

К 90-ЛЕТИЮ ХИМИЧЕСКОГО  
ФАКУЛЬТЕТА МГУ

УДК 536.654 : 544.163.2

ПРЕДСКАЗАНИЕ ЭНТАЛЬПИЙ СУБЛИМАЦИИ ЦИКЛИЧЕСКИХ  
ПРОИЗВОДНЫХ МОЧЕВИНЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДЕЛИ  
МОЛЕКУЛЯРНОГО ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

© 2019 г. О. Н. Рыжова<sup>a\*</sup>, О. В. Дорофеева<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия

\* e-mail: ron@phys.chem.msu.ru

Поступила в редакцию 15.03.2019 г.

После доработки 15.03.2019 г.

Принята к публикации 09.04.2019 г.

Для оценки величин энтальпий сублимации циклических производных мочевины предложено уравнение, рассматривающее корреляцию между энтальпией сублимации и рассчитанными величинами плотности кристалла, молекулярной поверхности и четырьмя параметрами, характеризующими распределение электростатического потенциала на поверхности молекулы.

*Ключевые слова:* энтальпия сублимации, электростатический потенциал, производные мочевины

DOI: 10.1134/S0044453719100248

В настоящее время энтальпия образования ( $\Delta_f H_{298}^\circ$ ) газообразных органических соединений может быть предсказана с высокой точностью с использованием квантово-химических расчетов, и это позволяет оценить энтальпию образования кристаллического соединения из известного соотношения

$$\Delta_{\text{sub}} H_{298}^\circ = \Delta_f H_{298}^\circ(\text{газ}) - \Delta_f H_{298}^\circ(\text{крист}), \quad (1)$$

если известна его энтальпия сублимации ( $\Delta_{\text{sub}} H_{298}^\circ$ ). К основным методам оценки энтальпии сублимации относятся методы, связывающие энтальпию сублимации со структурой молекулы. Наиболее точными из них являются неэмпирические методы расчета. Однако из-за большой требовательности к компьютерным ресурсам такие расчеты только сейчас начинают появляться в литературе [1]. Для оценки энтальпии сублимации широко используются эмпирические аддитивные методы, в которых групповые вклады определяются на основе экспериментальных значений энтальпии сублимации. Аддитивные схемы хорошо зарекомендовали себя и могут давать точные оценки, если для определения групповых вкладов используются надежные экспериментальные данные. Несколько моделей, основанных на принципе групповой аддитивности, были предложены в последние годы [2–5]. Главным препятствием на пути дальнейшего успешного развития этих методов является недостаток экспериментальных данных, из-за чего значения многих групповых вкладов не могут быть определены.

Наибольшее распространение для предсказания энтальпии сублимации получили методы

QSPR (“Quantitative Structure – Property Relationship”, или “количественное соотношение структура–свойство”) [6]. QSPR-моделирование заключается в поиске корреляции между свойством органического соединения и его структурой, которая характеризуется дескрипторами. В качестве дескриптора может выступать любое число, которое можно рассчитать, исходя из структурной формулы. В литературе можно найти более десятка работ, в которых подход QSPR был применен для оценки энтальпии сублимации [7–12]. В этих работах использовались наборы экспериментальных данных, содержащие от 30 до 1800 значений энтальпии сублимации, а QSPR-уравнение содержало от 3 до 18 дескрипторов; среднее квадратичное отклонение для различных моделей составляло от 5 до 20 кДж моль<sup>-1</sup>, а максимальное расхождение достигало 10–75 кДж моль<sup>-1</sup>.

