

## Синтез 1-(адамantan-1-ил)-1*H*-1,2,3-триазолов и их солей адамантилированием в системах AdOH–HClO<sub>4</sub> и AdOH–H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>

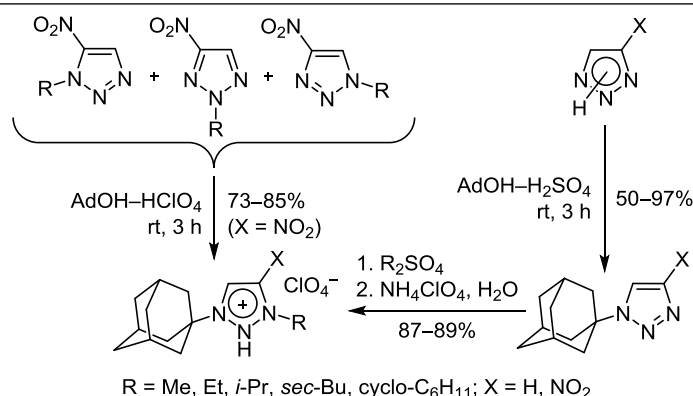
Геннадий Т. Суханов<sup>1</sup>, Юлия В. Филиппова<sup>1\*</sup>, Анна Г. Суханова<sup>1</sup>,  
Ирина Ю. Багрянская<sup>2,3</sup>, Константин К. Босов<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН,  
ул. Социалистическая, 1, Бийск 659322, Россия; e-mail: filipova-yulia@mail.ru

<sup>2</sup> Новосибирский институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова СО РАН,  
пр. Академика Лаврентьева, 9, Новосибирск 630090, Россия; e-mail: bagryan@nioch.nsc.ru

<sup>3</sup> Новосибирский государственный университет,  
ул. Пирогова, 1, Новосибирск 630090, Россия

Поступило 26.06.2019  
Принято после доработки 22.09.2019



Региоселективным адамантилированием производных 1,2,3-триазолов синтезированы 1-(адамantan-1-ил)-1*H*-1,2,3-триазолы и серия солей 1-(адамantan-1-ил)-3-алкил-1,2,3-триазолия. Направление атаки адамантильным катионом по атому азота N-1 и региоселективность процессов адамантилирования и кватернизации обеспечивается рядом факторов: специфичностью свойств высококислотных систем AdOH–HClO<sub>4</sub> и AdOH–H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, а также структурной особенностью и высокой реакционной способностью адамантан-1-ола.

**Ключевые слова:** 1-(адамantan-1-ил)-1*H*-1,2,3-триазол, адамантан-1-ол, алкилсульфат, серная кислота, соль 1-(адамantan-1-ил)-3-алкил-1,2,3-триазолия, 1,2,3-триазол, хлорная кислота, адамантилирование, кватернизация, региоселективность.

1,2,3-Триазольный цикл выступает как базовая структура в дизайне биологически активных соединений,<sup>1</sup> высокоэнергетических материалов,<sup>2</sup> комплексных соединений,<sup>3</sup> ионных жидкостей<sup>4</sup> и полимерных материалов,<sup>5</sup> а также в качестве компонентов фотолюминисцентных сенсоров для различных аналитических целей.<sup>6</sup> Структурные модификации производных азолов с введением адамантильного заместителя могут привести к расширению спектра практического использования соединений на основе азольного цикла, что обусловлено специфическими свойствами адамантана: конформационной жесткостью, липофильностью и шарообразной геометрией.<sup>7</sup> Производные азола, содержащие адамантильный заместитель, являются лекар-

ственными средствами,<sup>8</sup> полимерами и металлоорганическими каркасными материалами,<sup>9</sup> используются в химии комплексов "хозяин–гость" и нанотехнологиях.<sup>10</sup> Несмотря на то, что ранее был синтезирован широкий ряд производных гетарилаадамтанов,<sup>9a,b,11</sup> данные по синтезу аддуктов 1,2,3-триазола и адамантана весьма ограничены. В литературе имеются единичные примеры получения 1,2,3-триазолилаадамтанов, основанные на реакциях 1,3-диполярного циклоприсоединения.<sup>11a</sup> Сведения о синтезе солей *N,N*-дизамещенного 1,2,3-триазолия, содержащих в своей структуре адамантильный фрагмент, в литературе отсутствуют.

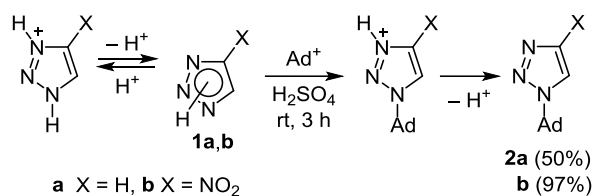
Удобными подходами для модификации производных 1,2,3-триазола являются *N*-моноалкилирование и

исчерпывающее алкилирование (кватернизация).<sup>12</sup> При рассмотрении реакций амбидентных нуклеофилов, имеющих не менее двух гетероатомов – доноров электронов, возникает вопрос о региоселективности процесса, являющейся одной из ключевых проблем химии гетероциклов. Производные 1,2,3-триазола, включая 4(5)-нитро-1,2,3-триазолы, алкилируются, как правило, по всем атомам азота, образуя смесь трех региоизомерных продуктов.<sup>12a-c</sup> Известны немногочисленные примеры региоселективных реакций: алкилирование 1,2,3-триазола *i*-PrOH<sup>12g</sup> и 4-нитро-1*H*-1,2,3-триазола<sup>12d</sup> *t*-BuOH в средах с высокой кислотностью, а также кватернизация 1-алкил-4-нитро-1*H*-1,2,3-триазолов диалкилсульфатами<sup>12e</sup> или *t*-BuOH<sup>12f</sup> в кислых средах. Функционализация производных 1,2,3-триазола стерически нагруженными спиртами, а также влияние различных факторов на ход реакции не изучены.

Проведенные исследования в области катализируемой кислотой функционализации азолов<sup>12d,f,g</sup> и специфика реакционной способности производных адамантана побудили нас к продолжению работ по разработке региоселективных методов синтеза неизвестных ранее 1,2,3-триазолилаадамантанов. В настоящей работе мы изучили реакцию 1,2,3-триазолов, 4(5)-нитро-1,2,3-триазолов и *N*-алкил-4(5)-нитро-1,2,3-триазолов с адамантан-1-олом (AdOH) в среде H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> или HClO<sub>4</sub>.

Обнаружено, что адамантирование 1,2,3-триазолов **1a,b** в системе AdOH–H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> происходит исключительно по атому азота N-1 и единственными продуктами реакции являются 1-(адамantan-1-ил)-1*H*-1,2,3-триазол (**2a**) и 1-(адамantan-1-ил)-4-нитро-1*H*-1,2,3-триазол (**2b**) (схема 1). Эффективность выбранного реагента адамантан-1-ола обусловлена легкостью образования и высокой стабильностью адамантильного катиона (Ad<sup>+</sup>), стабилизированного электронодонорным влиянием трех соседних метиленовых групп и "эффeктом клетки",<sup>13</sup> возникающим в результате перекрытия тыльных сторон орбиталей четырех третичных атомов углерода внутри каркаса.

