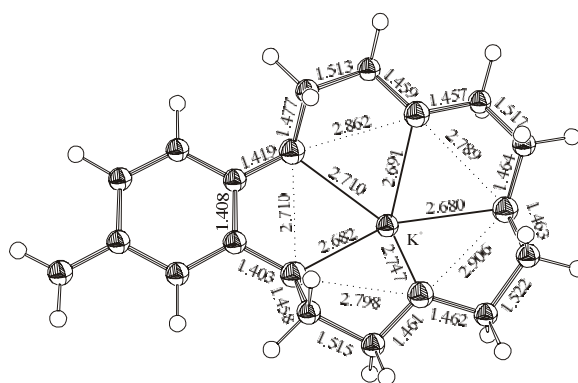
Формирование комплексов **7** приводит к заметным изменениям геометрических характеристик исходного краун-эфира, однако эти изменения оказываются менее выраженными, чем в случае комплексов лития, что свидетельствует о более благоприятных стереохимических условиях комплексообразования для катиона натрия. Сокращение межатомных расстояний O...O в случае связанных с бензольным кольцом кислородных центров составляет $0,01 \pm 0,12 \text{ \AA}$; сокращение остальных расстояний O...O более существенно ($0,10 - 0,30 \text{ \AA}$). Сформированные в результате взаимодействия связи катиона с кислородными центрами в комплексах **7** несколько длиннее, чем в комплексах **6** и лежат в интервале $2,3 - 2,4 \text{ \AA}$. В комплексах натрия не наблюдается заметных различий в длинах связей катиона с макроциклом: связи Na...O примерно эквивалентны во всех обнаруженных системах, что также указывает на лучшее соответствие размеров катиона и полости краун-эфира, чем в случае катиона лития.

В отличие от комплексов лития, где уплощенный комплекс **6e** оказывается наименее термодинамически устойчивым, аналогичный натриевый комплекс **7a** в ряду изомеров **7** является термодинамически наиболее выгодным. Комплекс **7b**, образованный в результате взаимодействия Na^+ с конформером **5d** краун-эфира, практически эквивалентен по энергии комплексу **7a**, два других комплекса **7c** и **7d** дестабилизированы относительно **7a** на 3,4 и 4,9 ккал/моль соответственно.

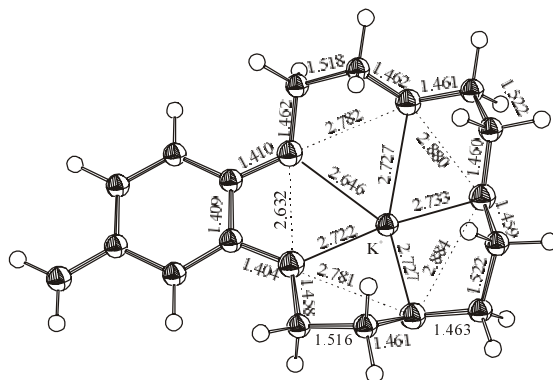
Рассчитанные энергии комплексообразования систем **7** на 25–29 ккал/моль ниже, чем для литиевых комплексов и составляют 100–106 ккал/моль. Наибольшей энергией комплексообразования характеризуется уплощенный комплекс **7a**; комплекс **7b**, сформированный на основе наиболее устойчивого конформера исходного краун-эфира, как и в случае комплексов лития, характеризуется наименьшей энергией комплексообразования.

Комплексы краун-эфира **5** с катионом K^+

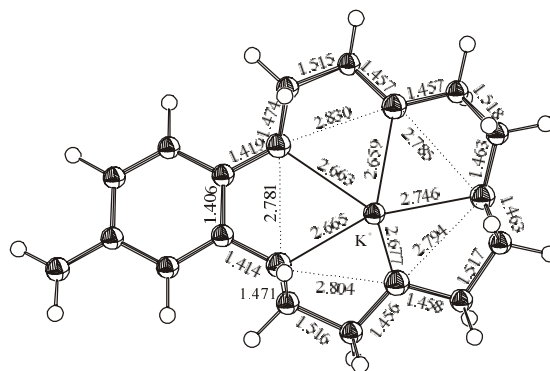
Взаимодействие краун-эфира **5** с катионом K^+ согласно расчетам может приводить к комплексам **8a**, **8b**, **8c** и **8d**, сформированных на основе конформеров **5d**, **5c**, **5a** и **5h** соответственно. Энергетические характеристики комплексов **8a–d** приведены в табл. 4.