Особое место среди QSPR-моделей занимают модели, использующие в качестве дескрипторов параметры электростатического потенциала на поверхности молекулы. В работах Политцера и соавторов [13–15] было показано, что различные макроскопические свойства, зависящие от молекулярных взаимодействий, могут быть предсказаны на основе их корреляции с параметрами электростатического потенциала. В частности, для энтальпии сублимации было предложено уравнение [14]

$$\Delta_{\text{sub}} H_{298}^\circ = a(A_S)^2 + b\sqrt{\sigma_{\text{tot}}^2} + c, \quad (2)$$

где  $A_S$  – размер поверхности молекулы,  $\sigma_{\text{tot}}^2$  – величина, характеризующая изменчивость потен-

циала на поверхности молекулы,  $\nu$  – степень баланса между положительными и отрицательными областями. Коэффициенты  $a$ ,  $b$  и  $c$  определяются минимизацией отклонений между рассчитанными и экспериментальными энтальпиями сублимации. Волновая функция, необходимая для расчета электростатического потенциала, получается путем квантово-химического расчета, а для определения параметров потенциала существуют специальные программы. Берд и Райс [16] параметризовали уравнение (2) для 23 энергетических соединений, и это уравнение до сих пор часто используется для оценки энтальпий сублимации различных энергетических соединений [17, 18], причем даже в тех случаях, когда исследуемые классы соединений не присутствовали среди соединений, которые рассматривались при параметризации модели. Также известны попытки использовать модель электростатического поля для конкретных классов соединений [19], что приводит к заметному повышению точности предсказаний.

Анализ опубликованных в литературе моделей для оценки энтальпий сублимации показывает, что при их разработке не уделяется достаточного внимания достоверности экспериментальных величин, используемых для параметризации модели, тогда как от этого в первую очередь зависит ее предсказательная точность. Поэтому при исследовании энергетических соединений с высоким содержанием азота [20] при параметризации модифицированного уравнения (2) мы использовали только те соединения, экспериментальные значения энтальпии сублимации которых были подтверждены квантово-химическими расчетами. Однако и в этом случае не удалось достичь высокой точности оцененных величин (среднее квадратичное отклонение составляло  $8.7 \text{ кДж моль}^{-1}$ , а максимальное отклонение достигало  $23 \text{ кДж моль}^{-1}$ ).

Поскольку в работе [20] рассмотрено 185 молекул, относящихся к различным классам соединений, мы предположили, что точность модели можно повысить за счет включения в уравнение (2) дополнительных дескрипторов. Было предложено новое уравнение [21, 22]

$$\Delta_{\text{sub}} H_{298}^{\circ} = a\rho + bA_S + c\bar{V}_S + d(\sigma_{\text{tot}}^2 \nu) + e\Pi + f, \quad (3)$$

в котором по сравнению с уравнением (2) рассматривалась плотность кристалла ( $\rho$ ), а также два новых параметра электростатического потенциала:  $\bar{V}_S$  – среднее значение потенциала на поверхности молекулы и  $\Pi$  – среднее отклонение потенциала на поверхности (индикатор полярности). При попытке применить это уравнение к большому массиву данных, содержащему около 400 молекул различного строения, достичь высокой точности не удалось, однако это уравнение показало хорошие результаты при его параметризации для двух узких классов соединений – ада-

мантанов [21] и алифатических производных мочевины [22]. В настоящей работе мы представляем результаты использования уравнения (3) для оценки энтальпий сублимации циклических производных мочевины, родоначальные структуры которых показаны на рис. 1.

## МЕТОДЫ РАСЧЕТА

Для определения коэффициентов  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $d$ ,  $e$  и  $f$  в уравнении (3) были отобраны 23 соединения, экспериментальные значения энтальпий сублимации которых были предварительно подтверждены квантово-химическими расчетами. Энтальпии образования 44 соединений в газовой фазе были рассчитаны методом Gaussian-4 (G4) [23] с использованием программного комплекса Gaussian 16 [24]. Для 23 из этих соединений (табл. 1) расхождение между рассчитанным значением  $\Delta_f H_{298}^{\circ}$  (газ) и экспериментальным, определенным из соотношения (1), не превышало  $5 \text{ кДж моль}^{-1}$ , и на этом основании экспериментальные данные были признаны надежными. Для остального 21 соединения (табл. 2) это расхождение превышало  $5 \text{ кДж моль}^{-1}$  или отсутствовали данные по  $\Delta_f H_{298}^{\circ}$  (крист) и поэтому нельзя было определить значение  $\Delta_f H_{298}^{\circ}$  (газ) из эксперимента.

