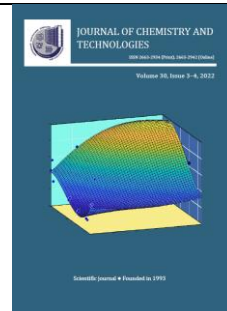




Journal of Chemistry and Technologies

pISSN 2663-2934 (Print), ISSN 2663-2942 (Online).

journal homepage: <http://chemistry.dnu.dp.ua>



UDC 678:543.42+544.183.25

NMR SPECTRAL PARAMETERS OF THE SYSTEMS BASED ON AROMATIC POLYAMIDES: THE QUANTUM-CHEMICAL INTERPRETATION FOR THE SOLVATION EFFECTS OF MEDIUM

Andrey V. Tokar*, Olga P. Chigvintseva

Dnipro State Agrarian and Economic University, S. Yefremova St., 25, Dnipro, 49009, Ukraine

Received 13 August 2022; accepted 8 October 2022; available online 31 October 2022

Abstract

Using the *ab initio* methods of quantum chemistry a detailed theoretical investigation for the basic parameters of proton magnetic resonance spectra has been carried out using the example of *N*-phenylbenzamide, which plays the role of a prototype for a monomeric chain of aromatic polyamides, in particular phenylon. Within the scope of this work, some features for the solvation effects of medium, which occur under the action of averaged influence of dimethylacetamide and dimethyl sulfoxide molecules, are considered without details of the structure for the first solvation shell of dimerized form of model compound. The obtained results are closely to the high affinity of the selected structural fragments of macromolecules in relation to the solvation effects of medium only in the case of using the polarizable continuum method. At the same time, the solvation energy is at least 52.5 kJ/mol, while the Onsager model shows a much smaller stabilizing effect, which does not exceed 4.5 kJ/mol. The results of calculations for the spectral characteristics of model system *in vacuo* as well as taking into account the effects of medium one, within the chosen level of theory are in good agreement with the data of this type obtained earlier and may be of fundamental importance from the point of view of the preliminary assessment for the affinity of individual sections of macromolecules in relation to the solvation effect of dipolar aprotic solvents.

Keywords: *ab initio* calculations; NMR-spectrum; solvation energy; polarizable continuum method; Onsager solvation model.

ЯМР СПЕКТРАЛЬНІ ПАРАМЕТРИ СИСТЕМ НА ОСНОВІ АРОМАТИЧНИХ ПОЛІАМІДІВ: КВАНТОВО-ХІМІЧНА ІНТЕРПРЕТАЦІЯ СОЛЬВАТАЦІЙНИХ ЕФЕКТІВ СЕРЕДОВИЩА

Андрій В. Токар*, Ольга П. Чигвінцева

Дніпровський державний аграрно-економічний університет, вул. С. Єфремова, 25, Дніпро, 49009, Україна

Анотація

За допомогою *ab initio* методів квантової хімії здійснено детальне теоретичне дослідження базових параметрів спектрів протонного магнітного резонансу на прикладі *N*-фенілбензаміду, що відіграє роль прототипу мономерної ланки ароматичних поліамідів, зокрема фенілону. У межах роботи розглянуто особливості сольватаційних ефектів середовища, що виникають за умов усередненого впливу молекул диметилацетаміду та диметилсульфоксиду без деталізації специфіки будови першої сольватної оболонки димеризованої форми модельної сполуки. Одержані результати свідчать про високу спорідненість обраних структурних фрагментів макромолекул по відношенню до сольватуючих ефектів середовища лише у випадку застосування методу поляризованого континууму. При цьому енергія сольватації становить не менше 52.5 кДж/моль, тоді як модель Онзагера демонструє значно менший стабілізуючий вплив, що не перевищує 4.5 кДж/моль. Результати розрахунків спектральних характеристик модельної системи в газовій фазі та з урахуванням ефектів середовища у межах обраного розрахункового наближення добре узгоджуються з даними такого типу, одержаними раніше, та можуть мати принципове значення з точки зору попереднього оцінювання спорідненості окремих ділянок макромолекул по відношенню до сольватуючого впливу диполарних апротонних розчинників.

