

# Estructuras de derivados nitro en posición 1 y 3 de metilindolizinas

O. Au.; V.A. Tafeenko y L.A. Aslanov  
Universidad de Oriente, Universidad Estatal de Moscú

## RESUMEN

Se determinan las estructuras cristalinas de 2-metil-3-nitroindolizina (I), 2,8-dimetil-3-nitroindolizina (II), 2-metil-1-nitroindolizina (III), y 2,8-dimetil-1-nitroindolizina (IV) por métodos directos y refinados con valores R de 0,042 (I y II), 0,033 (III) y 0,074 (IV) para 1 113, 991, 826 y 2 181 reflexiones respectivamente. Todos los compuestos son monoclinicos. El compuesto IV tiene dos moléculas cristalográficamente independientes en la unidad asimétrica.

## ABSTRACT

The crystal structures of 2-methyl-3-nitroindolizine (I), 2,8-dimethyl-3-nitroindolizine (II), 2-methyl-1-nitroindolizine (III) and 2,8-dimethyl-1-nitroindolizine (IV) have been determined by direct methods and refined to R values of 0,042 (I y II), 0,033 (III) and 0,074 (IV) for 1 113, 991, 826 and 2 181 reflections. All compounds are monoclinic. Compound IV has two crystallographically independent molecules in the asymmetric unit.

## INTRODUCCIÓN

La indolizina (Figura 1) y sus derivados son compuestos que, aparte de su interés académico en cuanto a su síntesis y propiedades, tienen interés práctico por sus propiedades farmacológicas<sup>1</sup>, usos como agentes fotográficos<sup>2</sup> o por ser intermediarios de productos con estas propiedades.

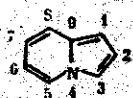


Figura 1.

La indolizina presenta todas las reacciones de los compuestos aromáticos, entre ellas la sustitución electrofílica. En la indolizina y en la indolizina sustituida, la sustitución electrofílica parece depender de los reaccionantes y de las condiciones experimentales. Ejemplo de ello es la nitración<sup>3</sup>.

Los nitro derivados en posición 6 y 8 de la indolizina han sido estudiados por rayos X y sus estructuras cristalinas han sido determinadas<sup>4</sup>. Sin embargo, los derivados nitro en posición 1 y 3 no han sido estudiados todavía por rayos X, aunque si han sido estudiados por espectroscopía de masa<sup>5</sup> y recientemente se ha determinado su facilidad de protonación en ácidos fuertes<sup>6</sup>.

El objetivo del presente trabajo es la determinación de las estructuras de 2-metil-3-nitroindolizina (I), 2,8-dimetil-3-nitroindolizina (II), 2-metil-1-nitroindolizina (III) y 2,8-dimetil-1-nitroindolizina (IV) por medio de los rayos X y relacionar los datos de las mismas con los resultados obtenidos previamente para compuestos similares.

## PARTE EXPERIMENTAL

Los compuestos I-IV se obtuvieron por reacción de 2-metilindolizina o 2,8-dimetilindolizina con ácido nítrico y ácido sulfúrico<sup>7</sup>. Los nitro isómeros se separan por cromatografía de columna. Anal. calc. para  $C_9H_8O_2N_2$  (I y III): C 61,39; H 4,58; O 18,16; N 15,90. Encontrado: C 61,59; H 4,52; N 16,25 para III y C 61,10; H 4,49; N 16,40 para I. Anal. calc. para  $C_{10}H_{10}O_2N_2$  (II y IV): C 63,15; H 5,30; O 16,82; N 14,73. Encontrado: C 63,2; H 5,30 para II y C 63,5; H 5,40 para IV.

Se utilizaron cristales apropiados para el estudio por rayos X. El examen preliminar y la recolección de los datos se realizó en un difractor automático CAD-4 equipado con monocromador de grafito y radiación Mo K $\alpha$ .

Las constantes de la celda y la matriz de orientación para la recolección de los datos se obtuvieron a partir de 25 reflexiones.

Los grupos espaciales se determinaron a partir de las extinciones sistemáticas ( $h0l$ ,  $l=2n$ ;  $Ok0$ ,  $k=2n$  para I;  $h0l$ ,  $h=2n$ ;  $Ok0$ ,  $k=2n$  para II;  $h0l$ ,  $h+1=2n$ ;  $Ok0$ ,  $k=2n$  para III y IV). Para el compuesto II las posiciones equivalentes del grupo espacial  $P2_1/a$ , una disposición alternativa de  $P2_1/c$ , son  $\frac{1}{2}(x, y, z)$ ;  $\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}+y, -z$ .