Волновая функция, необходимая для определения электронной плотности и расчета электростатического потенциала, была получена методом DFT/V3LYP/6-311++G(3df,2p). Все дескрипторы из уравнения (3) рассчитывались с помощью программы Multiwfn [61]. В результате минимизации среднего квадратичного отклонения между рассчитанными и экспериментальными значениями энтальпии сублимации 23 соединений были определены  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $d$ ,  $e$  и  $f$  в уравнении (3).

## ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Уравнение (3) ранее использовалось для оценки энтальпий сублимации алифатических производных мочевины [22] и, как видно из табл. 3, привело к хорошему согласию рассчитанных и экспериментальных значений. Однако это уравнение, примененное без перепараметризации к, казалось бы, родственному классу циклических производных мочевины, привело к увеличению среднего квадратичного отклонения с  $2.3 \text{ кДж моль}^{-1}$  до  $13.6 \text{ кДж моль}^{-1}$ . Значительно лучший результат был достигнут, когда коэффициенты в уравнении (3) были получены на основе экспериментальных данных для циклических производных мочевины (табл. 3). Из 23 соединений только для шести (соединения **8**, **10**, **13**, **16**, **19** и **21** в табл. 1) расхождения между рассчитанной и экспериментальной энтальпией сублимации превышает  $5 \text{ кДж моль}^{-1}$ . Наибольшее расхождение наблю-

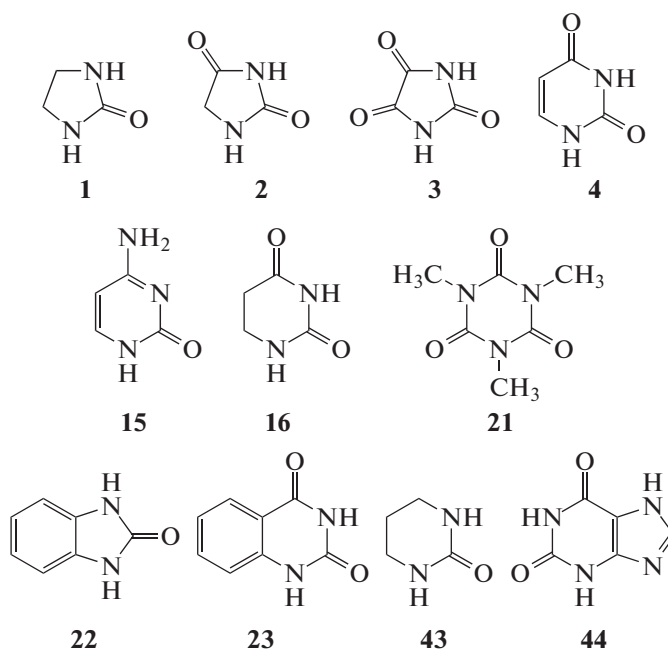


Рис. 1. Родоначальные структуры циклических производных мочевины, рассмотренных в настоящей работе (номера под структурами отвечают номерам соединений в табл. 1 и табл. 2).

дается для 1,3-диметилаурацила (**8**), для которого экспериментальная величина подтверждена тремя исследованиями. Возможно, это расхождение связано с тем, что по сравнению с другими метилзамещенными урацила у 1,3-диметилаурацила обнаружено существование не полностью кристаллизованной фазы при фазовых переходах “кристалл-кристалл” [62]. В таком случае теоретические методы могут давать завышенные оценки, как это наблюдалось в случае 1-аминоадамантиана [21], который при комнатной температуре образует фазу, только на 50% являющуюся кристаллической. Что касается расхождений для **10**, **13**, **16**, **19** и **21**, их не следует считать значимыми, поскольку они могут быть обусловлены небольшой точностью экспериментальных данных.