Ключові слова: *ab initio* розрахунки; ЯМР-спектр; енергія сольватації; метод поляризованого континууму; сольватаційна модель Онзагера.

*Corresponding author: e-mail address: atokar_2004@ukr.net

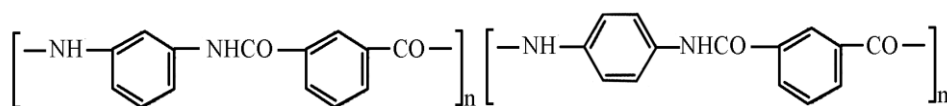
© 2022 Oles Honchar Dnipro National University;

doi: 10.15421/jchemtech.v30i3.262860

Вступ

Спектроскопія ядерного магнітного резонансу відкриває широкі можливості для якісної ідентифікації та дослідження будови полімерних матеріалів за характеристичними сигналами у спектрах ЯМР, а саме їх положенням, інтенсивністю та мультиплетністю, а також особливостями спін-спінових взаємодій, що дозволяють визначати склад окремих макромолекул [1]. ЯМР широких ліній застосовують для вивчення структури полімерів, зокрема ступеня їх кристалічності, а також різних типів молекулярних рухів, що відповідають процесам фазових переходів, склування тощо. До очевидних переваг спектроскопії ЯМР слід віднести простоту спектрів, а також можливість здійснення абсолютних кількісних визначень без калібрування за теоретичними моделями [2]. Однак суттєвим обмеженням методу залишається умова достатньої розчинності полімерів з концентрацією у розчинах не менше 3–5 мас. %.

Особливу зацікавленість являють численні спроби теоретичного обґрунтування параметрів спектрів ядерного магнітного резонансу з точки зору надійних квантово-хімічних методів, що призначені для розрахунку тензорів екранування та магнітної сприйнятливості молекулярних систем у газовій фазі та різноманітних розчинниках [3–6]. При цьому від калібрувальної залежності зазвичай позбавляються за рахунок введення залежних від поля наборів базисних функцій. Метод розрахунку спектрів ЯМР з використанням такого підходу називають GIAO (Gauge-Independent Atomic Orbital) [7–10]. Таким чином, метою даної роботи є детальне теоретичне дослідження спектрів ядерного магнітного резонансу *N*-фенілбензаміду (бензаніліду) як прототипу мономерної ланки арамідів, зокрема фенілолу (схема 1), для прогнозування базових спектральних характеристик у газовій фазі та середовищі дипольярних апротонних розчинників за допомогою *ab initio* методів квантової хімії.



Scheme 1. The typical structure of phenylon
Схема 1. Типова структура фенілолу

Методологія обчислень

Квантово-хімічні розрахунки здійснювали за допомогою програмного пакету Gaussian 03, Revision E.01 із подальшою візуалізацією результатів у GaussView 3.0 [11; 12]. Структуру молекул оптимізували у наближенні трипараметричного гібридного функціоналу B3LYP та неемпірично узагальненого градієнтного наближення PBE1PBE із ідентичним набором базисних функцій 6-311++G(d,p). При цьому всі стаціонарні точки на поверхні потенційної енергії були охарактеризовані як першого роду та відповідали енергетичним мінімумам за умов відсутності уявних частот коливання. Сольватаційні ефекти середовища оцінювали за допомогою методу поляризуючого континууму C-PCM [13] та моделі Онзагера. Параметри спектрів ЯМР ^1H розраховували за методикою GIAO. Статистичну обробку даних здійснювали за допомогою програмного пакету ORIGIN Professional 6.0.

Результати та їх обговорення

На початкових етапах дослідження значної уваги було приділено попередньому визначенню базових сигналів у спектрі ЯМР ^1H модельної сполуки *N*-фенілбензаміду за допомогою можливостей програмного пакету ChemNMR Pro з оцінкою хімічних зсувів та віднесенням сигналів окремих структурних фрагментів, що містять у своєму складі екрановані атоми Гідрогену різних типів, зокрема протони бензенових кілець та місткової амідної групи. Одержані результати наведено на рис. 1.