Un resumen de los datos de los cristales se dan en la Tabla I.

TABLA I

## DATOS CRISTALOGRAFICOS DE LOS COMPUESTOS I-IV

Compuesto	a (Å)	b (Å)	c (Å)	$\beta$ (°)	Z	Grupo Espacial
I	7,486(2)	16,008(3)	7,858(2)	119,03(2)	4	P2 <sub>1</sub> /c
II	7,028(2)	14,006(3)	9,149(1)	97,50(2)	4	P2 <sub>1</sub> /a
III	14,010(3)	4,689(2)	14,095(3)	118,59(1)	4	P2 <sub>1</sub> /n
IV	7,445(2)	33,383(5)	7,755(2)	107,44(3)	4	P2 <sub>1</sub> /n

Las intensidades se midieron a 293 K usando barrido  $\omega$  (h:-8 a 8, k:0 a 19, l:0 a 9 para I; h:-8 a 8, k:0 a 17, l:0 a 11 para II; h:-16 a 16, k:0 a 5, l:0 a 16 para III; h:-8 a 8, k:0 a 39, l:0 a 9 para IV). Se midieron 1 113(I), 991(II), 826(III) a 2 181(IV) reflexiones independientes diferentes de cero. No se observó variación significativa de las intensidades de las reflexiones utilizadas como estándar. Se realizó corrección de Lorentz-polarización y no fue necesario realizar corrección por la absorción.

Las estructuras se determinaron por métodos directos<sup>8</sup>. Los átomos diferentes de hidrógeno fueron localizados en mapas E y fueron refinados anisotrópicamente. Los átomos de hidrógeno fueron localizados mediante síntesis diferenciales de Fourier y sus posiciones y parámetros térmicos fueron refinados isotrópicamente.

Los factores atómicos se tomaron de International Tables for X-Ray Crystallography<sup>9</sup>. El último ciclo de refinamiento incluyó 150 (I y III), 167 (II) y 333 (IV) parámetros. Los factores obtenidos fueron  $R=0,042$  y  $R_w=0,043$  para I,  $R=0,042$  y  $R_w=0,039$  para II,  $R=0,034$  y  $R_w=0,033$  para III,  $R=0,074$  y  $R_w=0,067$  para IV.

Todos los cálculos se realizaron utilizando el paquete de programas SDP<sup>10</sup>.

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Las coordenadas de los átomos se listan en las Tablas II, III, IV y V. Los átomos de hidrógeno están numerados según el átomo de carbono al que están unidos. Las Figuras 2, 3, 4 y 5 muestran vistas perspectivas de las moléculas I-IV.

Las Figuras 6, 7, 8 y 9 muestran las distancias y ángulos de enlace de los compuestos I-IV.