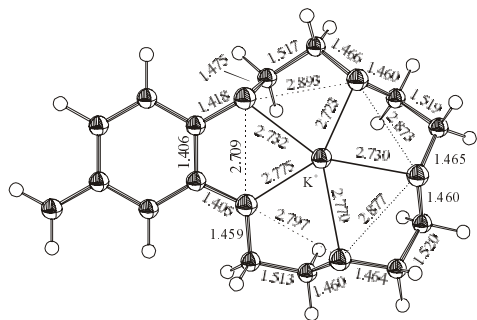
8a



8b



8c



8d

В отличие от комплексов лития и калия, где катион располагается внутри полости макроцикла, координационный узел K^+O_5 в комплексах **8** характеризуется квазипирамидальной структурой с катионом калия в вершине. Сжатие координационного узла O_5 исходного краун-эфира при формировании комплексов **8** оказывается гораздо менее выраженным, чем для комплексов **6** и **7**: так, изменения расстояний $O...O$ между связанными с бензольным кольцом кислородными центрами не превышают $0,1 \text{ \AA}$, остальные расстояния $O...O$ укорачиваются на $0,1-0,2 \text{ \AA}$. Рассчитанные длины связей катиона с атомами кислорода макроцикла в комплексах **8** ($2,7-2,8 \text{ \AA}$) намного больше, чем в случае комплексов **6**, **7** и примерно эквивалентны для всех обнаруженных систем.

В отличие от комплексов **6**, **7** наиболее термодинамически выгодной системой в данном случае является комплекс **8a**, сформированный на основе конформера **5d** с максимальным размером полости макроцикла; наименее выгодным — комплекс **8c**, сформированный на основе уплощенного конформера **5a** и дестабилизированный относительно **8a** на $3,51 \text{ ккал/моль}$.

Рассчитанные энергии комплексообразования систем **8** в $1,5-2$ раза ниже, чем для комплексов **6**, **7** и составляют $67-74 \text{ ккал/моль}$. Как и в предыдущих случаях, наименьшей энергией комплексообразования характеризуется сформированный на основе конформера **5d** комплекс **8a**.

Орбитальный анализ комплексов 6—8

Таким образом, проведенные расчеты подтверждают важное значение стерических условий для процессов связывания в комплексах **6—8**, но фактор структурного соответствия не является определяющим, о чем свидетельствует максимальная эффективность комплексообразования в литиевых системах. Как показывают исследования разнообразных внутри- и межмолекулярных нековалентных взаимодействий [19, 20], ключевую роль здесь могут играть орбитальные факторы. Для изучения влияния орбитальных эффектов на процессы комплексообразования в рассматриваемых системах был проведен анализ электронного строения комплексов **6—8** в рамках схемы натуральных связевых орбиталей (NBO-анализ [21]). Согласно NBO-анализу, основным аттрактивным компонентом связывания в комплексах **6—8** является взаимодействие орбиталей неподеленных пар кислородных центров краун-эфира с вакантными p -орбиталями щелочного металла. Результаты расчетов (см. табл. 4) свидетельствуют о понижении энергий орбитального взаимодействия в ряду Li , Na , K , что согласуется с тенденцией понижения энергий комплексообразования в этом ряду. В такой же последовательности, со-