Розташування сигналів у спектрі цілком узгоджується із загальноприйнятими уявленнями про локалізацію ароматичних фрагментів в області 7–8 м.д. з відносною інтенсивністю чотирьох сигналів, що відповідають *орто*- та *мета*-положенням Гідрогенів, яка є вдвічі більшою за інтенсивність інших спектральних ліній, що відповідають нееквівалентним *пара*-положенням бензенових кілець та протону амідної групи із розташуванням останнього у найбільш слабкому полі.

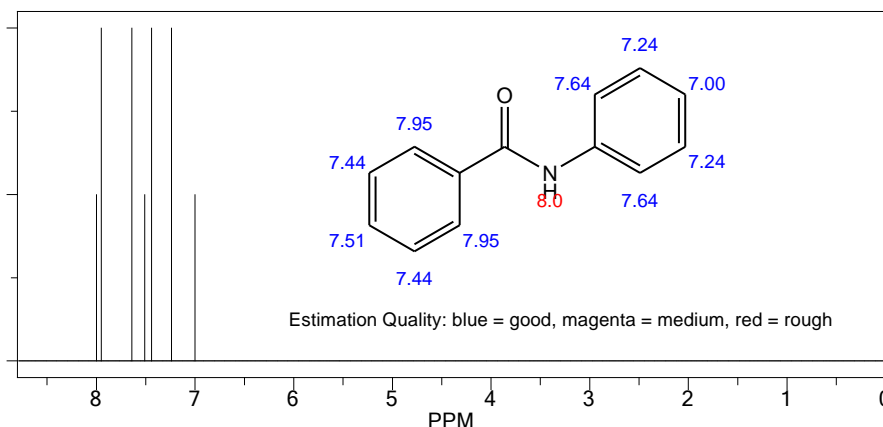


Fig. 1. The characteristic signals in Proton NMR spectrum of *N*-phenylbenzamide
Рис. 1. Характеристичні сигнали у ПМР-спектрі *N*-фенілбензаміду

Слід зазначити, що така інтерпретація є доволі спрощеною з тієї точки зору, що зовсім не враховує особливостей тонкого розщеплення сигналів ароматичних фрагментів, які в експериментальних спектрах ЯМР зазвичай представлені в якості нероздільних мультиплетів в області 7.2–7.9 м.д. [14; 15].

Як уже зазначалося раніше, дослідження спектральних властивостей будь-якої молекулярної системи з точки зору методу ядерного магнітного резонансу неодмінно спряжене з проблемою добору розчинника та визначення його характеристичного впливу, зокрема за рахунок ефектів специфічної чи неспецифічної сольватації. У першому випадку зазвичай доводиться мати справу з утворенням стійких комплексів із водневим зв'язком, що виникають між молекулами розчинника та полімеру, й можуть сприяти значному перерозподілу електронної густини з її суттєвим відхиленням від стану тієї ж системи у твердій фазі. З іншого боку,

застосування диполярних апротонних розчинників з відносно високими значеннями діелектричної проникності іноді може мати вирішальне значення вже на стадії формування макромолекул у розчинах, наприклад за умов періодичної поліконденсації ароматичних діамінів та дихлорангідридів карбонових кислот у амідних розчинниках з утворенням відповідних фенілонів в якості кінцевих продуктів реакції [16].

В межах даної роботи нами було досліджено особливості сольватаційних ефектів середовища, що виникають за умов усередненого впливу молекул диметилацетаміду ($\epsilon = 37.8$) та диметилсульфоксиду ($\epsilon = 46.7$) без деталізації особливостей будови першої сольватної оболонки на прикладі димеризованої форми *N*-фенілбензаміду [17], представленої на рис. 2.