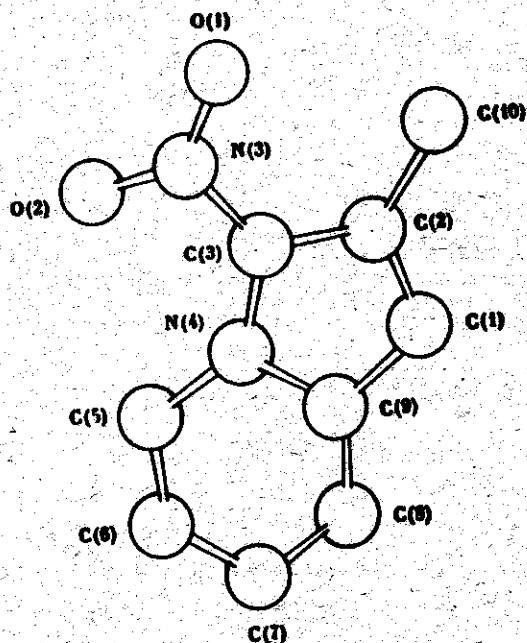


Figura 2

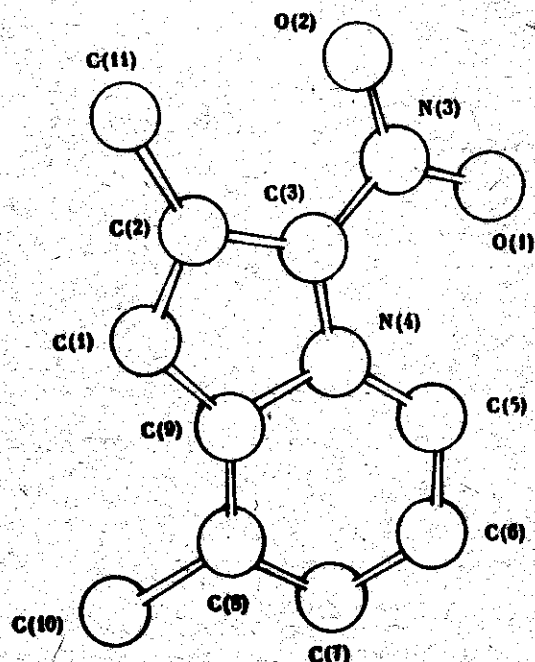


Figura 3

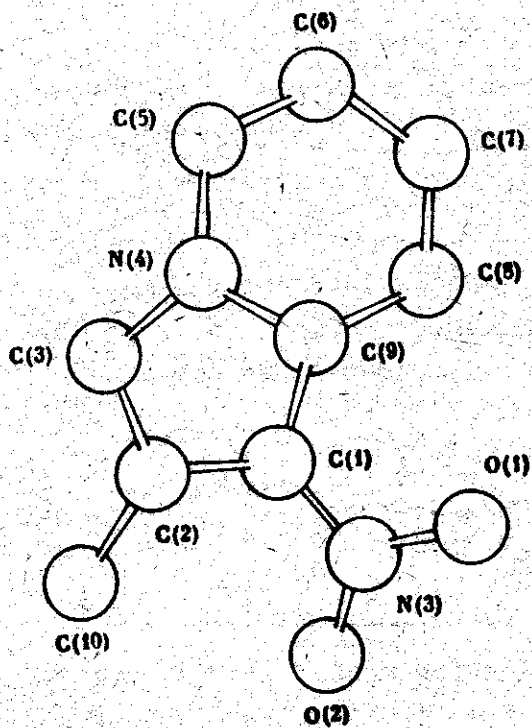


Figura 4

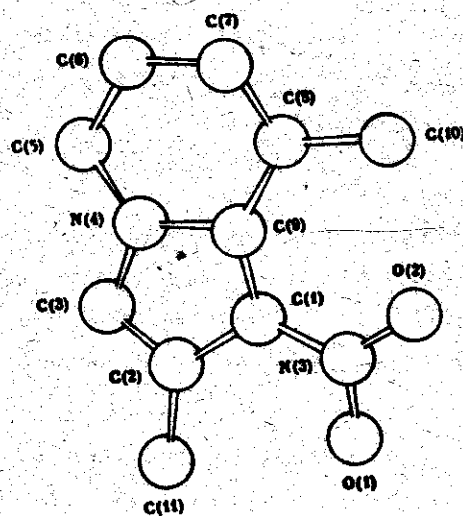


Figura 5

Figura 2. Vista perspectiva de la molécula I.

Figura 3. Vista perspectiva de la molécula II.

Figura 4. Vista perspectiva de la molécula III.

Figura 5. Vista perspectiva de la molécula IV.

