

УДК 548.737+544.228

**КОНФОРМАЦИИ И МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ КОНТАКТЫ МОЛЕКУЛ
4- И 4,4'-ЗАМЕЩЕННЫХ БИФЕНИЛОВ В КРИСТАЛЛАХ**

© 2009 О.В. Гринева*

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, химический факультет**Статья поступила 21 июня 2008 г.*

На основе информации, содержащейся в Кембриджском банке структурных данных, выполнен анализ конформаций 139 молекул 4- $X-C_6H_4-C_6H_4-4'-Y$ (где $X, Y = H, F, Cl, Br, I, CH_3, OH, COOH, NH_2, NO_2, CN$) и межмолекулярных контактов, образуемых этими молекулами, в 95 гомо- и гетеромолекулярных кристаллах. Как и следовало ожидать, доля плоских и почти плоских молекул (значения угла между плоскостями фенильных фрагментов (φ) находятся в интервале $0-5^\circ$) в рассмотренной группе выше (37 %) по сравнению с бифенилами, содержащими любые заместители в 3,3'-, 4,4'-, 5,5'-положениях (26 %). Обнаружено, что доля почти плоских молекул заметно увеличивается, если $X = OH$ (48 % среди молекул, имеющих хотя бы одну OH-группу), в то время как равенство заместителей ($X = Y$) не приводит к заметному увеличению относительного содержания конформеров с величиной φ в этом диапазоне. Найдено, что в рассмотренной группе кристаллических структур специфические межмолекулярные контакты (водородные связи, контакты $Hal...Hal, Hal...N\equiv C$ и др.) чаще всего приводят к образованию бесконечных молекулярных цепей или их фрагментов (тримеров, димеров). Для структур, в которых есть молекулы, содержащие NH_2 -группу, характерно образование слоистых (2D) и каркасных (3D) H-ассоциатов.

Ключевые слова: конформации нежестких молекул, Кембриджский банк структурных данных, межмолекулярные водородные связи, контакты галоген...галоген.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время, чтобы получить сведения об экспериментальных значениях геометрических параметров молекулы, исследователи, как правило, проводят поиск в одном из основных банков кристаллографических данных: для так называемых "малых" органических и металлоорганических молекул в Кембриджском банке структурных данных, CSD [1], для белков, нуклеиновых кислот и их комплексов в Банке белковых структур, PDB [2]. Однако при использовании этих параметров для сравнения с результатами квантово-механических расчетов задания начальных приближений при моделировании жидкостей и т.п. необходимо иметь в виду следующие обстоятельства. Геометрические параметры молекулы могут существенно различаться не только в кристаллах разного состава, но и в пределах одной кристаллической структуры (контактная конформерия), и в разных полиморфных модификациях одного и того же соединения или комплекса (конформационный полиморфизм). В работе [3] различные конформеры были обнаружены для ~40 % молекул, содержащих хотя бы один подвижный ациклический торсионный угол (анализ был выполнен для молекул, которые имеют разное окружение в гомо- и гетеромолекулярных кристаллах по данным CSD). Кроме того, конформации молекул в кристаллах и других конденсированных фазах могут существенно отличаться от наиболее энергетически выгодных для свободных молекул. Широко известной иллюстрацией такого раз-

* E-mail: ovg@phys.chem.msu.ru

личия является бифенил: согласно экспериментальным данным [4], разница между энергией существующего в газовой фазе конформера (угол между плоскостями бензольных колец $\varphi \sim 45^\circ$) и плоской конформацией ($\varphi = 0^\circ$) составляет ~ 6 кДж/моль, однако в кристаллах при комнатной температуре молекулы находятся в центрах инверсии, т.е. $\varphi = 0$ (при понижении температуры обнаружено два фазовых перехода, причем обе низкотемпературные модификации являются несоразмерными (модулированными) фазами, и среднее значение φ в них составляет $\sim 10^\circ$ [5—7]), а у молекул в расплаве и растворе $\varphi \approx 30^\circ$ [8]. Среди замещенных бифенилов в CSD можно найти примеры молекул с любым возможным, т.е. от 0 до 90° , значением φ .

