СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

УДК 543.270: 543.422

ЛИНЕЙНАЯ СВЯЗЬ МЕЖДУ ИНДЕКСАМИ УДЕРЖИВАНИЯ КОВАЧА *I* И СУММОЙ ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА ЯДЕР ¹³С СТРУКТУРНЫХ ИЗОМЕРОВ ПРЕДЕЛЬНЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ

© 2021 г. А. М. Апаркин^{а,*}, В. А. Пашинин^а

^а Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Российский университет транспорта" ФГАОУ ВО РУТ (МИИТ), 127992, Москва, Россия

> **e-mail:may.50@mail.ru* Поступила в редакцию 19.02.2020 г. После доработки 10.06.2020 г. Принята к публикации 16.06.2020 г.

Определена линейная связь индексов удерживания Ковача *I* и суммы химических сдвигов магнитного резонанса ядер ¹³С структурных изомеров предельных углеводородов. Установлено, что уравнение вида y = ax + b, описывающее установленную связь, для структурных изомеров пентана имеет следующие значения коэффициентов *a*, *b* равные -1.3 и 613.8 соответственно; для структурных изомеров гексана -a, *b* равные -1.8 и 836.2 соответственно; для структурных изомеров гептана -a, *b* равные -3.0 и 1210.1 соответственно. Анализ зависимостей, выполненный на основании теории обобщенных зарядов, подтверждает положение теории об аддитивности зарядов и свидетельствует о значимой роли *p*-электронов в процессе адсорбции. С другой стороны, анализ литературных данных свидетельствует о том, что результаты работы могут быть полезны при дальнейшем развитии теории обобщенных зарядов.

Ключевые слова: индексы удерживания Ковача *I*, теория обобщенных зарядов, химические сдвиги магнитного резонанса ядер ¹³С, межмолекулярные взаимодействия, корреляционная связь, структурные изомеры предельных углеводородов

DOI: 10.31857/S0044453721010027

В настоящее время известно большое количество работ [1–9], направленных на исследование адсорбционных процессов на основании теорий межмолекулярных взаимодействий (ММВ). В работе [1] изложена модель электронного газа и теория обобщенных зарядов для описания межатомных сил и адсорбции. Согласно этой теории обобщенные заряды (O3) – характеристики молекул, которым пропорциональна энергия ММВ. В другой работе [4] предложен метод расчета индексов удерживания для разных структурных изомеров. Отмечено, что предлагаемый метод дает удовлетворительные априорные оценки характеристик удерживания изоалканов. Далее на базе теории обобщенных зарядов разработан способ расчета зарядов предельных и непредельных углеводородов [8]. Теория обобщенных зарядов также позволила получить простое неэмпирическое аналитическое выражение [2], устанавливающее связь энтальпии с индексами удерживания Ковача, а в работе [5] показана роль конформационного состояния молекул неподвижной фазы при контакте с молекулами адсорбата.

Наряду с теоретическими подходами к изучению адсорбции применяют экспериментальные методы. Так в работе [6] адсорбционные характеристики изучают с применением инфракрасной спектроскопии, а в работе [7] экспериментальные исследования проводили объемным методом в широком диапазоне давлений и пришли к выводу о роли размеров молекул, их форме и полярности в кинетических характеристиках процесса адсорбции. В целом можно заключить о важности, актуальности и научной значимости изучения процессов сорбции на основе молекулярных характеристик и теории обобщенных зарядов. Естественно, для получения дополнительной информации необходимо использовать методы, чувствительные к зарядовому распределению в молекулах, например, спектроскопию ядерного магнитного резонанса. Для проведения такого изучения наиболее приемлемыми являются молекулы углеводородов и их структурные изомеры, так как они содержат в своем составе только атомы углерода и водорода. Поэтому объектами исследования в работе были выбраны углеводороды и их структурные изомеры, являющиеся компонентами нефти. Знание физико-химических характеристик углеводородов и их структурных изомеров необходимы при разработке способов утилизации нефтепродуктов с поверхности воды в случае аварийной ситуации [10]. Следовательно, решение вопросов, связанных с проблемами инженерной экологии, в настоящее время является актуальным и практически значимым.