TABLA II

COORDENADAS ATÓMICAS DEL COMPUESTO I, CON DESVIACIONES ESTÁNDAR ENTRE PARENTESIS

	x	y	z	$B_{eq}/B_{iso}$
O(1)	0,2977(3)	-0,1863(1)	0,9038(3)	5,80(6)
O(2)	0,0780(3)	-0,1038(1)	0,6806(3)	5,87(6)
N(3)	0,2133(3)	-0,1176(1)	0,8506(3)	2,95(4)
N(4)	0,1910(3)	0,0258(1)	0,9448(3)	4,17(6)
C(1)	0,4445(4)	0,0226(2)	1,2563(3)	3,49(6)
C(2)	0,4328(3)	-0,0559(2)	1,1827(3)	3,17(5)
C(3)	0,2762(3)	-0,0540(2)	0,9881(3)	3,05(5)
C(5)	0,0341(4)	0,0601(2)	0,7767(4)	3,87(6)
C(6)	-0,0181(4)	0,1409(2)	0,7785(4)	4,58(7)
C(7)	0,0814(4)	0,1901(2)	0,9452(4)	4,88(7)
C(8)	0,2366(4)	0,1572(2)	1,1097(4)	4,34(7)
C(9)	0,2959(4)	0,0734(2)	1,1131(3)	3,24(6)
C(10)	0,5595(4)	-0,1297(2)	1,2910(4)	4,53(7)
H(1)	0,526(3)	0,039(2)	1,385(3)	3,9(6)
H(5)	-0,014(4)	0,025(2)	0,662(3)	5,7(7)
H(6)	-0,126(4)	0,166(2)	0,658(4)	4,9(7)
H(7)	0,041(4)	0,248(2)	0,950(4)	6,4(8)
H(8)	0,299(4)	0,188(2)	1,228(4)	6,0(8)
H(101)	0,632(4)	-0,157(2)	1,222(4)	6,4(8)
H(102)	0,472(4)	-0,174(2)	1,307(4)	8,1(11)
H(103)	0,656(5)	-0,117(2)	1,422(4)	4,9(7)

TABLA III

COORDENADAS ATÓMICAS DEL COMPUESTO II, CON DESVIACIONES ESTÁNDAR ENTRE PARENTESIS

	x	y	z	$B_{eq}/B_{iso}$
O(1)	0,5843(4)	0,4265(2)	0,3873(3)	5,22(6)
O(2)	0,5312(4)	0,3200(2)	0,2146(3)	5,50(6)
N(3)	0,5712(4)	0,3421(2)	0,3464(3)	3,85(6)
N(4)	0,6492(3)	0,2850(2)	0,5991(3)	2,87(5)
C(1)	0,6479(4)	0,1266(2)	0,5559(4)	3,10(6)
C(2)	0,6009(4)	0,1700(2)	0,4219(3)	3,02(6)
C(3)	0,6013(4)	0,2689(2)	0,4483(3)	3,06(6)
C(5)	0,6671(5)	0,3681(2)	0,6808(4)	3,76(7)
C(6)	0,7167(5)	0,3614(2)	0,8277(4)	4,17(8)
C(7)	0,7487(5)	0,2728(3)	0,8983(4)	4,03(7)
C(8)	0,7286(4)	0,1899(2)	0,8202(3)	3,40(7)

(Cont. Tabla III)

COORDENADAS ATÓMICAS DEL COMPUESTO II, CON DESVIACIONES ESTÁNDAR ENTRE PARENTESIS

C(9)	0,6778(4)	0,1961(2)	0,6663(3)	2,87(6)
C(10)	0,7523(5)	0,0935(2)	0,8901(4)	4,36(8)
C(11)	0,5621(5)	0,1200(3)	0,2773(4)	4,16(6)
H(1)	0,662(4)	0,059(2)	0,572(3)	0,6(6)
H(5)	0,638(4)	0,429(2)	0,625(3)	2,0(7)
H(6)	0,724(4)	0,421(2)	0,883(3)	1,4(7)
H(7)	0,783(4)	0,270(2)	1,002(4)	2,0(7)
H(101)	0,633(5)	0,065(2)	0,909(4)	3,6(9)
H(102)	0,815(4)	0,045(2)	0,834(4)	2,7(8)
H(103)	0,828(4)	0,094(2)	0,980(4)	3,0(9)
H(111)	0,437(5)	0,128(2)	0,232(4)	3,1(9)
H(112)	0,579(5)	0,048(2)	0,287(4)	3,8(9)
H(113)	0,648(5)	0,141(3)	0,205(4)	5(1)