В табл. 2 показаны результаты использования уравнения (3) для другого 21 циклического производного мочевины, которое не использовалось в параметризации модели из-за недостаточной уверенности в надежности их экспериментальных данных. Для восьми соединений (**25**, **27**, **29**, **31**, **32**, **36**, **39** и **42**) уравнение (3) хорошо воспроизводит экспериментальные данные. Относительно небольшие расхождения, не превышающие 6 кДж моль<sup>-1</sup>, наблюдаются для соединений **24**, **26**, **30** и **33**, экспериментальные данные которых несколько противоречивы. Для группы соединений (**28**, **34**, **35**, **37**, **38**, **40** и **41**) рассчитанные значения  $\Delta_{\text{sub}}H_{298}^{\circ}$  отличаются от экспериментальных на 8–20 кДж моль<sup>-1</sup>, и эти расхождения, скорее всего, связаны с неточностью экспериментальных измерений. Рассчитанные в настоящей работе зна-

чения  $\Delta_{\text{f}}H_{298}^{\circ}$  (газ) отличаются от экспериментальных на 14–20 кДж моль<sup>-1</sup> для **34**, **35**, **37**, **40** и **41**, что значительно превышает неточность метода G4, а потому указывает на неточность экспериментальных данных для этих соединений.

Особое внимание следует обратить на соединения **43** и **44** с самыми большими расхождениями между экспериментальными и рассчитанными энтальпиями сублимации. Расхождение в 43.7 кДж моль<sup>-1</sup>, полученное для ксантина (**44**), объясняется тем, что это соединение в кристалле присутствует в виде цвиттер-ионного таутомера, и в этом случае неправильно рассматривать неполярную структуру **44**, отвечающую газообразному состоянию. По этой же причине модель электростатического потенциала дает по сравнению с экспериментом заниженные на 50–60 кДж моль<sup>-1</sup> значения энтальпий сублимации аминокислот, которые являются самыми известными цвиттер-ионными соединениями. Столь же большое занижение значений  $\Delta_{\text{sub}}H_{298}^{\circ}$  аминокислот дают методы групповых вкладов [2, 3]. Для пропиленмочевины (**43**) наблюдается хорошее согласие с экспериментальной величиной [26], однако нет основания сомневаться в точности экспериментальных данных [25], поскольку величина  $\Delta_{\text{sub}}H_{298}^{\circ}$  (газ), определенная из соотношения (1) с использованием экспериментальных значений  $\Delta_{\text{f}}H_{298}^{\circ}$  (крист) и  $\Delta_{\text{sub}}H_{298}^{\circ}$  из [25], хорошо согласуется со значением, рассчитанным в настоящей работе методом G4. Причину столь большого расхождения, возможно, прояснят новые структурные и термохимические исследования пропиленмочевины.

**Таблица 1.** Энтальпии сублимации (в кДж моль<sup>-1</sup>) циклических производных мочевины, отобранных для определения коэффициентов *a*, *b*, *c*, *d*, *e* и *f* в уравнении (3)