Естественно, в такой ситуации представляет интерес рассмотреть связь адсорбционных характеристик и спектральных на примере таких характеристик, как индексы удерживания Ковача Iи сумма химических сдвигов ЯМР ¹³С для всех атомов углерода молекулы. С другой стороны, анализ литературных данных [1–11] свидетельствует об актуальности исследований связи удерживания Ковача I и суммы химических сдвигов магнитного резонанса ядер ¹³С структурных изомеров предельных углеводородов на основе электронного строения молекул.

Поэтому целью данной работы являлось установление связи между индексами удерживания Ковача *I* и суммой химических сдвигов магнитного резонанса ядер ¹³С атомов углерода молекул структурных изомеров предельных углеводородов на основании теории обобщенных зарядов.

В работах [1, 2] показана связь межмолекулярных взаимодействий и индексов удерживания Ковача *I* для предельных углеводородов. В частности, в работе [2] приведена связь индексов Ковача *I* с константами Генри, которая описывается следующим уравнением:

$$I = 100[n + \ln(K_1/K_n) / \ln(K_{n+1}/K_n)],$$

где $K_1 \le K_n \le K_{n+1}$ — константы Генри; n — индекс *н*-алкана, содержащего n атомов углерода.

Константы Генри, в свою очередь, зависят от обобщенного заряда молекул Q, который является аддитивной величиной, определяемой количеством σ -, π -электронов [3]:

$$Q = (V - \pi_d(2)^{0.5})^{0.25} + (\pi_d(2)^{0.5})^{0.25},$$
(1)

где π_d — половина числа мезомерных электронов, V — электронный объем молекулы.

Из приведенного выше следует, что существует связь индексов удерживания Ковача *I* с характеристиками зарядового строения молекул адсорбата. Безусловно, для уточнения этой связи необходимо использовать аналитический метод, чувствительный к зарядовому распределению в молекулах. Таким методом является спектроскопия ядерного магнитного резонанса ЯМР, в частности, спектроскопия магнитного резонанса ядер ¹³С [12]. Одним из основных параметров спектроскопии ЯМР ¹³С является химический сдвиг

ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ том 95 № 1 2021

ЯМР ¹³С. Химический сдвиг представляет разность констант магнитного экранирования:

$$\delta_{\rm C} = \sigma_{\rm B} - \sigma_{\rm C},$$

где σ_B — константа магнитного экранирования ядра исследуемого вещества, σ_C — константа магнитного экранирования ядер стандарта.

Химические сдвиги ядер ¹³С определяются парамагнитным вкладом $\sigma_{\text{пара}}$. В работах [12, 13] была получена связь парамагнитного вклада $\sigma_{\text{пара}}$ и усредненного радиуса *R* 2*p*-орбитали:

$$\sigma_{\text{mapa}} = -(2/3)(e\hbar/mc)^2 \langle 1/R^3 \rangle (1/\Delta E), \qquad (2)$$

где R — радиус 2*p*-орбитали, ΔE — средняя энергия возбужденных состояний (т.е. использование некоторого электронного перехода в молекуле, который является средним из всех возможных переходов в возбужденные состояния).

Следовательно, состояние электронных оболочек атомов углерода определяет химические сдвиги ядер 13 С, а именно, парамагнитный вклад, отражающий влияние индуктивного эффекта, стерического эффекта, гиперконъюгации, внутри- и межмолекулярных ван-дер-ваальсовских взаимодействий для предельных углеводородов. Другими словами, химические сдвиги ядер 13 С обусловлены электронным экранированием ядер, зависящим от распределения *p*-электронов в атомах углеродов.

Согласно результатам работы [11] основным типом MMB является дисперсионный, характерный для предельных углеводородов при их адсорбции на графитовой термической саже. В работе [14] приводятся количественные оценки вкладов в MMB, которые служат подтверждением, что в изучаемых системах дисперсионные взаимодействия являются основными. В работе [15] отмечается, что в дисперсионых взаимодействиях значительную роль играет поляризуемость, которая определяется пространственным внутримолекулярным распределением зарядов [16, 17].

Так как MMB указанных изомеров с адсорбентом носят дисперсионный характер, то можно полагать, что поляризуемость вносит значительный вклад в эти взаимодействия.