Схема 1



В концентрированной H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 1,2,3-триазолы **1a,b** подвергаются протонированию с образованием катионов 1*H*,3*H*-1,2,3-триазолия, в которых единственный доступный для введения заместителя атом азота N-2 участвует в распределении положительного заряда. В связи с этим электрофильная атака по этому атому азота затруднена и алкилирование катиона 1*H*,3*H*-1,2,3-триазолия не происходит. Таким образом, адамантильный катион атакует нейтральные молекулы 1,2,3-триазолов **1a,b**, приводя к катионам 1-(адамantan-1-ил)-1*H*,3*H*-1,2,3-триазолия, которые при депротонировании

трансформируются в 1-(адамantan-1-ил)-1*H*-1,2,3-триазолы **2a,b** (схема 1).

На степень конверсии исходных соединений в реакции азолов **1a,b** и AdOH в кислотных средах влияют два фактора: степень протонирования азота и реакционная способность нейтральных молекул азолов. Введение электроноакцепторной нитрогруппы в 1,2,3-триазольный цикл приводит к значительному снижению основности азота:  $pK_{\text{BH}^+}$  4(5)-нитро-1,2,3-триазола **1b** равна  $-9.64^{12a}$ , что примерно на 10 логарифмических единиц ниже соответствующего значения для 1,2,3-триазола **1a** ( $pK_{\text{BH}^+}$  1.00<sup>12a</sup>). Главное влияние основности 1,2,3-триазола на степень конверсии исходных соединений в алкилировании состоит в изменении степени протонирования азота, которая существенно снижается у 4(5)-нитро-1,2,3-триазола **1b** по сравнению с 1,2,3-триазолом **1a**. При этом реакционная способность нейтральных молекул 4(5)-нитро-1,2,3-триазола **1b** также снижается. Таким образом, степень протонирования и реакционная способность нейтральных молекул реагентов **1a,b** компенсируют друг друга в выражении для определения степени конверсии исходных соединений в адамантировании, поэтому при огромном различии в основности этих реагентов различие в степени их превращения незначительно: за 3 ч реакции достигается полупревращение 1,2,3-триазола **1a** и полная конверсия 4(5)-нитро-1,2,3-триазола **1b**.

В спектре ЯМР <sup>1</sup>H 1-(адамantan-1-ил)-1*H*-1,2,3-триазола (**2a**) сигналы двух гетероароматических протонов проявляются характерными синглетами при 7.71 и 8.20 м. д. Сигнал протона Н-5 соединения **2b** регистрируется в более слабopольной области при 9.29 м. д., что связано с влиянием электроноакцепторной нитрогруппы. Протонам адамантильного фрагмента соединений **2a,b** отвечают уширенные синглеты, расположенные в областях 1.75–1.77 и 2.18–2.26 м. д.

Структура 1-(адамantan-1-ил)-4-нитро-1*H*-1,2,3-триазола (**2b**) однозначно подтверждена методом РСА (рис. 1). Согласно данным РСА, в молекуле соединения **2b** 1,2,3-триазольный цикл плоский, среднеквадратичное отклонение атомов от плоскости составляет

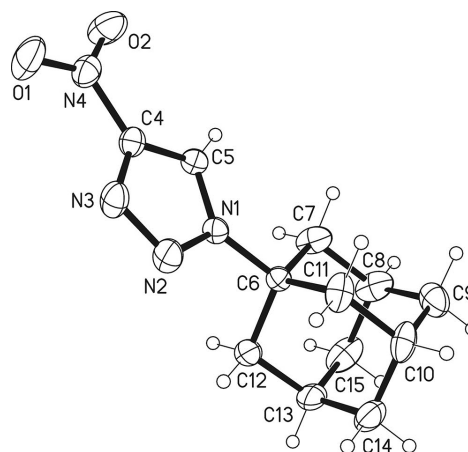


Рисунок 1. Молекулярная структура соединения **2b** в представлении атомов эллипсоидами тепловых колебаний с 50% вероятностью.

0.006 Å. Нитрогруппа также плоская, выход атома азота N-4 из плоскости, в которой лежат атомы O-1, O-2, C-4, равен 0.013(3) Å. Двугранный угол между плоскостью нитрогруппы и плоскостью 1,2,3-триазольного цикла равен 1.6(2)°. Длины связей и валентные углы соответствуют среднестатистическим значениям.<sup>14</sup> В кристалле соединения **2b** образуют бесконечные цепи вдоль оси *c* за счет слабых водородных связей C(5)–H···N(2) (расстояние H···N(2) 2.46 Å, C(5)···N(2) 3.379(2) Å, угол C(5)–H···N(2) 168°).

Систематические исследования моноалкилирования 4(5)-нитро-1,2,3-триазола **1b** в кислотных, щелочных и нейтральных средах сделали доступными *N*-замещенные 4(5)-нитро-1,2,3-триазолы.<sup>12a-d</sup> Разработанные методы, отличающиеся неселективностью,<sup>12a-c</sup> привели к образованию смесей региоизомерных *N*-алкил-4(5)-нитро-1,2,3-триазолов, содержащих малодоступные и неизвестные ранее 1-алкил-5-нитро-1*H*-1,2,3-триазолы (*N*<sup>3</sup>-изомеры), обладающие уникальными свойствами: наибольшей среди изомерных *N*-алкил-4(5)-нитро-1,2,3-триазолов энтальпией образования,<sup>15</sup> наибольшей основностью<sup>3a</sup> и наибольшей реакционной способностью в реакциях комплексообразования.<sup>3</sup> Таким образом, *N*<sup>3</sup>-изомеры вызывают интерес в качестве потенциальных исходных соединений в синтезе солей *N,N*-дизамещенного 4(5)-нитро-1,2,3-триазолия с адамантильным заместителем.