№	Соединение	Эксперимент	Расчет	Δ*
1	Этиленмочевина	96.6 ± 0.8 [25] 83.7 ± 1.9 [26]	92.8	3.8
2	Гидантоин	116.3 ± 0.7 [27] 114.2 ± 1.0 [28]	118.2	-1.9
3	Парабановая кислота	119.4 ± 0.6 [29]	122.1	-2.7
4	Урацил	131.4 ± 0.4 [30]	129.0	2.4
5	5,6-Дигидроурацил	115.4 ± 1.0 [31]	117.5	-2.1
6	5-Метилурацил (тимин)	127.2 ± 0.3 [30] 134.1 ± 4.2 [32]	125.1	2.1
7	6-Метилурацил	131 ± 7.0 [32]	132.3	-1.3
8	1,3-Диметилурацил	96.9 ± 1.2 [33] 96.8 [34] 96.4 ± 1.4 [35]	107.4	-10.5
9	5,6-Диметилурацил	132.4 ± 1.4 [36]	128.9	3.5
10	1,3,5-Триметилурацил	94.9 ± 0.6 [36] 103.5 ± 1.5 (326 K) [37]	100.6	-5.7
11	1,3,5,6-Тетраметилурацил	101.7 ± 0.9 [36]	103.8	-2.1
12	6-Амино-1-метилурацил	158.2 ± 4.4 [38]	156.4	1.8
13	6-Азаурацил	120.7 ± 1.7 [39] 118.1 ± 2.0 [39]	115.3	5.4
14	6-Азатимин	109.1 ± 2.3 [39]	109.7	-0.6
15	Цитозин	156.4 ± 2.0 [40]	153.7	2.7
16	Барбитуровая кислота	115.1 ± 0.7 [41] 120.3 ± 1.2 [41, 42]	121.0	-5.9
17	1,3-Диметилбарбитуровая кислота	92.3 ± 0.6 [43]	96.7	-4.4
18	5,5'-Диметилбарбитуровая кислота	115.8 ± 0.5 [44]	112.3	3.5
19	1,5,5-Триметилбарбитуровая кислота	106.2 ± 0.4 [45]	100.5	5.7
20	1,3-Диэтилбарбитуровая кислота	99.5 ± 0.6 [46]	98.4	1.1
21	Триметил изоцианурат	88.2 ± 1.2 [47]	81.0	7.2
22	2-Бензимидазолинон	126.4 ± 2.4 [48]	128.6	-2.2
23	Бензоиленмочевина	128.3 ± 2.2 [49]	128.1	0.2

\* Разность между экспериментальной и рассчитанной величинами.

Суммируя результаты, полученные в настоящей и предыдущих [21, 22] работах, можно сделать вывод, что при рассмотрении классов структурно близких соединений модель электростатического потенциала может давать хорошую точность предсказаний энтальпий сублимации, приближенную к точности экспериментальных измерений. Предложенное нами уравнение (3) дает для трех изученных классов соединений (адамантаны, алифатические и циклические производные мочевины) средние квадратичные отклонения 3.7, 2.3 и 4.2 кДж моль<sup>-1</sup> соответственно, что намного лучше, чем для часто используемого уравнения (2). Из рассмотренных в настоящей работе 44 циклических производных мочевины, уравнение (3) воспроизводит экспериментальные значения энтальпии сублимации в пределах 6 кДж моль<sup>-1</sup> для 32 соединений. Этот достаточно неплохой результат обусловлен также

и выполненным с помощью квантово-химических расчетов анализом точности экспериментальных данных, который позволил исключить из параметризации модели ненадежные величины энтальпий сублимации. Выполненные расчеты энтальпий образования газообразных соединений позволяют предположить неточность в экспериментальных данных, по меньшей мере, пяти соединений (34, 35, 37, 40 и 41).

Особую трудность при разработке и применении методов оценки энтальпии сублимации представляют полиморфизм, твердофазные превращения, образование пластических и жидких кристаллов, которые мало предсказуемы и создают значительные трудности при разработке успешного метода оценки энтальпии сублимации [63]. Твердые соединения, которые образуют пластические и жидкие кристаллы или не являются полностью кристаллическими, а также существу-

**Таблица 2.** Энтальпии сублимации (в кДж моль<sup>-1</sup>) циклических производных мочевины, рассчитанных по уравнению (3)