Экспериментальное и расчетное изучение конформаций бифенила и его производных привлекает внимание исследователей на протяжении многих лет, что связано как с решением интересных теоретических задач, так и с практической значимостью этих молекул (бифенильный фрагмент является частью многих соединений, обладающих биологической активностью, образующих жидкокристаллические фазы и т.д.). Известно множество работ, посвященных изучению одной или нескольких молекул, и ряд публикаций (например, [9—11]), в которых есть сведения о наиболее характерных значениях φ в кристаллах для молекул бифенилов определенного строения (в [9—11] были рассмотрены бифенилы или бифенильные фрагменты с атомами Н в *орто*-положениях, кроме того, в [10] приведено распределение значений φ для 4,4'-бифенилдиола, а в [11] — для фрагментов, у которых в одном из *орто*-положений есть отличный от Н заместитель). Однако в литературе не удалось найти информации о наличии или отсутствии корреляций между природой заместителей, межмолекулярными контактами в кристаллах и предпочтительными значениями φ для замещенных бифенилов, что и стало основанием для проведения настоящего исследования.

ОТБОР СТРУКТУР И МЕТОДИКА ИХ АНАЛИЗА

Очевидно, что несимметричное расположение заместителей относительно оси, вокруг которой может осуществляться поворот фенильных фрагментов, а также стерические затруднения в расположении заместителей (их большой объем и/или близкое соседство) способствуют отклонению конформации от плоской. Поскольку основная цель данной работы состояла в выявлении корреляций между типом заместителей, образованными ими межмолекулярными контактами и конформацией молекулы, остальные факторы, влияющие на конформацию, было необходимо свести к минимуму. Наилучшим образом такому ограничению отвечают бифенилы с небольшими одинаковыми заместителями в 4- и 4'-положениях, однако для сравнения были рассмотрены и молекулы с небольшими разными заместителями в *пара*-положениях и молекулы, содержащие только один небольшой заместитель в *пара*-положении.

Поиск рентгеноструктурных данных для кристаллов, содержащих молекулы $4\text{-X-C}_6\text{H}_4\text{-C}_6\text{H}_4\text{-4'-Y}$, где X и Y = H, Hal (F, Cl, Br, I), CH₃, OH, COOH, NH₂, NO₂, CN, был проведен в CSD (ver. 5.29, 2008) с помощью программы ConQuest [12] (ver. 1.1). Наличие координат для атомов Н не являлось обязательным условием. Помимо молекул с приведенной выше общей формулой в структуре могли присутствовать любые другие нейтральные молекулы и ионы. Оказалось (см. таблицу), что количество структур в каждой группе, т.е. содержащих молекулы с определенным сочетанием указанных заместителей, невелико, поэтому ограничений на величину R-фактора не накладывали. По этой же причине для сопоставления была оставлена часть "неупорядоченных" молекул, имеющих в кристалле две ориентации (отмечены в таблице звездочкой). Из рассмотрения были исключены молекулы, координирующие атомы/ионы металлов, а также расположенные внутри других молекул. В итоге в данной выборке оказалось 139 молекул, входящих в состав 95 гомо- и гетеромолекулярных кристаллов (суммарное число структур по всем группам в таблице больше, поскольку в двух из них есть молекулы 4- или 4,4'-бифенилов с разными заместителями).

При обсуждении результатов были использованы сведения о взаимной ориентации фенильных колец в бифенильных фрагментах и об ориентации нитро-группы относительно фенильного фрагмента в двух дополнительных — более широких — выборках. При формирова-