В работах [18, 19] рассмотрено влияние величины поляризуемости на химический сдвиг ЯМР. Анализ результатов этих работ позволил определить функциональную связь между межмолекулярным ван-дер-ваальсовским вкладом в константу экранирования $\sigma_{\text{ммв}}$ и поляризуемостью α , которая описывается следующим уравнением:

$$\sigma_{\rm MMB} = (1/\alpha) (q v_1 \langle m^2 \rangle) / [2(v_1 + v_2)]$$

где $\langle m^2 \rangle$ — средний квадрат осциллирующего дипольного момента свободной молекулы вещества, дб; α — поляризуемость молекул вещества; v_1 — частота поглощения растворителя, Гц; v_2 — частота поглощения растворенного вещества, Гц; *q* — параметр, являющийся отношением дипольного момента и напряженности электрического поля, определяемый по нижеприведенному уравнению:

$$q = [(2n_{\rm c}^2 - 1)/(2n_{\rm c}^2 + 2)](1/R^3),$$

где *n*_c – показатель преломления среды.

В работе [19] показана зависимость химического сдвига для ядер ¹⁹F от напряженности электрического поля, которая функционально связана с поляризуемостью и дипольным моментом. Учитывая близость свойств химического сдвига ядер ¹⁹F и ¹³C, можно полагать, что химический сдвиг ядер ¹³C также зависит от напряженности электрического поля. Более того, в работе [20] отмечается, что между электронной плотностью бсвязей и химическим сдвигом (ХС) ядер ¹³C существует связь, которая носит линейный характер. Следовательно, существование связи между поляризуемостью и химическим сдвигом ЯМР очевидна, так как эти величины являются следствием электронного распределения в молекулах [19].

В работах [8, 9] показана связь *I* с зарядами в молекуле на основании теории обобщенных зарядов молекул для соединений разных классов, которые являются аддитивной величиной, определяемой количеством электронов в молекуле.

Таким образом, проведенный анализ литературных данных позволил сделать вывод о возможности сопоставления поляризуемости, суммы XC ЯМР ¹³С углеродов всей молекулы с индексами удерживания Ковача *I*. Для проведения сравнительного анализа значения индексов *I* были взяты из работ [2–4], а экспериментальные значения химических сдвигов были взяты из ряда источников [12, 13, 21, 22].

Первоначально, были рассмотрены связи поляризуемостей α, индексов удерживания Ковача *I*, сумм химических сдвигов ядер ¹³С $\Sigma\delta_{C}$ для молекул предельных нормальных углеводородов. Расчет поляризуемости α, молекул углеводородов выполнялся по способу, предложенному в суперпозиционно-аддитивном методе [23-25], и по программе "ACD/Labs" [26]. Значения поляризуемостей для предельных нормальных углеводородов от С₄ до С₇, рассчитанные по программе "ACD/Labs" и суперпозиционно-аддитивному методу совпадают в пределах точности расчетов. Причем расчетные значения поляризуемостей совпадают в пределах точности расчетов с экспериментальными данными. На основании полученных значений поляризуемостей были построены график зависимости индексов удерживания Ковача І от поляризумости для предельных нормальных углеводородов и график зависимости



Рис. 1. Зависимость индексов удерживания Ковача *I* от поляризуемости α нормальных предельных углеводородов.

суммы химических сдвигов ядер ¹³С от поляризуемости для тех же углеводородов.

На рис. 1 представлен график зависимости индексов удерживания Ковача I от поляризуемости α для предельных нормальных углеводородов (от C₄ до C₇).

Из приведенных на рис. 1 данных следует, что индексы удерживания Ковача *I* и поляризуемость α связаны линейно и с возрастанием значения α наблюдается увеличение значений индексов удерживания Ковача *I*. Причем связь *I* и α описывается уравнением следующего вида:

$$I = 54.1\alpha - 41.2$$
.

Коэффициент корреляции для данного уравнения равен 0.99.

Известно, что увеличение числа электронов и атомов в молекулах углеводородов ведет к росту значения их поляризуемости и значений индексов удерживания Ковача *I*. Полученные результаты подтверждают эту закономерность. Так, при переходе от бутана к гептану она возрастает с 8.15×10^{-24} см³ до 13.81×10^{-24} см³.

На рис. 2 представлен график зависимости суммы XC ЯМР ¹³С от поляризумости α для нормальных углеводородов (от C₄ до C₇).