№	Соединение	Эксперимент	Расчет	Δ*
24	1-Метилурацил	121.7 ± 4.0 (386 K) [50]	117.5	4.2
		112.5 ± 2.6 (398 K) [51]		-5.0
25	3-Метилурацил	118.8 ± 3.0 (382 K) [50]	120.8	-2.0
26	5,6-Дигидро-5-метилурацил	124 ± 0.7 [52]	117.7	6.3
27	5,6-Дигидро-6-метилурацил	118.8 ± 0.8 [52]	116.3	2.5
28	1-Метилтимин	124.4 ± 1.3 (398 K) [51]	109.7	14.7
29	1,3,6-Триметилурацил	106.7 ± 2.5 (320 K) [51]	107.8	-1.1
30	1,3-Диметил-5-этилурацил	98.7 ± 1.7 (316 K) [37]	104.2	-5.5
		99.3 ± 0.2 (308 K) [53]		-4.9
		110 ± 1.2 (330 K) [53]		5.8
31	1,3-Диметил-5-пропилурацил	111 ± 1.6 (322 K) [37]	107.8	3.2
32	1,3-Диметил-5-изопропилурацил	102.9 ± 1.6 (322 K) [37]	103.5	-0.6
33	1,3-Диэтилтимин	89.8 ± 0.4 [54]	100.8	-11.0
		95.0 ± 2.1 [51]		-5.8
34	5-Аминоурацил	138.1 [55]	128.0	10.0
35	6-Аминоурацил	150.4 [55]	171.1	-20.7
36	6-Амино-1,3-диметилурацил	148.7 [55]	146.7	2.0
37	5-Нитроурацил	161.4 ± 3.5 [32]	145.0	16.4
38	1-Метилцитозин	141.2 ± 0.6 (471 K) [56]	129.3	11.9
		149.1 ± 9.0 [57]		19.8
39	1,3,5-Триметилбарбитуровая кислота	96.1 ± 0.8 [45]	94.2	1.9
40	5-Изопропилбарбитуровая кислота	123.6 ± 0.6 [58]	115.7	7.9
41	5,5-Диэтилбарбитуровая кислота	117.3 ± 0.6 [59]	107.6	9.7
42	Тетраметилбарбитуровая кислота	87.7 ± 0.5 [45]	87.1	0.6
43	Пропиленмочевина	113.4 ± 0.7 [25]	85.6	27.8
		89.3 ± 2.5 [26]		3.7
44	Ксантин	175.5 ± 1.3 [60]	131.8	43.7

\* Разность между экспериментальной и рассчитанной величинами.

**Таблица 3.** Точность предсказания энтальпий сублимации производных мочевины

Параметр	Алифатические производные мочевины [22]	Циклические производные мочевины	
		Коэффициенты <i>a, b, c, d, e</i> и <i>f</i> для алифатических соединений [22]	Коэффициенты <i>a, b, c, d, e</i> и <i>f</i> для циклических соединений
Количество соединений	13	23	23
Среднее квадратичное отклонение, кДж моль <sup>-1</sup>	2.3	13.6	4.2
Максимальное отклонение, кДж моль <sup>-1</sup>	4.7	20.4	7.2
Минимальное отклонение, кДж моль <sup>-1</sup>	-3.0	-25.3	-10.5

ющие в виде цвиттер-ионов, не должны рассматриваться как при разработке, так и применении методов, предсказывающих энтальпии сублимации. К сожалению, из опубликованных результатов не всегда можно понять природу фазовых переходов, а также является ли исследуемое вещество полностью кристаллическим.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта № 17-03-00449).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Yang J., Hu W., Usvyat D., Matthews D., Schütz M., Chan G.K. // Science. 2014. V. 345. P. 640.
2. Gharagheizi F., Sattari M., Tirandazi B. // Ind. Eng. Chem. Res. 2011. V. 50. P. 2482.
3. Mathieu D. // Ind. Eng. Chem. Res. 2012. V. 51. P. 2814.
4. Keshavarz M.H., Bashavard B., Goshadro A. et al. // Therm. Anal. Calorim. 2015. V. 120. P. 1941.
5. Naef R., Acree W.E. Jr. // Molecules. 2017. V. 22. P. 1059.