гласно расчетам, происходит уменьшение донирования электронной плотности кислородными центрами (см. табл. 4). Если для катиона лития перенос заряда с краун-эфирного фрагмента на катион весьма значителен ($\sim 0,5 e$), то комплексы калия существуют практически в ионной форме. Понижение эффективности орбитального взаимодействия в ряду Li , Na , K объясняется повышением уровня p -орбиталей металла, что приводит к увеличению энергетической щели между орбиталями взаимодействующих компонентом и соответственно к ослаблению орбитального взаимодействия $n_O \rightarrow p_M$. В случае комплексов калия эффективному электронному донированию $n_O \rightarrow p_M$ препятствуют неблагоприятные стерические условия: расположение катиона вне полости макроцикла не обеспечивает оптимального перекрытия орбиталей фрагментов и снижает эффективность их взаимодействия.

Итак, не исключая существенной роли структурных факторов, проведенные расчеты свидетельствуют об определяющем влиянии орбитальных эффектов на энергетические характеристики рассмотренных комплексов. Расчеты указывают на предпочтительность комплексообразования имина **1** с катионом Li^+ по сравнению с катионами других щелочных металлов, что подтверждают полученные экспериментальные данные.

Работа поддержана грантами CRDF/Минобразования РФ (RO-004-X1), Министерства образования РФ (Е02-12.6-259), Министерства промышленности, науки и технологий РФ (НШ-945.2003.3), BRNE 2003 Post-Doctoral Fellowship (Y1-C-04-03) и грантом программы № 1 фундаментальных исследований ОХНМ РАН.

ЛИТЕРАТУРА

- Hiraoka M. Crown Compounds. Their Characteristics and Applications. Tokyo—Amsterdam—Oxford—New-York: Kadansha Ltd, Elsevier, 1982, 275 p.
- Брень В.А. Успехи химии, 2001, т. 70, № 12, с. 1152.
- Цивадзе А.Ю. Рос. хим. ж. (Ж. Рос. Хим. об-ва им. Д.И. Менделеева), 1996, т. 40, № 4—5, с. 43.
- Громов С.П. Там же, 2001, т. 45, с. 116.
- Prodi L., Bolletta F., Montali M., Zaccheroni N. Coord. Chem. Rev., 2000, v. 205, p. 59.
- Tanaka M., Kamada K., e. a. J. Org. Chem., 2000, v. 65, p. 4342.
- Fedorova O.A., Gromov S.P., Pershina Yu. V. e. a. J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2, 2000, p. 563.
- Dubonosov A.D., Minkin V.I., Bren V.A. e. a. Arch. Org. Chem., 2003, p. 12.
- Рыбалкин В.П., Дубоносов А.Д., Шепеленко Е.Н. и др. Ж. орг. химии, 2001, т. 37, с. 1083.
- Gromov S.P., Fedorova O.A., Ushakov E.N. e. a. J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2, 1999, p. 1323.
- Sakatoto H., Tanaka M., Kimura K. Chem. Lett., 2000, p. 928.
- Брень В.А., Дубоносов А.Д., Макарова Н.И., Минкин В.И. и др. Ж. орг. химии, 2002, т. 38, № 1, с. 145.
- Pedersen Y.C. Angew. Chem., 1988, v. 100, p. 1053.
- Цивадзе А.Ю., Варнек А.А., Хуторский В.Е. Координационные соединения металлов с краун-лигандами. М.: Наука, 1991, 397 с.
- Foresman J.B., Frisch E. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. 2nd ed. Pittsburg: Gaussian, Inc., 1996, 302 p.
- Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. e. a. Gaussian 98, Revision A.9. J. A. Pittsburg PA: Gaussian, Inc., 1998.
- PCMODEL, Selena Software, Bloomington (IN), USA. 1987.
- Эмсли Дж. Элементы. М.: Мир, 1993, 256 с.
- Минкин В.И. Рос. хим. ж. (Ж. Рос. Хим. об-ва им. Д.И. Менделеева), 1999, т. 43, с. 10.
- Мишнев П.М. Ж. неорган. химия, 2001, т. 46, с. 1521.
- Reed A.E., Curtiss Z.A., Weinhold F. Chem. Rev., 1988, v. 88, p. 899.