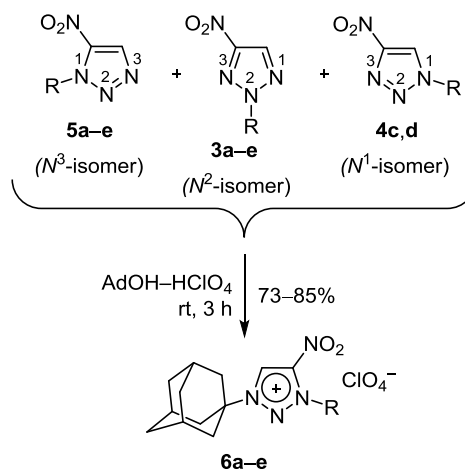
Основность гетероциклического субстрата оказывает влияние на его кватернизацию. По данным квантово-химических расчетов, основность *N*-алкил-4(5)-нитро-1,2,3-триазолов зависит от положения *N*-заместителя в 1,2,3-триазольном цикле и увеличивается в ряду 2-алкил-4-нитро-2*H*-1,2,3-триазолы **3a–e** (*N*<sup>2</sup>-изомеры) < 1-алкил-4-нитро-1*H*-1,2,3-триазолы **4c,d** (*N*<sup>1</sup>-изомеры) < 1-алкил-5-нитро-1*H*-1,2,3-триазолы **5a–e** (*N*<sup>3</sup>-изомеры) (схема 2). Расчетное значение  $pK_{BH^+}$  1-метил-5-нитро-1*H*-1,2,3-триазола (**5a**) (*N*<sup>3</sup>-изомера), равное –4.21, более чем на четыре логарифмические единицы выше соответствующего значения для 1-метил-4-нитро-1*H*-1,2,3-триазола (*N*<sup>1</sup>-изомера) ( $pK_{BH^+}$  –8.60).<sup>12a</sup>

Существенное влияние основности выявлено при кватернизации изомерных *N*-алкил-4(5)-нитро-1,2,3-триазолов с низшими первичными (соединения **3a,b** и **5a,b**), вторичными (соединения **3–5 c,d**) и циклическими (соединения **3e** и **5e**) алкильными заместителями в системе AdOH–HClO<sub>4</sub>. В реакцию, независимо от заместителя, вступают исключительно *N*<sup>3</sup>-изомеры **5a–e**, даже несмотря на их низкую долю в смесях *N*-алкил-4(5)-нитро-1,2,3-триазолов **3a–e**, **4c,d** и **5a–e** (схема 2).

На основании квантово-химических расчетов относительной энергии изомерных катионов 1,2-**k1**, 1,3-**k2** и 1,2-**k3** *N,N*-дизамещенного 4(5)-нитро-1,2,3-триазолия наиболее устойчивыми являются катионы 1,3-**k2**<sup>12d,e</sup> (рис. 2). Таким образом, образование наиболее термодинамически стабильных продуктов 1,3-дизамещения возможно только при алкилировании *N*<sup>1</sup>- или *N*<sup>3</sup>-изомеров (соединения **4c,d** и **5a–e**).

Для кватернизации использовали смеси региоизомерных *N*-алкил-4(5)-нитро-1,2,3-триазолов **3a–e**, **4c,d**

## Схема 2



a R = Me, b R = Et, c R = *i*-Pr, d R = *sec*-Bu, e R = cyclo-C<sub>6</sub>H<sub>11</sub>

и **5a–e** и новую систему AdOH–HClO<sub>4</sub> (схема 2). В концентрированной HClO<sub>4</sub> *N*<sup>1</sup>- и *N*<sup>3</sup>-изомеры (соединения **4c,d** и **5a–e**) протонируются с образованием катионов 3-(адамантан-1-ил)-1-алкил- и 1-(адамантан-1-ил)-3-алкил-4-нитро-1,2,3-триазолия (катионы 1,3-**k2**). В результате протонирования и дегидратации молекулы адамантан-1-ола в среде HClO<sub>4</sub> образуется высокостабильный адамантильный карбокатион. Как показано выше при обсуждении алкилирования 1,2,3-триазолов **1a,b**, катион 1*H*,3*H*-1,2,3-триазолия не реакционноспособен в реакции с адамантильным катионом, поэтому при кватернизации соединений **4c,d** и **5a–e** адамантильный карбокатион атакует нейтральные молекулы 1,2,3-триазолов.

Кватернизация наиболее основных 1-алкил-5-нитро-1*H*-1,2,3-триазолов (*N*<sup>3</sup>-изомеров) **5a–e** в системе AdOH–HClO<sub>4</sub> протекает селективно по атому азота N-3 с образованием термодинамически более стабильных солей 1-(адамантан-1-ил)-3-алкил-4-нитро-1,2,3-триазолия **6a–e** (схема 2). Реакция завершается выпадением из реакционных смесей солей **6a–e** с высокими выходами (табл. 1).

При кватернизации достаточно основных, что должно способствовать алкилированию, 1-алкил-4-нитро-1*H*-1,2,3-триазолов **4c,d** (*N*<sup>1</sup>-изомеров) атом азота N-3 предпочтительнее атома азота N-2 для атаки адамантильным катионом (катион 1,3-**k2** стабильнее катиона 1,2-**k1**). Однако реакция чувствительна к стерическим факторам и наличие в положении 4 нитрогруппы препятствует введению объемного адамантильного заместителя к атому азота N-3. Этим объясняется отсут-

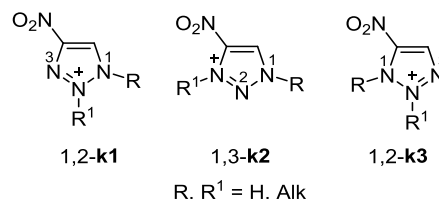


Рисунок 2. Изомерные катионы *N,N*-дизамещенного 4(5)-нитро-1,2,3-триазолия.

**Таблица 1.** Кватернизация смесей *N*-алкил-4(5)-нитро-1,2,3-триазолов **3a–e**, **4c,d** и **5a–e** в системе AdOH–HClO<sub>4</sub>

Смесь (соотношение изомеров)	1,2,3-Триазол	Продукт	Выход, %
<b>3a:5a</b> (9:1)			85
<b>3b:5b</b> (9:1)			85
<b>4c:3c:5c</b> (1:47:15)			83
<b>4d:3d:5d</b> (1:23:10)			82
<b>3e:5e</b> (9:1)			73

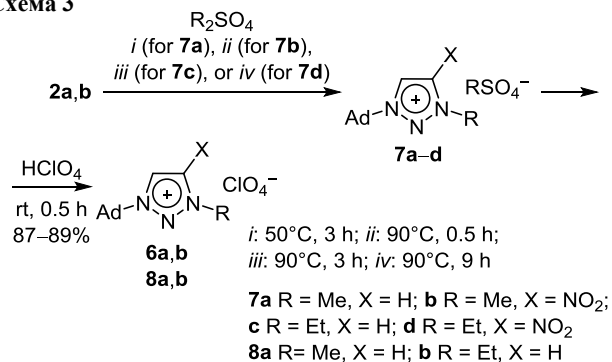
ствии продуктов кватернизации *N*<sup>1</sup>-изомеров **4c,d** – солей 3-(адамантан-1-ил)-1-алкил-4-нитро-1,2,3-триазолия.

Соли 1-(адамантан-1-ил)-2-алкил-4(5)-нитро-1,2,3-триазолия, источниками которых выступают *N*<sup>2</sup>-изомеры **3a–e**, в продуктах кватернизации гетероциклических оснований **3a–e**, **4c,d** и **5a–e** не зафиксированы. Это обусловлено тем, что образование 1,2-дизамещенных катионов 1,2,3-триазолия **1,2-k1** и **1,2-k3** встречает стерические затруднения.