6. Roy K., Kar S., Das R.N. A Primer on QSAR/QSPR Modeling. Fundamental Concepts. Springer, 2015.
7. Ouvrard C., Mitchell J.B.O. // Acta Cryst. 2003. V. B59. P. 676.
8. Жохова Н.И., Баскин И.И., Палюлин В.А. и др. // Журн. прикл. химии. 2003. Т. 76. С. 1966.
9. Gharagheizi F. // Thermochim. Acta. 2008. V. 469. P. 8.
10. Perlovich G.L., Raevsky O.A. // Cryst. Growth Des. 2010. V. 10. P. 2707.
11. Bagheria M., Bagheria M., Gandomi A.H., Golbraikh A. // Thermochim. Acta. 2012. V. 543. P. 96.
12. Salahinejad M., Le T.C., Winkler D.A. // J. Chem. Inf. Model. 2013. V. 53. P. 223.
13. Politzer P., Murray J.S. // Theor. Chem. Acc. 2002. V. 108. P. 134.
14. Politzer P., Murray J.S., Grice M.E. et al. // Mol. Phys. 1997. V. 91. P. 923.
15. Murray J.S., Politzer P. // WIREs Comput. Mol. Sci. 2011. V. 1. P. 153.
16. Byrd E.F.C., Rice B.M. // J. Phys. Chem. A. 2006. V. 110. P. 1005.
17. Singh H.J., Upadhyay M.K., Sengupta S.K. // J. Mol. Model. 2014. V. 20. P. 2205.
18. Tan B., Li Z., Guo X. et al. // Ibid. 2017. V. 23. P. 10.
19. Jaidann M., Roy S., Abou-Rachid H., Lussier L.-S. // J. Hazard. Mater. 2010. V. 176. P. 165.
20. Suntsova M.A., Dorofeeva O.V. // J. Mol. Graph. Model. 2017. V. 72. P. 220.
21. Dorofeeva O.V., Filimonova M.A. // Chem. Phys. Lett. 2018. V. 711. P. 231.
22. Dorofeeva O.V., Suchkova T.A. // J. Chem. Thermodyn. 2019. V. 131. P. 254.
23. Curtiss L.A., Redfern P.C., Raghavachari K. // J. Chem. Phys. 2007. V. 126. P. 084108.
24. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 16, Revision B.01, Gaussian, Inc., Wallingford, CT, USA, 2016.
25. Ribeiro da Silva M.D.M.C., Ribeiro da Silva M.A.V., Freitas V.L.S. et al. // J. Chem. Thermodyn. 2008. V. 40. P. 386.
26. Farias R.F., Oliveira O.A., Medeiros J.V., Airoidi C. // Thermochim. Acta. 1999. V. 328. P. 241.
27. Silva A.L.R., Cimas Á., Vale N. et al. // J. Chem. Thermodyn. 2013. V. 58. P. 158.
28. Ramos F., Ledo J.M., Flores H. et al. // Thermochim. Acta. 2017. V. 655. P. 181.
29. Ribeiro da Silva M.D.M.C., Ribeiro da Silva M.A.V., Freitas V.L.S. et al. // J. Chem. Thermodyn. 2008. V. 40. P. 1378.
30. Emel'yanenko V.N., Verevkin S.P., Notario R. // Ibid. 2015. V. 87. P. 129.
31. Galvão T.L.P., Rocha I.M., Ribeiro da Silva M.D.M.C., Ribeiro da Silva M.A.V. // J. Phys. Chem. A. 2013. V. 117. P. 5826.
32. Ribeiro da Silva M.A.V., Amaral L.M.P.F., Szterner P. // J. Chem. Thermodyn. 2011. V. 43. P. 1924.
33. Imamura A., Takahashi K., Murata S., Sakiyama M. // Ibid. 1989. V. 21. P. 237.
34. Brunetti B., Irrera S., Portalone G. // J. Chem. Eng. Data. 2015. V. 60. P. 74.