Статистические данные для молекул 4-X—C₆H₄—C₆H₄—4'-Y в кристаллах

Y	X										
	H	F	Cl	Br	I	CH ₃	OH	COOH	NH ₂	NO ₂	CN
H	27 (22), рис. 2, а	—	—	3 (2)*	—	—	11 (9)	—	—	1 (1)	—
F	—	1 (1) 0°	2 (1)*	2 (1)	—	—	—	—	—	—	1 (1)
Cl	—	38,8°* 41,1°*	2 (1) 38,6° 42,1°	—	—	—	—	—	—	—	—
Br	17,8° 19,3°* 20,2°	38,2° 40,3°	—	2 (1) 38,7° 41,4°	—	—	—	—	—	—	2 (1)
I	—	—	—	—	1 (1) 0°	—	—	—	—	1 (1)	2 (1)*
CH ₃	—	—	—	—	—	2 (1) 35,9° 40,2°	—	—	—	—	—
OH	0÷5° 7 20÷25° 1 25÷30° 3	—	—	—	—	—	34 (25) рис. 2, б	—	1 (1)	4 (4)	4 (1)
COOH	28,6° 32,2° 35,7°	—	—	—	—	—	—	1 (1) 0°	—	—	—
NH ₂	—	—	—	—	—	—	3,1	—	22 (11) рис. 2, в	2 (2)	—
NO ₂	32,7°	—	—	—	34,0°	—	1,7° 2,5° 26,5° 32,3°	—	4,9° 30,2°	5 (3) 30÷35° 1 35÷40° 4	—
CN	—	30,3°	—	42,0° 42,4°	40,8°* 41,6°*	—	31,8° 36,4° 37,0° 38,4°	—	—	—	3 (3) 0° 31,7° 31,8°

Примечание. Количество симметрически независимых молекул (в скобках указано количество веществ) (верхний правый угол таблицы) и угол между плоскостями фенильных колец (нижний левый угол таблицы, пояснения см. в тексте).

нии первой из них критерием поиска было отсутствие заместителей во всех *орто*-положениях бифенильного фрагмента, во вторую были включены фенильные фрагменты с NO₂-группой без соседних с ней заместителей. В этих случаях поиск был проведен среди кристаллов, содержащих только элементы-органогены ("only organics") и не имеющих, согласно CSD, какой-либо неупорядоченности ("not disordered"), соответствующие исследования должны были быть без пометок CSD об ошибках ("no errors"), а полученное в них значение $R \leq 0,075$.

РСА большинства кристаллов, удовлетворяющих критериям поиска основной выборки, выполнен при комнатной температуре, поэтому при наличии в банке для определенной структуры результатов, полученных при нескольких температурах, для анализа были оставлены дан-

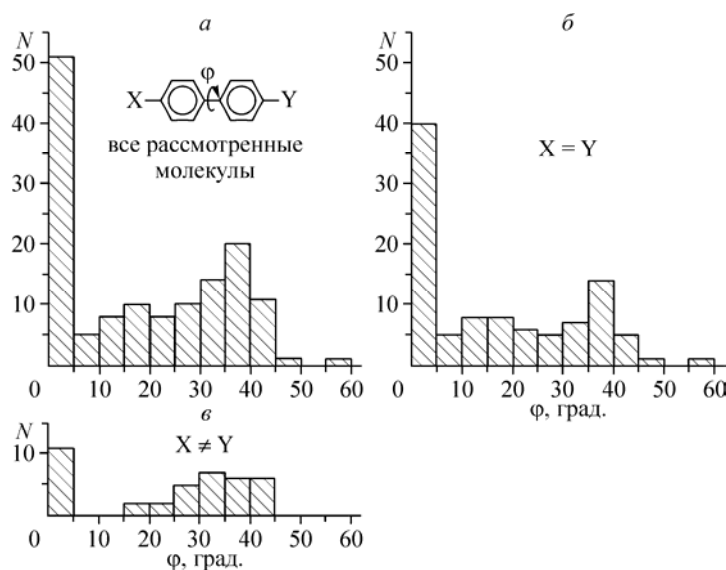


Рис. 1. Распределение значений угла между плоскостями фенильных фрагментов (ϕ) для молекул $4\text{-X-C}_6\text{H}_4\text{-C}_6\text{H}_4\text{-4'-Y}$: а — все рассмотренные в работе молекулы основной выборки; б — $X = Y$; в — $X \neq Y$