TABLA IV

COORDENADAS ATÓMICAS DEL COMPUESTO III, CON DESVIACIONES ESTÁNDAR ENTRE PARENTESIS

	x	y	z	$B_{eq}/B_{iso}$
O(1)	0,4821(1)	-0,2073(5)	0,6798(2)	5,63(6)
O(2)	0,3881(2)	-0,4715(5)	0,7318(2)	5,35(6)
N(3)	0,3936(2)	-0,2905(5)	0,6705(2)	3,90(6)
N(4)	0,1842(1)	0,0625(5)	0,4408(1)	3,08(5)
C(1)	0,2970(2)	-0,1794(6)	0,5866(2)	3,06(6)
C(2)	0,1889(2)	-0,2527(6)	0,5629(2)	3,01(6)
C(3)	0,1215(2)	-0,1028(6)	0,4730(2)	3,28(6)
C(5)	0,1474(2)	0,2473(7)	0,3548(2)	3,87(7)
C(6)	0,2214(2)	0,3943(7)	0,3382(2)	4,46(7)
C(7)	0,3337(2)	0,3545(7)	0,4068(2)	4,54(7)
C(8)	0,3701(2)	0,1709(6)	0,4921(2)	3,89(7)
C(9)	0,2939(2)	0,0194(6)	0,5109(2)	3,08(6)
C(10)	0,1525(2)	-0,4510(7)	0,6225(2)	4,01(7)
H(3)	0,037(2)	-0,097(5)	0,429(2)	3,7(6)
H(5)	0,060(2)	0,256(6)	0,305(2)	4,4(6)
H(6)	0,194(2)	0,518(6)	0,277(2)	5,4(7)
H(7)	0,389(2)	0,455(6)	0,393(2)	5,5(7)
H(8)	0,449(2)	0,139(5)	0,544(2)	4,2(6)
H(101)	0,178(2)	-0,400(6)	0,696(2)	4,4(6)
H(102)	0,174(2)	-0,646(6)	0,622(2)	4,8(7)
H(103)	0,065(2)	-0,443(7)	0,588(2)	6,6(8)

TABLA V  
COORDENADAS ATÓMICAS DEL COMPUESTO IV, CON DESVIACIONES ESTÁNDAR ENTRE PARENTESIS

	x	y	z	B <sub>eq</sub> /B <sub>iso</sub>
O(1)	1,0772(6)	0,1920(1)	1,0527(6)	7,0(1)
O(1')	0,5890(6)	-0,0603(1)	0,9039(5)	6,5(1)
O(2)	1,018(1)	0,1426(2)	1,1910(7)	14,7(2)
O(2')	0,525(1)	-0,1183(2)	0,8047(6)	15,2(2)
N(3)	1,0180(6)	0,1583(1)	1,0495(6)	5,4(1)
N(3')	0,5688(6)	-0,0955(1)	0,9306(5)	4,7(1)
N(4')	0,6340(5)	-0,1482(1)	1,3490(4)	3,42(8)
N(4)	0,7920(5)	0,0948(1)	0,6718(5)	3,74(8)
C(1')	0,6047(6)	-0,1104(1)	1,1076(5)	3,19(9)
C(1)	0,9335(6)	0,1388(1)	0,8845(6)	3,5(1)
C(2')	0,6872(6)	-0,0866(1)	1,2628(6)	3,6(1)
C(2)	0,8976(6)	0,1579(1)	0,7144(6)	4,1(1)
C(3')	0,7032(7)	-0,1104(1)	1,4063(6)	4,1(1)
C(3)	0,8115(7)	0,1307(2)	0,5893(6)	4,6(1)
C(5')	0,6273(7)	-0,1803(2)	1,4579(6)	4,3(1)
C(5)	0,7129(7)	0,0601(2)	0,5873(6)	4,6(1)
C(6')	0,5566(7)	-0,2151(1)	1,3819(6)	4,5(1)
C(6)	0,7080(7)	0,0278(1)	0,6881(7)	4,5(1)
C(7')	0,4888(6)	-0,2182(1)	1,1937(6)	4,1(1)
C(7)	0,7815(7)	0,0300(1)	0,8764(6)	4,2(1)
C(8')	0,4942(6)	-0,1870(1)	1,0806(6)	3,6(1)
C(8)	0,8621(6)	0,0639(1)	0,9651(6)	3,6(1)
C(9')	0,5712(5)	-0,1496(1)	1,1603(5)	3,11(9)
C(9)	0,8675(6)	0,0987(1)	0,8594(6)	3,31(9)
C(10')	0,4218(9)	-0,1941(2)	0,8812(7)	5,9(1)
C(10)	0,9464(9)	0,0623(2)	1,1682(7)	5,7(1)
C(11')	0,7541(7)	-0,0438(1)	1,2757(7)	4,7(1)
C(11)	0,9418(8)	0,2002(2)	0,6723(8)	5,7(1)
H(3)	0,258(5)	0,369(1)	0,965(1)	4(1)
H(5)	0,333(6)	0,940(1)	0,541(6)	5(1)
H(6)	0,347(6)	-0,003(1)	0,368(5)	4(1)
H(7)	0,723(5)	0,507(1)	0,558(5)	3,8(9)
H(101)	0,562(8)	0,533(2)	0,289(7)	9(2)
H(102)	0,916(7)	0,933(2)	0,799(7)	8(1)
H(103)	0,385(7)	0,422(2)	0,718(7)	7(1)
H(111)	0,427(7)	0,708(2)	0,776(7)	8(2)
H(112)	0,868(8)	0,222(2)	0,735(8)	10(2)
H(113)	0,410(7)	0,295(2)	0,050(7)	8(2)
H(111')	0,859(7)	0,476(1)	0,286(6)	7(1)
H(112')	0,650(7)	0,461(2)	0,292(7)	7(1)
H(113')	0,690(7)	0,465(2)	0,099(7)	7(1)
H(3')	0,755(6)	0,396(1)	0,971(6)	5(1)
H(5')	0,331(6)	0,177(1)	0,420(5)	4(1)
H(6')	0,947(6)	0,263(1)	0,040(6)	5(1)
H(7')	0,068(6)	0,257(1)	0,365(5)	3,9(9)
H(101')	0,841(5)	0,678(1)	0,339(4)	3,0(8)
H(102')	0,017(7)	0,691(2)	0,307(7)	8(1)
H(103')	0,853(8)	0,723(2)	0,353(8)	9(2)