Таким образом, кватернизация *N*-алкил-4(5)-нитро-1,2,3-триазолов **3a–e**, **4c,d** и **5a–e** в системе AdOH–HClO<sub>4</sub> является препаративно удобным одnoreакторным методом региоселективного синтеза солей **6a–e**, исключая выделение в индивидуальном виде *N*<sup>3</sup>-изомеров **5a–e** из смесей *N*-алкил-4(5)-нитро-1,2,3-триазолов.

Структура полученных солей 1-(адамантан-1-ил)-3-алкил-4-нитро-1,2,3-триазолия **6a,b** подтверждена встречным синтезом. На метилирование (этилирование) 1-(адамантан-1-ил)-1*H*-1,2,3-триазолов **2a,b** диалкилсульфатами пространственные факторы, по-видимому, существенного влияния не оказывают, и малообъемные электрофильные частицы легко атакуют атом азота N-3. Процесс отличается региоселективностью и приводит к образованию наиболее термодинамически стабильных алкилсульфатов **7a–d**, которые обменной реакцией были переведены в перхлораты 1-(1-(адамантан-1-ил)-3-

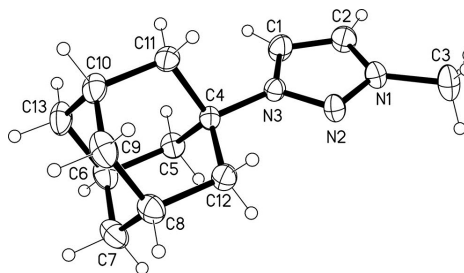
алкил-1,2,3-триазолия **6a,b** и **8a,b** (схема 3). Региоселективность кватернизации 1-(адамантан-1-ил)-1*H*-1,2,3-триазолов **2a,b** согласуется с данными по селективному алкилированию 1-алкил-4-нитро-1*H*-1,2,3-триазолов диалкилсульфатами.<sup>12e</sup>

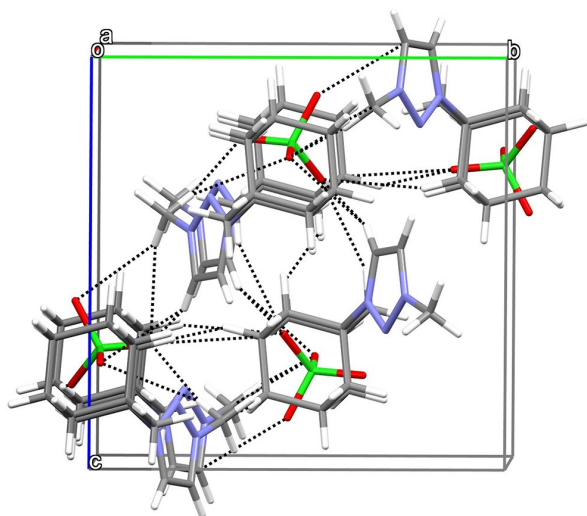
**Схема 3**

Строение солей **6a–e** и **8a,b** подтверждено спектральными данными и элементным анализом. В спектрах ЯМР <sup>1</sup>H солей **6a–e** протону H-5 4-нитро-1,2,3-триазольного цикла отвечают синглеты в области 10.35–10.39 м. д., протоны адамантального заместителя резонируют в области 1.74–1.76 м. д. и при 2.28 м. д. В спектрах ЯМР <sup>13</sup>C солей **6a–e** характеристичными являются два слабополюсных сигнала атомов углерода C-4 и C-5, связанных с атомом водорода и эндоциклической нитрогруппой, при 145.5–145.7 и 128.3–129.3 м. д. соответственно.

Результаты исследования молекулярной и кристаллической структуры соли **8a** методом РСА позволили надежно установить региоселективность атаки диметилсульфата по атому азота N-3 1-замещенных 1*H*-1,2,3-триазолов **2a,b** и доказать, что структура полученных солей 1,2,3-триазолия **8a,b** содержит 1,3-дизамещенный 1,2,3-триазольный цикл (рис. 3).

1,2,3-Триазольный цикл в молекуле соединения **8a** плоский. Среднеквадратичное отклонение атомов от плоскости 1,2,3-триазольного цикла составляет 0.003 Å. Длины связей и валентные углы соответствуют средне-статистическим значениям.<sup>14</sup> Согласно данным РСА, анион ClO<sub>4</sub><sup>–</sup> в кристалле лежит между двумя адамантальными фрагментами соседних молекул соединения **8a** (рис. 4).

**Рисунок 3.** Молекулярная структура соединения **8a** в представлении атомов эллипсоидами тепловых колебаний с 50% вероятностью.

Рисунок 4. Фрагмент кристаллической упаковки соединения **8a**.

Таким образом, показано, что адамантирование 1,2,3-триазолов и 1-алкил-5-нитро-1*H*-1,2,3-триазолов в системах AdOH–HClO<sub>4</sub> и AdOH–H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> представляет собой удобный метод синтеза новых аддуктов двух фармакофорных структур. Адамантирование регио-селективно и протекает с образованием 1-(адамантан-1-ил)-1*H*-1,2,3-триазолов и солей 1-(адамантан-1-ил)-3-алкил-4-нитро-1,2,3-триазолия.

#### Экспериментальная часть

ИК спектры записаны на фурье-спектрометре Simex FT-801 в таблетках KBr. Спектры ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C (400 и 100 МГц соответственно) зарегистрированы на спектрометре Bruker Avance III в DMSO-*d*<sub>6</sub>, внутренний стандарт – остаточные сигналы растворителя (2.50 м. д. для ядер <sup>1</sup>H, 39.5 м. д. для ядер <sup>13</sup>C). Масс-спектры записаны на приборе Thermo Scientific DFS с прямым вводом образца (ионизация ЭУ, 70 эВ). Элементный анализ выполнен на CHNS-анализаторе Thermo Scientific FlashEA 1112. Температуры плавления определены на столике Кюфлера и не исправлены.

Исходные *N*-алкил-4(5)-нитро-1,2,3-триазолы **3a–e**, **4c,d** и **5a–e**<sup>3a,12b,c</sup> и их смеси<sup>12f</sup> (табл. 1) получены по известным методикам.

**Синтез 1-[(3*s*,5*s*,7*s*)-адамантан-1-ил]-1*H*-1,2,3-триазолов **2a,b**** (общая методика). Раствор 25.0 ммоль 1,2,3-триазола **1a,b** и 4.19 г (27.5 ммоль) AdOH в 18 мл 96% H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> перемешивают при комнатной температуре в течение 3 ч. Реакционную смесь выливают в 100 г льда и экстрагируют CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> (3 × 25 мл). Органический экстракт промывают водным раствором Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> и H<sub>2</sub>O до pH 7, сушат над безводным MgSO<sub>4</sub>. Растворитель упаривают при пониженном давлении. Соединение **2b** перекристаллизовывают из EtOH.