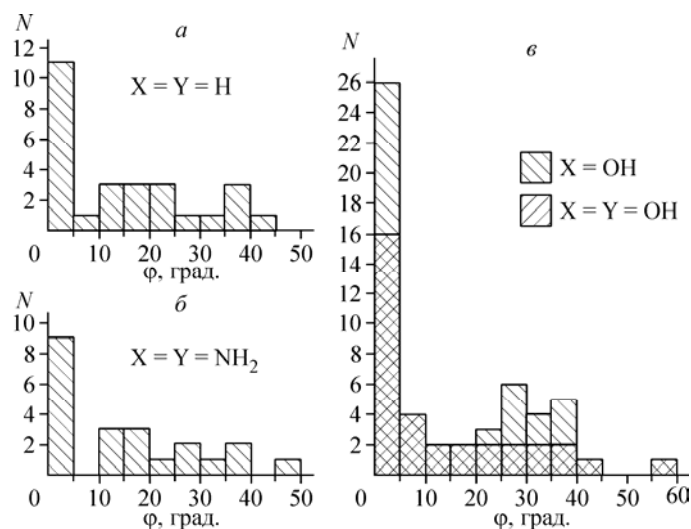


Рис. 2. Распределение значений угла ϕ для молекул $4\text{-X-C}_6\text{H}_4\text{-C}_6\text{H}_4\text{-4'-Y}$: а — $X=Y=H$; б — $X=Y=NH_2$; в — $X=Y=OH$ и $X=OH$, Y — любой из рассмотренных в работе заместителей

ные, соответствующие температуре, наиболее близкой к комнатной, а при примерном равенстве температур исследования — результаты работы, в которой было достигнуто меньшее значение R -фактора. Для дополнительных выборок поиск сразу был ограничен исследованиями, выполненными при комнатной температуре (283—303 К). В итоге в первую дополнительную выборку было включено 418 фрагментов, во вторую — 3328.

Угол ϕ , характеризующий разворот двух фенильных фрагментов, можно определять по-разному. Часто, в том числе в [10, 11], его принимают равным значению одного из торсионных углов $C2(6)-C1-C1'-C2'(6')$, в [9] использовали усредненное по определенной схеме значение четырех возможных углов. В данной работе угол ϕ был задан в программе ConQuest как угол между средними плоскостями, проведенными через 6 атомов углерода каждого фенильного кольца. Согласно результатам работы [9], разница между усредненным значением четырех торсионных углов и значением угла между средними плоскостями не превышает 2° . На рис. 1 представлены общие гистограммы распределения величин ϕ для молекул основной выборки (по всей выборке (а), для молекул с одинаковыми (б) и различными заместителями (в)). Значения углов для групп молекул с определенными заместителями отражены в таблице: для групп, содержащих менее пяти молекул, приведены все найденные величины; для групп с $5 \leq N < 20$ указано число молекул, значение ϕ для которых попадает в определенный диапазон; для групп с $N > 20$ построены гистограммы распределения ϕ (рис. 2).

Для визуализации структур, определения водородных связей и контактов Hal...Hal была использована программа Mercury [12], при этом при поиске водородных связей, образованных NH₂-группой, стандартный критерий (расстояние между атомом-донором и атомом-акцептором H не превышает сумму их ван-дер-ваальсовых радиусов, $R_O = 1,52 \text{ \AA}$, $R_N = 1,55 \text{ \AA}$) был изменен на $R_{X...Y} < R_X + R_Y + 0,4 \text{ \AA}$. Выявление Hal-агрегатов было проведено по предложенной ранее методике [13] (см. следующий раздел).