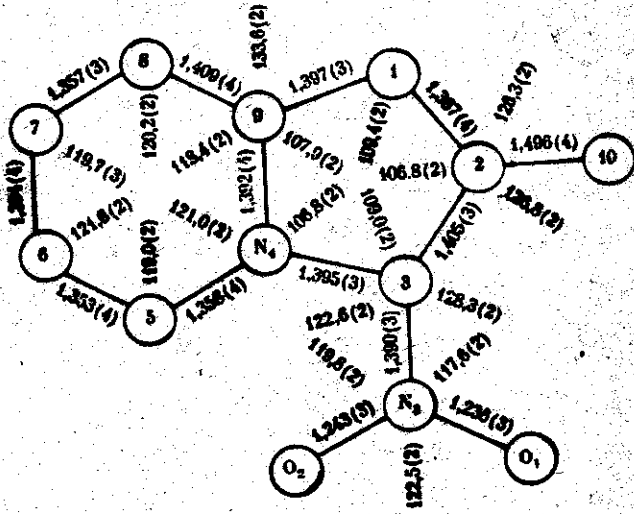


Figura 6

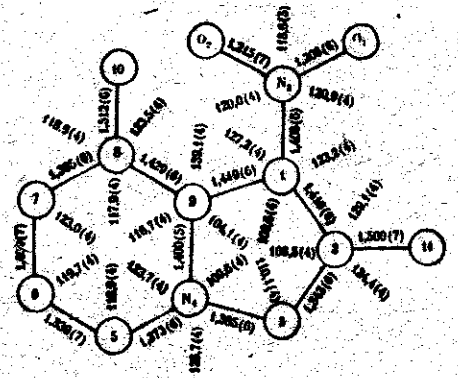


Figura 9

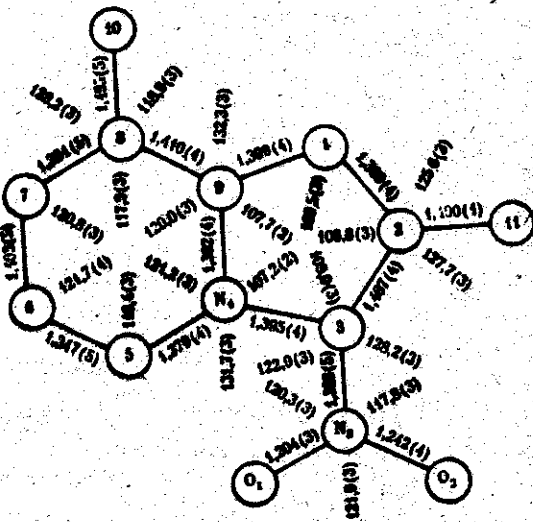


Figura 7

Figura 6. Distancias (Å) y ángulos (°) de enlace de I

Figura 7. Distancias (Å) y ángulos (°) de enlace de II

Figura 8. Distancias (Å) y ángulos (°) de enlace de III

Figura 9. Distancias (Å) y ángulos (°) de enlace, (a) para la molécula A y (b) para la molécula B de IV