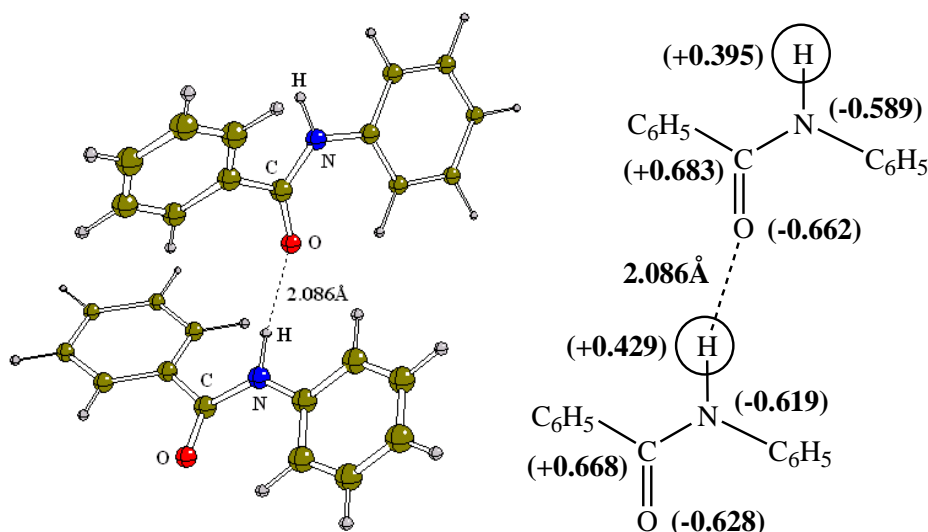


Fig. 2. The structure of molecular complex with typical hydrogen bond
Рис. 2. Структура молекулярного комплексу з типовим водневим зв'язком

Попередній розрахунок молекулярного об'єму цієї системи у наближенні ВЗЛР/6-311++G(d,p) дозволив у подальшому оцінити енергію сольватації, наприклад у межах теоретичної моделі Онзагера. Одержані результати свідчать про низьку спорідненість обраних структурних фрагментів макромолекул до сольватуєчих ефектів середовища, оскільки їх загальний внесок не перевищував ~4.5 кДж/моль. При переході до опису розчинника у вигляді поляризуєчого континууму в наближенні CPCM-ВЗЛР/6-311++G(d,p)//ВЗЛР/6-311++G(d,p), навпаки, спостерігалось помітне зростання енергії сольватації, яка становила ~52.5 кДж/моль та свідчила про більш адекватне відтворення особливостей міжмолекулярних взаємодій у цьому випадку. Слід зауважити, що з метою збільшення іонної сили реакційного середовища до розчинів іноді додають солі літію, зокрема LiBF₄, LiClO₄, LiNO₃, LiSO₃CF₃ або LiN(SO₂CF₃)₂ [18], що знаходять широке практичне застосування в умовах виготовлення термостійких плівок, волокон та лаків на основі ароматичних поліамідів [16].

Продовженням нашого дослідження стало детальне вивчення базових спектральних характеристик обраної модельної системи за допомогою неемпірично узагальненого градієнтного наближення PBE1PBE/6-311++G(d,p). При цьому в якості внутрішнього стандарту було обрано традиційні сполуки, а саме тетраметилсилан та гексаметилдисилоксан, що містять цілком еквівалентні з точки зору магнітного екранування протони. Аналіз одержаних за методом GIAO [19; 20] тензорів магнітного екранування ядер ¹H цих сполук показав їх майже абсолютне співпадіння, що було покладене в основу подальшого визначення положення окремих сигналів в спектрах *N*-фенілбензаміду (таблиця). Розрахунки здійснювали як для газової фази, так й за умов впливу середовища, зокрема диметилсульфоксиду, який поряд із розчинниками амідного типу, такими як диметилформамід, *N*-метилпіролідон та тетраметилсечовина, виявився найкращим за своєю розчинювальною та/або сольватуєчою здатністю [21].