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Суммарные результаты. Одним из критериев достоверности выводов, сделанных на основе анализа гистограмм распределения, является воспроизведение основных черт этих графиков при разумных вариациях шага и начала отсчета. В [9] приведены гистограммы распределения значений угла поворота фенильных колец для 101 бифенильного фрагмента без *орто*-заместителей с шагом 2, 5 и 9° и с выбором 0° в качестве границы и середины первого столбца. На всех графиках наблюдается резкий максимум при 0° и более широкий максимум при ~37°, однако наличие третьего максимума при ~18° зависит от выбора шага и границ, поэтому авторы предлагают относиться к нему с известной долей скептицизма. В этой выборке [9] в 18 случаях значение угла поворота было в пределах 0—2,6° (следующее 6,9°), что составляет ~18 % от общего числа фрагментов. В [10, 11] распределения были построены с шагом 5° и центром первого столбца в 0°. В [10] было рассмотрено 1026 симметрически независимых молекул, содержащих бифенильный фрагмент без *орто*-заместителей, при этом к области первого максимума (торсионный угол в интервале 1—5°) авторы отнесли 189 молекул (т.е. тоже ~18 %, при этом, согласно приведенному в [10] графику, у ~8 молекул угол равен 0°), а ко второму (значения угла 25—45°) — 651 молекулу (~63 %). В [11] сопоставлены гистограммы для бифенильных фрагментов, найденных в CSD и PDB (число проанализированных фрагментов не указано). Результаты для фрагментов CSD без *орто*-заместителей согласуются с предыдущими работами (резкий максимум при 0° и широкий в области 20—40°), однако у аналогичных фрагментов PDB (число которых на порядок меньше) углы, близкие к 0°, почти отсутствуют, однозначно можно выделить только максимум при ~30°, который при этом более выражен по сравнению с фрагментами CSD. Гистограммы для фрагментов CSD и PDB, содержащих один заместитель в *орто*-положении, очень похожи: отсутствуют углы меньше 25° и наблюдается резкий максимум при ~50° (для фрагментов PDB можно отметить небольшой дополнительный максимум при ~80°, не обсуждаемый в [11]).

Результаты, полученные в данной работе для бифенильных фрагментов, содержащих любые заместители в *мета*- и *пара*-положениях и не содержащих заместителей в *орто*-положениях (первая дополнительная выборка), несколько отличаются от приведенных в [9—11]. Как было указано выше, всего в эту выборку вошло 418 фрагментов, что составляет ~40 % от общего числа соответствующих фрагментов, найденных в CSD (остальные присутствуют в структурах, исследованных не при комнатной температуре или/и с $R > 0,075$ или/и имеющих какую-либо неупорядоченность или ошибки), при этом доля почти плоских молекул оказалась заметно выше, чем в соответствующих выборках [9, 10] — ~26 %.

Как видно из рис. 1, а, для рассмотренных в настоящей работе молекул бифенилов с небольшими заместителями только в 4- или 4- и 4'-положениях максимум в области небольших значений φ становится более выраженным (у ~37 % молекул $\varphi = 0—5^\circ$), максимум при ~37° — более широким, а при рассмотрении отдельно групп с $X = Y$ и $X \neq Y$ (см. рис. 1, б и в) границы этого максимума становятся еще менее резкими. Этот результат хорошо согласуется с интуитивным предположением о том, что вероятность существования почти плоских конформеров уменьшается для молекул, имеющих большие и/или неплоские заместители.

Анализ мотивов, образованных за счет специфических межмолекулярных контактов (водородных связей, контактов Hal...Hal, Hal...N≡C и др.), показывает, что в целом для структур основной выборки характерно существование бесконечных молекулярных цепей (рис. 3) или их

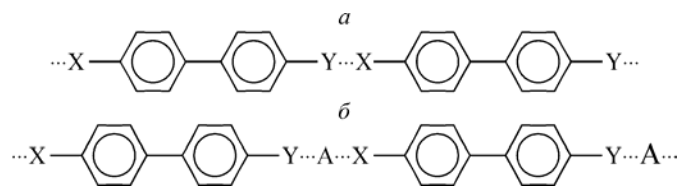


Рис. 3. Схематичное изображение характерных для рассмотренных структур межмолекулярных ассоциатов: *а* — в гомомолекулярных; *б* — в гетеромолекулярных кристаллах

фрагментов (тримеров, димеров), причем в гетеромолекулярных кристаллах контакты возникают между химически разными молекулами (см. рис. 3, *б*). Поскольку, как видно из таблицы, большая часть молекул в данной выборке содержит два одинаковых заместителя или только один заместитель, последний результат согласуется со сделанным ранее в литературе (например, [14]) выводом о предпочтительном образовании гетеросинтонов (т.е. контактов, образованных разными функциональными группами) по сравнению с возможными гомосинтонами.