Из приведенных на рис. 2 данных следует, что суммы XC ЯМР ¹³С и поляризуемости α связаны линейно и с возрастанием значения α наблюдается увеличение значений суммы XC ЯМР ¹³С ($\Sigma\delta_{C}$). Причем связь $\Sigma\delta_{C}$ и α описывается уравнением следующего вида:

$$\Sigma \delta_{\rm C} = 17.5 \alpha - 74.1.$$

Коэффициент корреляции для данного уравнения равен 0.94.

Линейную связь поляризумостей и суммы XC ЯМР ¹³С можно объяснить тем, что при переходе от одного углеводорода к другому возрастает чис-



Рис. 2. Зависимость суммы химических сдвигов δ_C атомов углерода от поляризуемости α нормальных предельных углеводородов.

ло электронов и атомных ядер углерода, а также меняется резонансная частота ядер углерода, что, в целом, ведет к росту значения их поляризуемости и суммы XC ЯМР ¹³С.

На рис. 3 представлен график зависимости индексов удерживания Ковача I и суммы XC ЯМР ¹³С для нормальных углеводородов (от C₄ до C₇).

Из приведенных на рис. З данных следует, что индексы удерживания Ковача *I* и сумма XC ЯМР ¹³С связаны линейно и с возрастанием значения суммы XC ЯМР ¹³С ($\Sigma\delta_{C}$) наблюдается увеличение индекса удерживания Ковача *I*, причем связь *I* и $\Sigma\delta_{C}$ описывается уравнением следующего вида:

$$I = 2.9\Sigma\delta_{\rm C} + 216.1.$$

Коэффициент корреляции для данного уравнения равен 0.93.

Линейную связь суммы ХС ЯМР ¹³С и индексов удерживания Ковача *I* можно объяснить тем, что при переходе от одного углеводорода к другому возрастает число электронов и атомных ядер углерода в молекуле, а также меняется резонансная частота ядер углерода, что, в целом, ведет к

Таблица 1. Индексы удерживания Ковача (*I*) и суммарные значения XC ЯМР 13 С ($\Sigma\delta_{C}$) бутана и пентана и их структурных изомеров

Изомер	Ι	Σδ _C , м.д.
Бутан		
н-Бутан	400.0	77.40
изо-Бутан	367.3	98.00
	Пентан	
н-Пентан	500.0	84.42
изо-Пентан	475.0	105.55
Диметилпропан	415.5	149.49



Рис. 3. Зависимость индексов удерживания Ковача I от суммы химических сдвигов $\delta_{\rm C}$ атомов углерода нормальных предельных углевородов.

росту значений индексов удерживания Ковача и увеличению суммы XC ЯМР ¹³С.

Таким образом, проведенное сопоставление поляризуемостей, суммы XC ЯМР ¹³С углеродов всей молекулы с индексами удерживания Ковача *I*, позволяет заключить о значительной роли поляризуемости в процессе адсорбции нормальных предельных углеводородов.

Далее было выполнено рассмотрение структурных изомеров предельных углеводородов. Расчет поляризуемости о молекул структурных углеводородов выполнялся по программе "ACD/Labs" [26]. В результате было получено, что значения поляризуемостей для всех структурных изомеров одного углеводорода совпадают в пределах точности расчетов.

Затем были выполнены расчеты суммарного значения XC ЯМР ¹³С структурных изомеров предельных углеводородов. В табл. 1 приведены значения индексов *I*, суммарные значения XC ЯМР ¹³С.

Из приведенных в табл. 1 данных следует, что суммы XC ЯМР ¹³С и индексы удерживания Ковача *I* связаны линейно и с увеличением суммы XC ЯМР ¹³С ($\Sigma\delta_{C}$) наблюдается уменьшение *I* в обоих случаях для бутана и его изомера, а также для пентана и его изомеров. Причем связь ($\Sigma\delta_{C}$) и *I* для пентана и его изомеров описывается линейным уравнением вида:

$$I = -1.3\Sigma\delta_{C} + 613.8.$$

Коэффициент корреляции для данного уравнения равен 0.99.