The chemical shifts δ [ppm] in NMR ¹H spectra of *N*-phenylbenzamide

Table

Таблиця

Хімічні зсуви δ [м.д.] у ЯМР ¹ H спектрах <i>N</i> -фенілбензаміду							
PBE1PBE/ 6-311++G(d,p)		ChemNMR Pro	Inter-pretation	PBE1PBE/ 6-311++G(d,p)		ChemNMR Pro	Inter- pretation
<i>in vacuo</i>	DMSO			<i>in vacuo</i>	DMSO		
6.89	7.56	7.64	1-NC(=O)	8.66	8.68	7.95	1-C(=O)N
7.49	7.92	7.24	1-NC(=O)	7.87	8.21	7.44	1-C(=O)N
7.27	7.63	7.00	1-NC(=O)	7.72	8.16	7.51	1-C(=O)N
7.70	7.98	7.24	1-NC(=O)	7.62	8.07	7.44	1-C(=O)N
9.55	9.41	7.64	1-NC(=O)	7.81	8.36	7.95	1-C(=O)N
7.42	8.28	8.00	sec. amide	-	-	-	-

Наведені вище набори хімічних зсувів, одержані для газової фази та середовища диметилсульфоксиду у наближенні CPCM-PBE1PBE/6-311++G(d,p)//PBE1PBE/6-311++G(d,p), задовільно корелюють між

собою, що вказує на адекватне відтворення спектральних характеристик модельної сполуки *N*-фенілбензаміду в межах обраного розрахункового наближення:

$$\delta(\text{DMSO}) = (2.92 \pm 0.54) + (0.68 \pm 0.07) \cdot \delta(\text{in vacuo}); r = 0.956; S_0 = 0.16; n = 11, \quad (1)$$

$$\delta(\text{in vacuo}) = (1.35 \pm 0.14) \cdot \delta(\text{DMSO}) - (3.27 \pm 1.13); r = 0.956; S_0 = 0.22; n = 11. \quad (2)$$

Найбільшу зацікавленість викликає також безпосереднє співставлення результатів квантово-хімічних розрахунків із параметрами спектрів, одержаних експериментальним шляхом, а саме ¹H ЯМР (400 МГц, d₆-DMSO) [22]: δ [ppm] = 10.26 (s, 1H), 8.04–7.88 (m, 2H), 7.79 (m, 2H), 7.65–7.47 (m, 3H), 7.41–7.28 (m, 2H), 7.19–7.02 (m, 1H). Порівняльний аналіз

характеристичних сигналів за їх положенням, інтенсивністю та мультиплетністю свідчить, перш за все, про несуттєве розходження абсолютних значень хімічних зсувів, окрім випадку протону амідної групи, переважно за рахунок додаткового впливу ефектів зв'язування. Як свідчать результати проведених раніше структурних досліджень фенілонів різних типів за допомогою ІЧ-

спектроскопії [23; 24], вагомий внесок у загальну стабілізацію систем такого роду можуть становити численні міжмолекулярні взаємодії, в тому числі й міцні водневі зв'язки. За літературними даними [25], структурна ідентифікація поліамідів зазвичай включає розгляд характеристичних смуг поглинання з їх переважним розташуванням в областях 3280, 2900, 1640, 1550 та 1545 см⁻¹. При цьому спектроскопія ЯМР суттєвим чином доповнює інші спектральні методи аналізу індивідуальних полімерів та композитів на їх основі.

Висновки

Таким чином, наведені у роботі результати квантово-хімічних досліджень свідчать про принципову можливість застосування методів і прийомів квантової хімії для вивчення

особливостей внутрішніх та міжмолекулярних взаємодій на рівні окремих ділянок – структурних фрагментів макромолекул. Результати розрахунків добре узгоджуються зі спектральними даними щодо будови цих матеріалів та можуть мати принципове значення з точки зору попереднього оцінювання спорідненості окремих компонентів до сольватаційних ефектів середовища.

Подяки

Автори висловлюють щирі подяки Українсько-Американській лабораторії комп'ютерної хімії (ДНУ НТК «Інститут монокристалів» НАН України, м. Харків) за суттєву допомогу у здійсненні цієї роботи.