**1-[(3*s*,5*s*,7*s*)-Адамантан-1-ил]-1*H*-1,2,3-триазол (**2a**)**<sup>11a</sup> Выход 2.56 г (50%), вязкое желтоватое масло. Спектр ЯМР <sup>1</sup>H, δ, м. д.: 1.75 (6H, уш. с, H Ad); 2.18 (9H, уш. с, H Ad); 7.71 (1H, с, H-4); 8.20 (1H, с, H-5).

**1-[(3*s*,5*s*,7*s*)-1-Адамантан-1-ил]-4-нитро-1*H*-1,2,3-триазол (**2b**)**. Выход 6.02 г (97%), белые кристаллы, т. пл.

162–163 °С. ИК спектр, ν, см<sup>-1</sup>: 3125, 2916, 2861, 1722, 1542 (NO<sub>2</sub>), 1501, 1454, 1441, 1388 (NO<sub>2</sub>), 1359, 1305, 1294, 1281, 1253, 1170, 1127, 1098, 1050, 1037, 1021, 969, 864, 839, 821, 757, 706, 692, 646. Спектр ЯМР <sup>1</sup>H, δ, м. д.: 1.77 (6H, уш. с, H Ad); 2.26 (9H, уш. с, H Ad); 9.29 (1H, с, H-5). Спектр ЯМР <sup>13</sup>C, δ, м. д.: 29.4 (C Ad); 35.6 (C Ad); 42.2 (C Ad); 62.2 (C Ad); 122.5 (C-5); 153.4 (C-4). Масс-спектр, *m/z* (*I*<sub>отн.</sub>, %): 248 [M]<sup>+</sup> (10), 135 [Ad]<sup>+</sup> (100), 93 (10), 79 (11). Найдено, %: C 58.40; H 6.58; N 23.08. C<sub>12</sub>H<sub>16</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>. Вычислено, %: C 58.05; H 6.50; N 22.57.

**Кватернизация смесей *N*-алкил-4(5)-нитро-1,2,3-триазолов **3a–e**, **4c,d** и **5a–e**** (общая методика). Раствор 25.0 ммоль смеси *N*-алкил-4(5)-нитро-1,2,3-триазолов **3a–e**, **4c,d** и **5a–e** и 3.81 г (25.0 ммоль) AdOH в 4 мл 72% HClO<sub>4</sub> перемешивают при комнатной температуре в течение 3 ч, затем разбавляют 5 мл H<sub>2</sub>O. Выпавший осадок отфильтровывают, промывают 2 мл H<sub>2</sub>O и сушат на воздухе. Получают перхлорат 1-[(3*s*,5*s*,7*s*)-адамантан-1-ил]-3-алкил-4-нитро-1,2,3-триазолия **6a–e**. Выходы перхлоратов **6a–e** рассчитывают на долю *N*<sup>3</sup>-изомеров **5a–e** в смесях (табл. 1).

**Перхлорат 1-[(3*s*,5*s*,7*s*)-адамантан-1-ил]-3-метил-4-нитро-1,2,3-триазолия (**6a**)**. Выход 0.77 г (85%), белые кристаллы, т. пл. 261–262 °С (с разл.). ИК спектр, ν, см<sup>-1</sup>: 3024, 2973, 2915, 2849, 1687, 1543 (NO<sub>2</sub>), 1454, 1365, 1343 (NO<sub>2</sub>), 1310, 1264, 1223, 1147, 1118, 1080, 1010, 941, 837, 816, 704, 678, 625. Спектр ЯМР <sup>1</sup>H, δ, м. д.: 1.75 (6H, с, H Ad); 2.28 (9H, с, H Ad); 4.56 (3H, с, NCH<sub>3</sub>); 10.36 (1H, с, H-5). Спектр ЯМР <sup>13</sup>C, δ, м. д.: 29.4, 35.0, 41.3 (C Ad); 53.2 (CH<sub>3</sub>); 68.4 (C Ad); 128.3 (C-5); 145.7 (C-4). Масс-спектр, *m/z* (*I*<sub>отн.</sub>, %): 135 [Ad]<sup>+</sup> (52), 93 (100), 79 (26), 55 (13). Найдено, %: C 43.11; H 5.16; N 15.91. C<sub>13</sub>H<sub>19</sub>ClN<sub>4</sub>O<sub>6</sub>. Вычислено, %: C 43.04; H 5.28; N 15.44.

**Перхлорат 1-[(3*s*,5*s*,7*s*)-адамантан-1-ил]-4-нитро-3-этил-1,2,3-триазолия (**6b**)**. Выход 0.80 г (85%), белые кристаллы, т. пл. 213–214 °С (с разл.). ИК спектр, ν, см<sup>-1</sup>: 3125, 3099, 2914, 2857, 1754, 1582, 1542 (NO<sub>2</sub>), 1455, 1398, 1373, 1340 (NO<sub>2</sub>), 1300, 1273, 1149, 1108, 1013, 985, 935, 850, 816, 747, 701, 625. Спектр ЯМР <sup>1</sup>H, δ, м. д. (*J*, Гц): 1.60 (3H, т, *J* = 7.2, CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>); 1.74 (6H, с, H Ad); 2.28 (9H, с, H Ad); 4.97 (2H, к, *J* = 7.2, CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>); 10.37 (1H, с, H-5). Спектр ЯМР <sup>13</sup>C, δ, м. д.: 15.5 (CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>); 29.4, 35.0, 41.2 (C Ad); 61.7 (CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>); 68.4 (C Ad); 128.3 (C-5); 145.6 (C-4). Масс-спектр, *m/z* (*I*<sub>отн.</sub>, %): 135 [Ad]<sup>+</sup> (44), 93 (100), 79 (17), 55 (16). Найдено, %: C 44.51; H 5.79; N 15.03. C<sub>14</sub>H<sub>21</sub>ClN<sub>4</sub>O<sub>6</sub>. Вычислено, %: C 44.63; H 5.62; N 14.87.