Следовательно, для структурных изомеров одного углеводорода при увеличении суммы XC ЯМР ¹³С наблюдается уменьшение индексов удерживания Ковача *I*. Необходимо отметить, что возрастание суммы XC ЯМР ¹³С наблюдается в случае увеличения степени разветвленности изомеров, которое ведет к уменьшению индексов



Рис. 4. Зависимость индексов удерживания Ковача I от суммы химических сдвигов δ_C атомов углерода структурных изомеров гексана.

удерживания Ковача *I*, что согласуется с общеизвестными данными газохроматографических экспериментов. Данные, представленные в табл. 1, подтверждают это положение.

Далее было выполнено рассмотрение связи индексов удерживания Ковача *I* и суммы XC ЯМР¹³С для гексана и его структурных изомеров.

На рис. 4 представлен график зависимости индексов удерживания *I* от сумм XC ЯМР ¹³С атомов углерода структурных изомеров гексана.

Из приведенных на рис. 4 данных следует, что *I* и сумма XC ЯМР ¹³С связаны линейно и с возрастанием суммы XC ЯМР ¹³С наблюдается убыль *I* для гексана и его изомеров. Причем связь *I* и $\Sigma\delta_{\rm C}$ для гексана и его изомеров описывается линейным уравнением вида:

$$I = -1.8\Sigma\delta_{\rm C} + 836.2.$$

Коэффициент корреляции для данного уравнения равен 0.93.

Затем было выполнено рассмотрение связи I и суммы XC ЯМР ¹³С для гептана и его структурных изомеров. На рис. 5 представлен график зависимости индекса удерживания I от суммы XC ЯМР ¹³С атомов углерода структурных изомеров гептана.

Из приведенных на рис. 5 данных следует, что *I* и сумма XC ЯМР ¹³С связаны линейно и с возрастанием суммы XC ЯМР ¹³С наблюдается убыль *I* для гептана и его изомеров. Причем связь *I* и суммы XC ЯМР ¹³С ($\Sigma \delta_C$) для гептана и его изомеров описывается линейным уравнением вида:

$$I = -3.0\Sigma\delta_{C} + 1210.1$$

Коэффициент корреляции для данного уравнения равен 0.98.

Таким образом, проведенное сопоставление суммы XC ЯМР ¹³С углеродов всей молекулы с



Рис. 5. Зависимость индексов удерживания Ковача I от суммы химических сдвигов $\delta_{\rm C}$ атомов углерода структурных изомеров гептана.

индексами удерживания Ковача *I*, позволяет сделать вывод о значительной роли электронного распределения в изомерах гептана в процессе адсорбции.

Результаты сравнения I и сумм XC ЯМР ¹³С изомеров бутана, пентана, гексана, гептана позволяют считать, что данный способ может быть применен для расчетов индексов удерживания структурных изомеров углеводородов, содержащих от 4 до 7 углеродных атомов в молекуле.

Согласно литературным данным [13, 14] основной вклад в изменения значений ХС ЯМР ¹³С структурных изомеров углеводородов при переходе от одного изомера к другому вносят изменения электронной плотности. Индексы удерживания Ковача I, в свою очередь, зависят от XC ЯМР ¹³С, что следует из установленных выше зависимостей. Следовательно, значения индексов удерживания Ковача І, определяются структурными изменениями при переходе от одного изомера, т.е. изменениями зарядов на атомах углерода, что согласуется с изменениями обобшенного заряда [3]. Причем сравнительный анализ связи суммы ХС ЯМР ¹³С ($\Sigma\delta_{C}$) и обобщенного заряда *Q* [3, 4] показывает, что между ними существует функциональная связь, которая является линейной:

связь $\Sigma \delta_{\rm C}$ и Q для пентана и его изомеров описывается уравнением следующего вида с коэффициентом корреляции, равным 0.99:

$$\Sigma \delta_{\rm C} = -20.3Q + 183.1,$$

связь $\Sigma \delta_{\rm C}$ и Q для гексана и его изомеров описывается уравнением следующего вида с коэффициентом корреляции, равным 0.81:

$$\Sigma \delta_{\rm C} = -41.1Q + 354.5,$$

связь $\Sigma \delta_{C}$ и Q для гептана и его изомеров описывается уравнением следующего вида с коэффициентом корреляции, равным 0.55:

$$\Sigma \delta_{\rm C} = -63.2Q + 537.5.$$

Таким образом, приведенные выше уравнения показывают о наличии функциональной связи между суммой ХС ЯМР ¹³С ($\Sigma\delta_{C}$) и обобщенным зарядом *Q*. Связь между индексами удерживания Ковача *I* и суммой XC ЯМР ¹³С структурных изомеров определяется зарядовым распределением в молекулах, а, именно, вкладом *р*-электронов атомов углерода, что согласуется с теорией обобщенных зарядов (1) и с теорией химических сдвигов тяжелых ядер (2).