X = Hal. Рассмотренные в настоящей работе структуры бифенилов, в которых хотя бы один заместитель является галогеном, относятся, в основном, к гомомолекулярным (содержат молекулы одного сорта). Часть этих веществ была проанализирована нами ранее при изучении явления агрегации атомов галогенов (Hal-агрегации) [13, 15]. Выявление Hal-агрегатов, согласно нашей методике [13], состоит в отделении относительно коротких межмолекулярных расстояний Hal...Hal, существующих в данном кристалле (которые будут ребрами графа Hal-агрегата), на основе поиска существенного разрыва Δ в возрастающей последовательности расстояний Hal...Hal (r_i) в области суммы ван-дер-ваальсовых радиусов контактирующих атомов R_X и R_Y ($R_X + R_Y + \delta$). Статистический анализ показал, что для одноименных атомов галогена ребрами графов Hal-агрегатов являются, как правило, расстояния, меньшие, чем $2R + 0,5 \text{ \AA}$ [13]. Иногда даже в веществах, образованных молекулами с малым содержанием атомов галогена, не удается однозначно выявить Hal-агрегаты, т.е. в структуре нет достаточно заметного разрыва в последовательности r_i в окрестности суммы ван-дер-ваальсовых радиусов. Среди рассмотренных в данной работе структур такая ситуация наблюдается для 4,4'-дибромбифенила, DBRBIP (здесь и далее подобное обозначение соответствует коду исследования структуры в CSD).

В настоящей работе контакты с участием атомов галогена, которые можно было бы отнести к специфическим, не обнаружены для 4-бромбифенила в гетеромолекулярном кристалле QUQPUN, что, возможно, связано с неупорядоченным расположением этих молекул, и в кристаллах 4-циано-4'-фторбифенила (TEBBIL) — известно [13], что атомы фтора очень редко образуют F-агрегаты. В гомомолекулярном кристалле 4-бромбифенила, BRBIPN, атомы галогена образуют гофрированные ленты, однако при этом значения φ у двух симметрически независимых молекул в этой структуре (18 и 20°) очень близки к величине φ (19°) в QUQPUN.

Небольшое число структур в этой группе ($X = \text{Hal}$) не позволяет считать описанные ниже корреляции между наблюдаемыми супрамолекулярными мотивами и величиной угла φ статистически обоснованными, тем не менее, интересно отметить, что при $Y \neq \text{H}$ значение φ

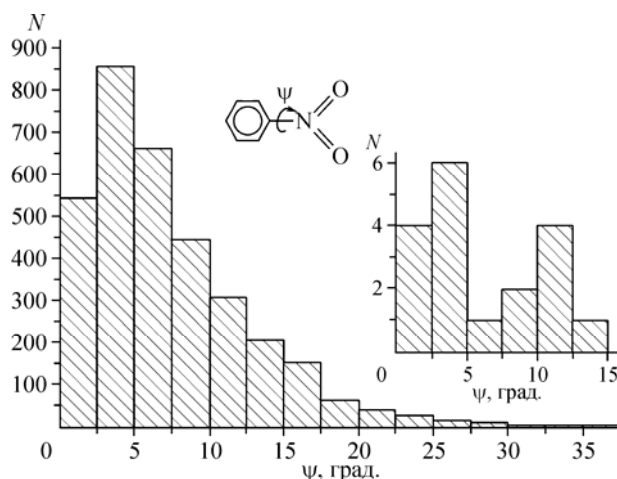
а) находится в диапазоне $38,6—42,4^\circ$ при образовании молекулами двухатомных контактов Hal...Hal (DCLBIQ10, DBRBIP (если принять $\delta = 0$), FAZGES01, XEZHUG) или Hal...N \equiv C (BRCYBP, JIXBEX), объединяющих молекулы в цепи (см. рис. 3, *а*);

б) равно 0° (молекулы находятся в центрах инверсии) при образовании слоистых (2D) Hal-агрегатов (FAYNET, ZZZAOS02), связывающих молекулы в каркас.