**Перхлорат 1-[(3*s*,5*s*,7*s*)-адамантан-1-ил]-4-нитро-3-(пропан-2-ил)-1,2,3-триазолия (**6c**)**. Выход 1.22 г (83%), белые кристаллы, т. пл. 206–207 °С (с разл.). ИК спектр, ν, см<sup>-1</sup>: 3453, 3123, 3097, 2917, 2856, 2020, 1579, 1538 (NO<sub>2</sub>), 1461, 1401, 1374, 1337 (NO<sub>2</sub>), 1300, 1267, 1244, 1183, 1141, 1084, 1013, 891, 847, 747, 695, 625. Спектр ЯМР <sup>1</sup>H, δ, м. д. (*J*, Гц): 1.65 (6H, д, *J* = 6.6, CH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>); 1.75 (6H, с, H Ad); 2.28 (9H, с, H Ad); 5.64–5.70 (1H, м, CH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>); 10.38 (1H, с, H-5). Спектр ЯМР <sup>13</sup>C, δ, м. д.: 21.9 (CH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>); 29.4, 35.0, 41.2 (C Ad); 60.7 (CH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>);

68.5 (C Ad); 128.4 (C-5); 145.5 (C-4). Масс-спектр,  $m/z$  ( $I_{\text{отн}}$ , %): 135 [Ad]<sup>+</sup> (100), 93 (17), 79 (16). Найдено, %: C 46.09; H 5.88; N 14.09. C<sub>15</sub>H<sub>23</sub>ClN<sub>4</sub>O<sub>6</sub>. Вычислено, %: C 46.10; H 5.93; N 14.34.

**Перхлорат 1-[(3s,5s,7s)-адамantan-1-ил]-3-(бутан-2-ил)-4-нитро-1,2,3-триазолия (6d).** Выход 0.83 г (82%), белые кристаллы, т. пл. 187–188 °С (с разл.). ИК спектр,  $\nu$ , см<sup>-1</sup>: 3410, 2924, 2857, 1633, 1579, 1538 (NO<sub>2</sub>), 1385 (NO<sub>2</sub>), 1267, 1173, 1088, 1013, 847, 746, 714, 624. Спектр ЯМР <sup>1</sup>H,  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 0.93 (3H, т,  $J = 7.4$ , CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>); 1.62 (3H, д,  $J = 6.6$ , CHCH<sub>3</sub>); 1.75 (6H, с, H Ad); 2.28 (9H, с, H Ad); 1.92–2.15 (2H, м, CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>); 5.50–5.55 (1H, м, CHCH<sub>3</sub>); 10.35 (1H, с, H-5). Спектр ЯМР <sup>13</sup>C,  $\delta$ , м. д.: 10.0 (CH<sub>3</sub>); 19.3 (CH<sub>3</sub>); 28.6 (CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>); 29.4, 35.0, 41.2 (C Ad); 65.4 (CHCH<sub>3</sub>); 68.5 (C Ad); 128.6 (C-5); 145.6 (C-4). Масс-спектр,  $m/z$  ( $I_{\text{отн}}$ , %): 135 [Ad]<sup>+</sup> (100), 93 (13), 79 (11). Найдено, %: C 47.48; H 6.21; N 13.35. C<sub>16</sub>H<sub>25</sub>ClN<sub>4</sub>O<sub>6</sub>. Вычислено, %: C 47.47; H 6.22; N 13.84.

**Перхлорат 1-[(3s,5s,7s)-адамantan-1-ил]-4-нитро-3-циклогексил-1,2,3-триазолия (6e).** Выход 0.79 г (73%), белые кристаллы, т. пл. 162–163 °С (с разл.). ИК спектр,  $\nu$ , см<sup>-1</sup>: 3449, 2919, 2854, 1628, 1578, 1538 (NO<sub>2</sub>), 1378 (NO<sub>2</sub>), 1266, 1180, 1087, 1013, 847, 746, 714, 625. Спектр ЯМР <sup>1</sup>H,  $\delta$ , м. д.: 1.76 (6H, с, H Ad); 2.28 (9H, с, H Ad); 1.23–2.46 (10H, м, 5CH<sub>2</sub> циклогексил); 5.29–5.34 (1H, м, CH циклогексил); 10.39 (1H, с, H-5). Спектр ЯМР <sup>13</sup>C,  $\delta$ , м. д.: 23.1, 24.8 (CH<sub>2</sub> циклогексил); 29.4 (C Ad); 32.1 (CH<sub>2</sub> циклогексил); 35.0, 41.2 (C Ad); 66.0 (CH циклогексил); 68.5 (C Ad); 129.3 (C-5); 145.7 (C-4). Масс-спектр,  $m/z$  ( $I_{\text{отн}}$ , %): 135 [Ad]<sup>+</sup> (100), 93 (11). Найдено, %: C 50.28; H 6.30; N 13.02. C<sub>18</sub>H<sub>27</sub>ClN<sub>4</sub>O<sub>6</sub>. Вычислено, %: C 50.18; H 6.32; N 13.00.

**Синтез перхлоратов 1-[(3s,5s,7s)-адамantan-1-ил]-3-алкил-1,2,3-триазолия 6a,b и 8a,b** (общая методика). Смесь 10 ммоль 1,2,3-триазола **2a,b** и 30 ммоль диалкилсульфата при интенсивном перемешивании медленно нагревают и перемешивают при температуре и в течение времени, указанных на схеме 3. Реакционную смесь охлаждают до 30 °С, обрабатывают 3 мл H<sub>2</sub>O. К отделенному водному слою добавляют 7.25 мл (10.5 ммоль) водного раствора NH<sub>4</sub>ClO<sub>4</sub> и перемешивают при комнатной температуре в течение 30 мин. Выпавший продукт отфильтровывают и сушат на воздухе.

**Перхлорат 1-[(3s,5s,7s)-адамantan-1-ил]-3-метил-4-нитро-1,2,3-триазолия (6a).** Выход 3.23 г (89%), белые кристаллы, т. пл. 261–262 °С (с разл.).

**Перхлорат 1-[(3s,5s,7s)-адамantan-1-ил]-4-нитро-3-этил-1,2,3-триазолия (6b).** Выход 3.32 г (88%), белые кристаллы, т. пл. 234–235 °С (с разл.).

**Перхлорат 1-[(3s,5s,7s)-адамantan-1-ил]-3-метил-1,2,3-триазолия (8a).** Выход 2.76 г (87%), белые кристаллы, т. пл. 145–146 °С (с разл.). ИК спектр,  $\nu$ , см<sup>-1</sup>: 3426, 3141, 3024, 2915, 2850, 2681, 2020, 1541, 1454, 1364, 1344, 1309, 1258, 1223, 1207, 1180, 1118, 1078, 1008, 940, 837, 805, 702, 675, 624. Спектр ЯМР <sup>1</sup>H,  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 1.74 (6H, с, H Ad); 2.23 (9H, с, H Ad); 4.30 (3H, с, NCH<sub>3</sub>); 8.89 (1H, с, H-4); 9.06 (1H, с, H-5). Спектр ЯМР <sup>13</sup>C,  $\delta$ , м. д.: 29.3, 35.2 (C Ad); 40.6 (CH<sub>3</sub>); 41.6,

65.4 (C Ad); 128.0 (C-5); 132.1 (C-4). Масс-спектр,  $m/z$  ( $I_{\text{отн}}$ , %): 135 [Ad]<sup>+</sup> (100), 93 (34), 79 (37), 55 (14). Найдено, %: C 49.07; H 6.28; N 13.27. C<sub>13</sub>H<sub>20</sub>ClN<sub>3</sub>O<sub>4</sub>. Вычислено, %: C 49.14; H 6.34; N 13.22.