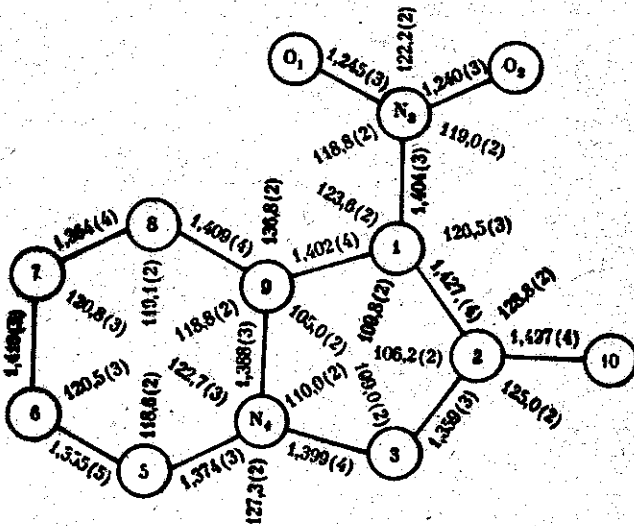


Figura 8



De los cuatro compuestos estudiados, IV tiene dos moléculas A y B cristalográficamente independientes en la unidad asimétrica. Las distancias y ángulos de enlace muestran una buena correspondencia (Figura 9), siendo la desviación media de 0,003 Å y 0,3° respectivamente.

Los anillos indolizínicos de I-IV son planos. Las desviaciones de los átomos de los planos mínimo cuadrados ( $0,9145x + 0,2793y - 0,2929z - 3,7766 = 0$  para I;  $0,9917x + 0,0431y - 0,1210z - 3,3283 = 0$  para II;  $0,3268x - 0,7449y - 0,5817z + 3,5320 = 0$  para III y  $0,9541x - 0,2928y - 0,0628z - 2,9057 = 0$  para IV) no son mayores de 0,014 Å.

Los grupos nitro son prácticamente coplanares con el anillo indolizínico. Los ángulos entre ellos es de 3° (I); 2,9° (II); 2° (III) y 8,9° (IV). Esta coplanaridad del grupo nitro y el núcleo indolizínico favorece la interacción de este sustituyente con el anillo principal.

Los enlaces N(nitro)-C(indolizina) están entre 1,383-1,407 Å, es decir mucho menores que las encontradas anteriormente<sup>4</sup> para los enlaces de los grupos nitro en posición 6 u 8 (1,42-1,450 Å). Esto es indicativo del mayor carácter de doble enlace N(nitro)-C(indolizina) para los compuestos I-IV, en que los grupos nitro se encuentran en posición 1 ó 3.

Las distancias de enlace en el anillo indolizínico para diferentes nitro derivados de la indolizina, muestra las mayores diferencias en el anillo de cinco miembros (Tabla VI). Para los compuestos V-VIII, en los cuales el grupo nitro está unido al anillo de 6 miembros, los enlaces C(9)-C(1) y C(2)-C(3) tienen valores característicos de dobles enlaces.

TABLA VI

— DISTANCIAS DE ENLACE DEL ANILLO INDOLIZÍNICO EN NITROINDOLIZINAS —

Comp.	1-2	2-3	3-N <sub>4</sub>	N <sub>4</sub> -5	5-6	6-7	7-8	8-9	9-1	N <sub>4</sub> -9	Literatura
I	1,367	1,405	1,395	1,385	1,353	1,394	1,357	1,409	1,397	1,392	Este trabajo
II	1,369	1,407	1,395	1,379	1,347	1,403	1,361	1,410	1,399	1,392	" "
III	1,427	1,359	1,399	1,374	1,355	1,410	1,364	1,409	1,402	1,388	" "
IV*	1,416	1,343	1,385	1,373	1,339	1,400	1,365	1,429	1,419	1,400	" "
	1,420	1,344	1,348	1,374	1,377	1,398	1,371	1,433	1,417	1,397	" "
V	1,427	1,376	1,384	1,369	1,347	1,425	1,355	1,421	1,354	1,422	4

\* dos moléculas independientes en la unidad asimétrica.