При отсутствии контактов с участием атомов Hal (TEBBIL) или контактов с нитро-группой (RAYCID01), приводящих к образованию молекулярных цепей, φ составляет 30 и 34° соответственно.

X = OH. Конформации молекул 4,4'-бифенилдиола ($X = Y = \text{OH}$) в кристаллах были обсуждены в [10]. Общий вид распределения значений φ , полученный в настоящей работе (см. рис. 2, *в*), близок к приведенному в [10], однако необходимо подчеркнуть, что конформацию с $\varphi = 0^\circ$ имеет не одна молекула, как указано в [10], а 14 (все эти молекулы располагаются в центрах инверсии), при этом φ в диапазоне $0—5^\circ$ имеют 16 молекул из 34, т.е. 47 %, что за-

Рис. 4. Распределение значений угла между плоскостями фенильного фрагмента и группой NO_2 (ψ) (условия поиска молекул см. в тексте); на врезке — распределение для молекул $4\text{-X-C}_6\text{H}_4\text{-C}_6\text{H}_4\text{-4'-Y}$, $\text{X} = \text{NO}_2$, Y — любой из рассмотренных в работе заместителей



метно выше, чем для всей выборки. Интересно, что для этой группы в целом ($\text{X} = \text{OH}$, Y — любой заместитель) доля молекул с ϕ в указанном интервале оказалась такой же (48 %), т.е. расположение двух гидроксильных групп в *para*-положениях не увеличивает вероятность плоской конформации.

Гидроксильные группы рассмотренных молекул участвуют в образовании хотя бы одной водородной связи (исключением является NISLOQ, что связано с неупорядоченным расположением других молекул, 1,4-диазабицикло(2.2.2)октана, в этом гетеромолекулярном кристалле), однако характерное для молекул, содержащих гидроксильные группы, образование цепочек кооперативных водородных связей $\text{O-H}\dots\text{O-H}\dots$ наблюдается только в гомомолекулярных кристаллах 4-бифенола (BOPSAA05 и BOPSAA10) и 4,4'-бифенилдиола (DOHDPH02). При отсутствии в кристаллах молекул, содержащих amino-группы, типичный супрамолекулярный мотив в этой группе — бесконечные молекулярные цепи (см. рис. 3, б) или их фрагменты (тримеры, димеры), являющиеся результатом образования гидроксильными группами водородных связей с различными акцепторами протонов.

X = COOH. В структуре 4-бифенилкарбоновой кислоты (BOPSEE10) есть три симметрически независимые молекулы, которые образуют характерные для карбоновых кислот циклические димеры, при этом значения ϕ находятся в диапазоне $29\text{--}36^\circ$. Молекулы 4,4'-бифенилдикарбоновой кислоты располагаются в гетеромолекулярных кристаллах MAZYUI в центрах инверсии (т.е. $\phi = 0^\circ$), однако димеры в этой структуре отсутствуют: водородные связи между гидроксильными группами кислоты и пиридиновыми атомами другой молекулы объединяют молекулы в цепи (см. рис. 3, б).

X = NH₂. Для кристаллов, содержащих молекулы этой группы, характерно наличие слоистых (2D) и каркасных (3D) H-ассоциатов, при этом доля примерно плоских молекул (44 %) выше, чем для всей выборки. Интересно, что, как и в случае OH-группы, симметричное замещение ($\text{X} = \text{Y} = \text{NH}_2$) не приводит к увеличению доли плоских молекул.