35. Murata S., Sakiyama M., Seki S. // Thermochim. Acta. 1985. V. 88. P. 121.
36. Notario R., Emel'yanenko V.N., Roux M.V. et al. // J. Phys. Chem. A. 2013. V. 117. P. 244.
37. Kaminski M., Zielonkiewicz W. // J. Chem. Thermodyn. 1996. V. 28. P. 153.
38. Ribeiro da Silva M.A.V., Amaral L.M.P.F., Szterner P. // Ibid. 2011. V. 43. P. 1763.
39. Amaral L.M.P.F., Szterner P., Morais V.M.F. et al. // Ibid. 2016. V. 96. P. 93.
40. Emel'yanenko V.N., Zaitsau D.H., Shoifet E. et al. // J. Phys. Chem. A. 2015. V. 119. P. 9680.
41. Roux M.V., Temprado M., Notario R. et al. // J. Phys. Chem. A. 2008. V. 112. P. 7455.
42. Солдатова Т.В., Кабо Г.Я., Козыро А.А., Френкель М.Л. // Журн. физ. химии. 1990. Т. 64. С. 336.
43. Roux M.V., Notario R., Foces-Foces C. et al. // J. Phys. Chem. A. 2011. V. 115. P. 3167.
44. Roux M.V., Notario R., Foces-Foces C. et al. // Ibid. 2010. V. 114. P. 3583.
45. Notario R., Roux M.V., Ros F. et al. // J. Chem. Thermodyn. 2014. V. 74. P. 144.
46. Notario R., Roux M.V., Ros F. et al. // Ibid. 2014. V. 77. P. 151.
47. Imamura A., Murata S., Sakiyama M. // Ibid. 1988. V. 20. P. 389.
48. Morais V.M.F., Miranda M.S., Matos M.A.R., Liebman J.F. // Mol. Phys. 2006. V. 104. P. 325.
49. Miranda M.S., Matos M.A.R., Morais V.M.F., Liebman J.F. // J. Chem. Eng. Data. 2011. V. 56. P. 4516.
50. Brunetti B., Piacente V., Portalone G. // J. Chem. Eng. Data. 2000. V. 45. P. 242.
51. Teplitsky A.B., Yanson I.K., Glukhova O.T. et al. // Biophys. Chem. 1980. V. 11. P. 17.
52. Amaral L.M.P.F., Szterner P., Ribeiro da Silva M.A.V. // J. Chem. Thermodyn. 2013. V. 64. P. 187.
53. Colomina V., Jimenez P., Turrión C. et al. // Thermochim. Acta. 1983. V. 68. P. 371.
54. Sabbah R., Komorowski S.J. // Ibid. 1980. V. 41. P. 379.
55. Zielonkiewicz W., Szterner P., Kaminski M. // J. Chem. Eng. Data. 2003. V. 48. P. 1132.
56. Zielonkiewicz A., Wszelaka-Rylik M., Poznański J., Zielonkiewicz W. // J. Solution Chem. 1998. V. 27. P. 235.
57. Burkinshaw P.M., Mortimer C.T. // J. Chem. Soc., Dalton Trans. 1984. P. 75.
58. Szterner P., Galvão T.L.P., Amaral L.M.P.F. et al. // Thermochim. Acta. 2016. V. 625. P. 36.
59. Ribeiro da Silva M.D.M.C., Ribeiro da Silva M.A.V., Freitas V.L.S., Roux M.V. et al. // J. Chem. Thermodyn. 2009. V. 41. P. 1400.
60. Emel'yanenko V.N., Zaitsau D.H., Verevkin S.P. // J. Chem. Eng. Data. 2017. V. 62. P. 2606.
61. Lu T., Chen F. // J. Comp. Chem. 2012. V. 33. P. 580.
62. Sakiyama M., Imamura A. // Thermochim. Acta. 1989. V. 142. P. 365.
63. Acree, W., Jr., Chickos J.S. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2017. V. 46. P. 013104.