(Cont. Tabla IV) DISTANCIAS DE ENLACE DEL ANILLO INDOLIZÍNICO EN NITROINDOLIZINAS

Comp.	1-2	2-3	3-N <sub>4</sub>	N <sub>4</sub> -5	5-6	6-7	7-8	8-9	9-1	N <sub>4</sub> -9	Literatura
VI	1,427	1,390	1,352	1,395	1,346	1,402	1,381	1,421	1,375	1,419	4
VII	1,44	1,37	1,41	1,38	1,40	1,41	1,39	1,44	1,34	1,42	4
VIII	1,44	1,37	1,38	1,43	1,40	1,41	1,34	1,46	1,37	1,42	4

V: 2-fenil-6-nitroindolizina  
 VI: 2-fenil-8-nitroindolizina  
 VII: 2-fenil-5-butilamino-8-nitroindolizina  
 VIII: 2-fenil-5-piperidino-8-nitroindolizina

Los resultados obtenidos en el presente trabajo muestran una situación diferente para los compuestos I-IV, en que el grupo nitro está unido al anillo de 5 miembros.

En el caso de los compuestos I y II, el grupo nitro está en posición 3. En ellos, las distancias C(9)-C(1) y C(2)-C(3) son mucho mayores que las que se presentan en V-VIII e indican un mayor carácter de enlace sencillo de éstos en I y II. Por otro lado, las distancias C(1)-C(2) son mucho menores que las correspondientes en V-VIII, significando un mayor carácter de doble enlace del mismo en I-II.

Todo lo anterior evidencia la mayor contribución de las formas canónicas con separación de las cargas para los derivados nitro en posición 3, que para el compuesto I se puede formular como aparece en la Figura 10.

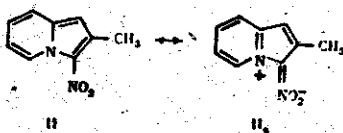


Figura 10

En el caso de los compuestos III y IV, el grupo nitro está en posición 1. En ellos, la distancia C(9)-C(1) es mayor que la correspondiente en V-VIII, e indica un mayor carácter de enlace sencillo del mismo en III y IV. Pero las distancias C(1)-C(2) y C(2)-C(3) son similares a las encontradas en V-VIII, e indican enlaces sencillos y dobles respectivamente. Esto significa en el caso de los compuestos III y IV, en que el grupo nitro está en posición 1, la mayor contribución de las formas canónicas con separación de las cargas que para el compuesto III se puede formular como aparece en la Figura 11.

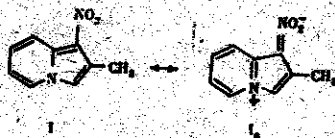


Figura 11.

## AGRADECIMIENTOS

A E.V. Babaev por el suministro de los monocristales y las discusiones sobre el tema.

## BIBLIOGRAFÍA

1. Hirosawa, T.  
Proc. Japan. Pharmacol. Soc. 12, 218, 1938.
2. Brooker, L.G.S.  
U.S. Patent 2, 409, 612.
3. Hickman, J.A. y D.G. Wibberley  
J. Chem. Soc., Perkin Trans. I, N.23, 2954, 1972.
4. Tafeenko, V.A. y L.A. Aslanov  
Zhur. Strukt, Jim, 21(6), 69, 1980.
5. Bobrovskii, S.I.; E.V. Babaev; Yu.G. Bundel  
Vestn. Mosk. Univ., Ser. 2: Khim, 26(2), 222, 1985.
6. Bobrovskii, S.I.; E.V. Babaev; Yu.G. Bundel  
Zh. Org. Khim. 21(3), 673, 1985.
7. Borrows, E.T.; D.O. Holland y J. Kenyon  
J. Chem. Soc., Part. II, 1077, 1946.
8. Germain, G.; P. Main y M.M. Woolfson  
Acta Cryst., A27, 368, 1971.
9. International Tables for X Ray Crystallography, Vol. IV, Birmingham:  
Kynoch Press, 1974.
10. Frenz, B.A.  
Enraf-Nonius Structure Determination Package, 1978.