**Перхлорат 1-[(3s,5s,7s)-адамantan-1-ил]-3-этил-1,2,3-триазолия (8b).** Выход 2.95 г (89%), белые кристаллы, т. пл. 151–152 °С (с разл.). ИК спектр,  $\nu$ , см<sup>-1</sup>: 3452, 3144, 2913, 2852, 2679, 2020, 1639, 1536, 1454, 1385, 1362, 1345, 1307, 1203, 1186, 1109, 1088, 1007, 929, 808, 693, 623. Спектр ЯМР <sup>1</sup>H,  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 1.55 (3H, т,  $J = 7.3$ , CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>); 1.73 (6H, с, H Ad); 2.23 (9H, с, H Ad); 4.65 (2H, к,  $J = 7.4$ , CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>); 8.96 (1H, с, H-4); 9.07 (1H, с, H-5). Спектр ЯМР <sup>13</sup>C,  $\delta$ , м. д.: 14.4 (CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>); 29.3, 35.2, 41.6 (C Ad); 49.3 (CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>); 65.4 (C Ad); 128.1 (C-5); 130.8 (C-4). Масс-спектр,  $m/z$  ( $I_{\text{отн}}$ , %): 135 [Ad]<sup>+</sup> (100), 93 (24), 79 (19). Найдено, %: C 51.09; H 6.72; N 12.04. C<sub>14</sub>H<sub>22</sub>ClN<sub>3</sub>O<sub>4</sub>. Вычислено, %: C 50.68; H 6.68; N 12.66.

**Рентгеноструктурные исследования соединений 2b и 8a** выполнены на дифрактометре Bruker Карра Арех II (MoK $\alpha$ -излучение, графитовый монохроматор,  $\phi$ , $\omega$ -сканирование) при температуре 296(2) К. Поправки на поглощение введены эмпирическим методом. Структуры расшифрованы прямым методом и уточнены полноматричным МНК в анизотропном приближении по программе SHELX-97.<sup>16</sup> Положения атомов водородов рассчитаны геометрически и уточнены по модели "наездник". Кристаллографические данные соединения **2b** (C<sub>12</sub>H<sub>16</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>,  $M$  248.29): размер кристалла 0.10 × 0.20 × 0.60 мм (кристаллы выращены из раствора в EtOH); кристаллы моноклинные; пространственная группа  $P2_1/c$ ;  $a$  11.7056(5),  $b$  10.4107(5),  $c$  10.9783(6) Å;  $\beta$  115.756(2)°;  $V$  1204.94(10) Å<sup>3</sup>;  $Z$  4;  $d_{\text{выч}}$  1.369 г·см<sup>-3</sup>;  $\mu$  0.097 мм<sup>-1</sup>, трансмиссия  $T_{\text{min}}/T_{\text{max}} = 0.9120/0.9802$ . Всего собрано 20577 отражений, из которых 2571 является независимым ( $R$ -фактор усреднения 0.053). В уточнении использовано 2571 независимое отражение, из которых 2019 с  $I > 2\sigma(I)$  (163 параметра в уточнении, использована весовая схема  $\omega = 1/s^2(F\sigma^2) + (0.0626P)^2 + 0.4269P$ , где  $P = (Fo^2 + 2Fc^2)/3$ , отношение максимального(среднего) сдвига к погрешности в последнем цикле 0.00(0.00)). Окончательные значения факторов расходимости  $R_1(F)$  0.0481,  $wR_2(F^2)$  0.1250 по отражениям с  $I > 2\sigma(I)$ ,  $R_1(F)$  0.0637,  $wR_2(F^2)$  0.1369,  $GOF$  1.04 по всем независимым отражениям. Пики максимума и минимума остаточной электронной плотности: 0.20 и -0.23 е/Å<sup>3</sup> соответственно. Полные кристаллографические параметры соединения **2b** депонированы в Кембриджском банке структурных данных (депонент CCDC 956776).

Кристаллографические данные соединения **8a** (C<sub>13</sub>H<sub>20</sub>ClN<sub>3</sub>O<sub>4</sub>,  $M$  317.77): размер кристалла 0.06 × 0.80 × 0.80 мм (кристаллы выращены из раствора в H<sub>2</sub>O); кристаллы моноклинные; пространственная группа  $P2_1/c$ ;  $a$  12.6407(6),  $b$  10.9504(4),  $c$  11.0802(5) Å;  $\beta$  103.065(2)°;  $V$  1494.0(11) Å<sup>3</sup>;  $Z$  4;  $d_{\text{выч}}$  1.413 г·см<sup>-3</sup>;  $\mu$  0.275 мм<sup>-1</sup>, трансмиссия  $T_{\text{min}}/T_{\text{max}} = 0.8056/0.8620$ . Всего собрано 24145 отражений, из которых 2958 являются независимыми ( $R$ -фактор усреднения 0.041).

В уточнении использовано 2958 независимых отражений, из которых 2359 с  $I > 2\sigma(I)$  (191 параметр в уточнении, использована весовая схема  $\omega = 1/s^2(F\sigma^2) + (0.0963P)^2 + 0.7829P$ , где  $P = (F\sigma^2 + 2Fc^2)/3$ , отношение максимального(среднего) сдвига к погрешности в последнем цикле 0.01(0.00)). Окончательные значения факторов расходимости  $R_1(F)$  0.0482,  $wR_2(F^2)$  0.1465 по отражениям с  $I > 2\sigma(I)$ ,  $R_1(F)$  0.0627,  $wR_2(F^2)$  0.1664, GOF 1.06 по всем независимым отражениям. Пики максимума и минимума остаточной электронной плотности:  $-0.38$  и  $0.46$  е/Å<sup>3</sup> соответственно. Кристаллографические параметры соединения **8a** депонированы в Кембриджском банке структурных данных (депонент CCDC 1057154).

Работа выполнена при использовании приборной базы Бийского регионального центра коллективного пользования СО РАН (Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН, Бийск).

Авторы выражают благодарность Химическому сервисному центру коллективного пользования СО РАН за проведение рентгеноструктурного анализа и масс-спектрологии (Новосибирский институт органической химии им. Н. Н. Ворожцова СО РАН, Новосибирск).