Таким образом, установлена линейная связь индексов удерживания Ковача І и суммы ХС ЯМР ¹³С на примере молекул структурных углеводородов, содержащих от четырех до семи атомов углерода.

Получено экспериментальное доказательство. подтверждающее одно из главных положений теории обобщенных зарядов – аддитивность зарядов для структурных изомеров предельных углеводородов на основе линейной связи между индексами удерживания Ковача I и XC ЯМР ¹³С и между суммой XC ЯМР ¹³С и обобщенным зарядом *O*.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Долгоносов А.М. Модель электронного газа и теория обобщенных зарядов для описания межатомных сил и адсорбции. М.: Книжный дом "ЛИБРО-KOM", 2009. 176 c.
- 2. Долгоносов А.М. // Журн. физ. химии. 1998. Т. 72. № 1. C. 101.
- 3. Долгоносов А.М. // Физикохимия поверхности и защита материалов. 2015. Т. 51. № 6. С. 595.
- 4. Долгоносов А.М. // Журн. физ. химии. 1998. Т. 72. № 7. C. 1298.
- 5. Долгоносов А.М., Прудковский А.Г. // Журн. аналит. химии. 2008. Т. 63. № 9. С. 935.

- 6. Vazhev V.V., Aldabergenov M.K. // Rus. J. of Applied Chem. 2005. V. 78. № 3. P. 453.
- 7. Choi W.K., Kwon T.I., Yeo Y.K. et al. // Korean J. Chem. Eng. 2004. V. 21. Issue 3. P. 712.
- 8. Долгоносов А.М. // Докл. АН. 1998. Т. 358. № 3. Ċ. 355.
- 9. Долгоносов А.М // Журн. физ. химии. 2001. Т. 75. № 1. C. 391.
- 10. Кропотова Н.А. // NovaInfo. 2018. № 78. Р. 1.
- 11. Киселев А.В. Межмолекулярные взаимодействия в адсорбции и хроматографии. М.: Высш. школа, 1986. 360 c.
- 12. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР. М.: Мир, 1984. 478 с.
- 13. Wehrli F.W., Wirthlin T. Interpretation of carbon 13 nmr spectra. L.: Heyden, 1978. 310 p.
- 14. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь. М.: Высш. школа, 1984. 295 с.
- 15. Верешагин А.Н. Поляризуемость молекул. М.: Наука, 1980. 225 с.
- 16. David R. Lide Handbook of Chemistry and Physics. CRC Press.: 2004. 2475 p.
- 17. Минкин В.И. Теория строения молекул (электронные оболочки). М.: Высш. школа, 1979. 407 с.
- 18. Howard B., Linder B., Merle T. // J. Chem. Phys. 1962. V. 36. P. 485.
- 19. Эмсли Д., Финей Д., Сатклиф Л. Спектроскопия ЯМР высокого разрешения. М.: Мир, 1982. 321 с.
- 20. Сергеев Н.М. Спектроскопии ЯМР. М.: МГУ, 1981. 279 c.
- 21. Grant D.M., Paul E.G. // J. Am. Chem. Soc. 1964. V. 86. P. 2984.
- 22. Lindeman L.P., Adams J.Q. // Anal. Chem. 1971. V. 43. № 10. P. 1245.
- 23. Vysotsky Yu.B., Bryantsev V.S. // Intern. J. of Quantum Chemistry. 2004. V. 96 № 2. P. 123.
- 24. Bryantsev V.S., Gorban O.A., Vysotsky Yu.B. Khimiya geterotsiklicheskikh soedinenii issue. 2002. V. 12. P. 1451.
- 25. Vasylyev A.O., Belyaeva Yu.B. Vysotsky Naukovi prati DonNTU. Series: Chemistry and chemical technolog. 2013. V. 20. № 1. P. 44.
- 26. ACD/Labs [http://www.acdlabs.com].