X = NO₂. Для молекул нитробифенилов характерны неплоские конформеры с углом ϕ в интервале $26,5\text{--}38,9^\circ$. Поскольку сама NO_2 -группа может быть развернута относительно плоскости фенильного фрагмента, было проведено сравнение значений угла, характеризующего этот поворот (ψ), для рассмотренных в работе нитробифенилов и всех фенильных фрагментов, содержащих NO_2 -группу без соседних с ней заместителей (вторая дополнительная выборка). Как видно из рис. 4, величины ψ для нитробифенилов ($1,3\text{--}12,8^\circ$) относятся к области наиболее часто встречающихся значений этого угла из более общей выборки. Следует отметить, что для молекул с малыми ϕ ($0\text{--}5^\circ$) и углы ψ малы ($2,2\text{--}2,6^\circ$), однако обратной корреляции нет: при небольших ψ значения ϕ могут быть любыми.

X = CN. Как хорошо видно из данных таблицы, для цианобифенилов в еще большей степени, чем для нитробифенилов, характерны неплоские конформации: для 11 из 12 молекул этой группы угол ϕ находится в интервале $30\text{--}42^\circ$ и лишь в одном случае (гетеромолекулярном кристалле QAXHED) он равен 0° , однако к этому значению следует относиться с осторожностью, поскольку в данной структуре очень много слишком коротких расстояний $\text{C}\dots\text{H}$, т.е., возможно, что молекулы или их фрагменты имеют в QAXHED несколько ориентаций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Allen F.H.* // *Acta Crystallogr.*, B. – 2002. – **58**, N 3-1. – P. 380 – 388.
2. *Berman H.M., Battistuz T., Bhat T.N. et al.* // *Acta Crystallogr.*, D. – 2002. – **58**, N 6-1. – P. 899 – 907.
3. *Weng Z.F., Motherwell W.D.S., Allen F.H., Cole J.M.* // *Acta Crystallogr.*, B. – 2008. – **64**, N 3. – P. 348 – 362.
4. *Almenningen A., Bastiansen O., Fernholt L. et al.* // *J. Mol. Struct.* – 1985. – **128**, N 1-3. – P. 59 – 76.
5. *Charbonneau G.P., Delugeard Y.* // *Acta Crystallogr.*, B. – 1977. – **33**, N 5. – P. 1586 – 1588.
6. *Bree A., Edelson M.* // *Chem. Phys. Lett.* – 1978. – **55**, N 2. – P. 319 – 322.
7. *Dzyabchenko A., Scheraga H.A.* // *Acta Crystallogr.*, B. – 2004. – **60**, N 2. – P. 228 – 237.
8. *Eaton V.J., Steele D.* // *J. Chem. Soc. Faraday Trans. II.* – 1973. – **69**. – P. 1601 – 1608.
9. *Brock C.P., Minton R. P.* // *J. Amer. Chem. Soc.* – 1989. – **111**, N 13. – P. 4586 – 4593.
10. *Bis J.A., Vishweshwar P., Middleton R.A., Zaworotko M.J.* // *Cryst. Growth Des.* – 2006. – **6**, N 4. – P. 1048 – 1053.
11. *Brameld K.A., Kuhn B., Reuter D.C., Stahl M.* // *J. Chem. Inf. Model.* – 2008. – **48**, N 1. – P. 1 – 24.
12. *Bruno I.J., Cole J.C., Edgington P.R. et al.* // *Acta Crystallogr.*, B. – 2002. – **58**, N 3-1. – P. 389 – 397.
13. *Гринева О.В., Зоркий П.М.* // *Журн. физ. химии.* – 2000. – **74**, № 11. – С. 1937 – 1943. (*Grineva O.V., Zorkii P.M.* // *Russ. J. Phys. Chem.* – 2000. – **74**, N 11. – P. 1758 – 1764).
14. *Bis A.J., Vishweshwar P., Weyna D., Zaworotko M.J.* // *Mol. Pharm.* – 2007. – **4**, N 3. – P. 401 – 416.
15. *Гринева О.В., Зоркий П.М.* // *Журн. структур. химии.* – 2001. – **42**, № 1. – С. 21 – 30. (*Grineva O.V., Zorkii P.M.* // *J. Struct. Chem.* – 2001. – **42**, N 1. – P. 16 – 23).