#### Список литературы

- (a) Lipeeva, A. V.; Shults, E. E. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2017**, *53*, 1302. [Химия гетероцикл. соединений **2017**, *53*, 1302.] (b) Cunha, A. C.; Figueiredo, J. M.; Tributino, J. L. M.; Miranda, A. L. P.; Castro, H. C.; Zingali, R. B.; Fraga, C. A. M.; de Souza, M. C. B. V.; Ferreira, V. F.; Barreiro, E. J. *Bioorg. Med. Chem.* **2003**, *11*, 2051. (c) Phillips, O. A.; Udo, E. E.; Ali, A. A. M.; Al-Hassawi, N. *Bioorg. Med. Chem.* **2003**, *11*, 35. (d) Cosford, N. D. P.; Tehrani, L. R.; Roppe, J. R.; Smith, N. D.; Prasit, P. WO Patent 2003051315; *Chem. Abstr.* **2003**, *139*, 69268. (e) Kuntala, N.; Telu, J. R.; Banothu, V.; Nallapati, S. B.; Anireddy, J. S.; Pal, S. *Med. Chem. Commun.* **2015**, *6*, 1612.
- (a) Licht, H. H.; Ritter, H. *J. Energ. Mater.* **1994**, *12*, 223. (b) Licht, H. H.; Ritter, H. *Propellants, Explos., Pyrotech.* **1997**, *22*, 333.
- (a) Voitekhovich, S. V.; Gaponik, P. N.; Lyakhov, A. S.; Filipova, J. V.; Sukhanova, A. G.; Sukhanov, G. T.; Ivashkevich, O. A. *Tetrahedron Lett.* **2009**, *50*, 2577. (b) Voitekhovich, S. V.; Filippova, J. V.; Sukhanova, A. G.; Lyakhov, A. S.; Ivashkevich, L. S.; Sukhanov, G. T.; Grigoriev, Y. V. *Inorg. Chem. Commun.* **2012**, *24*, 77.
- (a) Smiglak, M.; Hines, C. C.; Wilson, T. B.; Singh, S.; Vincek, A. S.; Kirichenko, K.; Katritzky, A. R.; Rogers, R. D. *Chem.–Eur. J.* **2010**, *16*, 1572. (b) Drake, G.; Hawkins, T.; Brand, A.; Hall, L.; McKay, M.; Vij, A.; Ismail, I. *Propellants, Explos., Pyrotech.* **2003**, *28*, 174.
- Kizhnyaev, V. N.; Golobokova, T. V.; Pokatilov, F. A.; Vereshchagin, L. I.; Estrin, Ya. I. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2017**, *53*, 682. [Химия гетероцикл. соединений **2017**, *53*, 682.]
- Kim, H.; Lee, S.; Lee, J.; Tae, J. *Org. Lett.* **2010**, *12*, 5342.
- (a) Багрий, Е. И. *Адамантаны: получение, свойства, применение*; Наука: Москва, 1989. (b) Wanka, L.; Iqbal, K.; Schreiner, P. R. *Chem. Rev.* **2013**, *113*, 3516.
- Prachayasittikul, V.; Pingaew, R.; Anuwongcharoen, N.; Worachartcheewan, A.; Nantasenamat, C.; Prachayasittikul, S.; Ruchirawat, S.; Prachayasittikul, V. *SpringerPlus* **2015**, *4*, 1.
- (a) Litvinov, V. P. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2002**, *38*, 9. [Химия гетероцикл. соединений **2002**, *38*, 9.] (b) Shvekhgeimer, M.-G. A. *Russ. Chem. Rev.* **1996**, *65*, 555. [Успехи химии **1996**, *65*, 603.] (c) Senchyk, G. A.; Lysenko, A. B.; Boldog, I.; Rusanov, E. B.; Chernega, A. N.; Krautscheid, H.; Domasevitch, K. V. *Dalton Trans.* **2012**, *41*, 8675.
- Lee, C.-H.; Zhang, Y.; Romayanantakit, A.; Galoppini, E. *Tetrahedron* **2010**, *66*, 3897.
- (a) Sasaki, T.; Eguchi, S.; Yamayuchi, M.; Esaki, T. *J. Org. Chem.* **1981**, *46*, 1800. (b) Rostovtsev, V. V.; Green, L. G.; Fokin, V. V.; Sharpless, K. B. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2002**, *41*, 2596. (c) D'yachenko, V. S.; Danilov, D. V.; Shkineva, T. K.; Vatsadze, I. A.; Burmistrov, V. V.; Butov, G. M. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2019**, *55*, 129. [Химия гетероцикл. соединений **2019**, *55*, 129.] (d) Burmistrov, V. V.; Pitushkin, D. A.; Vasipov, V. V.; D'yachenko, V. S.; Butov, G. M. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2019**, *55*, 619. [Химия гетероцикл. соединений **2019**, *55*, 619.]
- (a) Ivashkevich, O. A.; Matulis, V. E.; Gaponik, P. N.; Sukhanov, G. T.; Filippova, J. V.; Sukhanova, A. G. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2008**, *44*, 1472. [Химия гетероцикл. соединений **2008**, 1816.] (b) Sakovich, G. V.; Sukhanov, G. T.; Filippova, Yu. V.; Sukhanova, A. G.; Bosov, K. K. *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.* **2013**, *62*, 111. [Изв. АН, Сер. хим. **2013**, 111.] (c) Vereshchagin, L. I.; Kuznetsova, N. I.; Kirillova, L. P.; Shcherbakov, V. V.; Sukhanov, G. T.; Gareev, G. A. *Chem. Heterocycl. Compd.* **1986**, *22*, 745. [Химия гетероцикл. соединений **1986**, 932.] (d) Filippova, Yu. V.; Sukhanova, A. G.; Voitekhovich, S. V.; Matulis, V. E.; Sukhanov, G. T.; Grigoriev, Yu. V.; Ivashkevich, O. A. *J. Heterocycl. Chem.* **2012**, *49*, 965. (e) Ivashkevich, O. A.; Matulis, V. E.; Lyakhov, A. S.; Grigorieva, I. N.; Gaponik, P. N.; Sukhanov, G. T.; Filippova, Yu. V.; Sukhanova, A. G. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2009**, *45*, 1218. [Химия гетероцикл. соединений **2009**, 1519.] (f) Sukhanov, G. T.; Sakovich, G. V.; Filippova, Yu. V.; Bagryanskaya, I. Yu.; Sukhanova, A. G. *Mendeleev Commun.* **2014**, *24*, 280. (g) Koren, A. O. *J. Heterocycl. Chem.* **2002**, *39*, 1111.
- Rudakov, E. S.; Volkova, L. K. *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.* **2008**, *57*, 1611. [Изв. АН, Сер. хим. **2008**, 1581.]
- Allen, F. H.; Kennard, O.; Watson, D. G.; Brammer, L.; Orpen, A. G.; Taylor, R. *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2* **1987**, S1.
- Matulis, V. E.; Ivashkevich, O. A.; Gaponik, P. N.; Elkind, P. D.; Sukhanov, G. T.; Bazyleva, A. B.; Zaitsau, D. H. *J. Mol. Struct.: Theochem.* **2008**, *854*, 18.
- Sheldrick, G. M. *Acta Crystallogr., Sect. A: Found. Crystallogr.* **2008**, *A64*, 112.