References

- [1] Hatada, K., Kitayama, T. (2004). *NMR Spectroscopy of Polymers*. Berlin-Heidelberg, Germany: Springer-Verlag. doi: [10.1007/978-3-662-08982-8](https://doi.org/10.1007/978-3-662-08982-8)
- [2] Brandolini, A. J., Hills, D. D. (2000). *NMR Spectra of Polymers and Polymer Additives*. Boca Raton, USA: CRC Press. doi: [10.1201/9781482293425](https://doi.org/10.1201/9781482293425)
- [3] Krivdin, L. B. (2021). Computational NMR of Carbohydrates: Theoretical Background, Applications, and Perspectives. *Molecules*, 26(9), 2450. doi: [10.3390/molecules26092450](https://doi.org/10.3390/molecules26092450)
- [4] Ji, X., Gonnella, N. C., Xin, D. (2020). Deconvolution of fast exchange equilibrium states in NMR spectroscopy using virtual reference standards and probability theory. *Org. Biomol. Chem.*, 18(35), 6927–6934. doi: [10.1039/D0OB01459A](https://doi.org/10.1039/D0OB01459A)
- [5] Lacerda, E. G., Kamounah, F. S., Coutinho, K., Sauer, S. P. A., Hansen, P. E., Hammerich, O. (2018). Computational Prediction of ¹H and ¹³C NMR Chemical Shifts for Protonated Alkylpyrroles: Electron Correlation and Not Solvation is the Salvation. *ChemPhysChem.*, 20(1), 78–91. doi: [10.1002/cphc.201801066](https://doi.org/10.1002/cphc.201801066)
- [6] Lauro, G., Das, P., Riccio, R. D., Reddy, S., Bifulco, G. (2020). DFT/NMR approach for the configuration assignment of groups of stereoisomers by the combination and comparison of experimental and predicted sets of data. *J. Org. Chem.*, 85(5), 3297–3306. doi: [10.1021/acs.joc.9b03129](https://doi.org/10.1021/acs.joc.9b03129)
- [7] Shan, H., Wilson, W. K., Kamaric, E. (2020). NOESY and DFT-GIAO Calculations Reveal Pervasive Errors in C20 Configurations of Taraxastane-3,20-diols: Proposals to Improve NMR Structure Determinations. *Org. Lett.*, 22(5), 1714–1719. doi: [10.1021/acs.orglett.9b04566](https://doi.org/10.1021/acs.orglett.9b04566)
- [8] Andrade, D., Colherinhas, G. (2020). A₆H polypeptide membranes: Molecular dynamics simulation, GIAO-DFT-NMR and TD-DFT spectroscopy analysis. *J. Mol. Liq.*, 316, 113850. doi: [10.1016/j.molliq.2020.113850](https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.113850)
- [9] Bukowicki, J., Wawer, A., Paradowska, K. (2015). Conformational Analysis of Gentiobiose Using Genetic Algorithm Search and GIAO DFT Calculations with ¹³C CPMAS NMR as a Verification Method. *J. Carbohydr. Chem.*, 34(3), 145–162. doi: [10.1080/07328303.2015.1016230](https://doi.org/10.1080/07328303.2015.1016230)
- [10] Pierens, G. K., Venkatachalam, T. K., Reutens, D. C. (2017). NMR and DFT investigations of structure of colchicine in various solvents including density functional theory calculations. *Sci. Rep.*, 7, 5605. doi: [10.1038/s41598-017-06005-5](https://doi.org/10.1038/s41598-017-06005-5)
- [11] Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., Montgomery, Jr., J. A., Vreven, T., Kudin, K. N., Burant, J. C., Millam, J. M., Iyengar, S. S., Tomasi, J., Barone, V., Mennucci, B., Cossi, M., Scalmani, G., Rega, N., Petersson, G. A., Nakatsuji, H., Hada, M., Ehara, M., Toyota, K., Fukuda, R., Hasegawa, J., Ishida, M., Nakajima, T., Honda, Y., Kitao, O., Nakai, H., Klene, M., Li, X., Knox, J. E., Hratchian, H. P., Cross, J. B., Bakken, V., Adamo, C., Jaramillo, J., Gomperts, R., Stratmann, R. E., Yazyev, O., Austin, A. J., Cammi, R., Pomelli, C., Ochterski, J. W., Ayala, P. Y., Morokuma, K., Voth, G. A., Salvador, P., Dannenberg, J. J., Zakrzewski, V. G., Dapprich, S., Daniels, A. D., Strain, M. C., Farkas, O., Malick, D. K., Rabuck, A. D., Raghavachari, K., Foresman, J. B., Ortiz, J. V., Cui, Q., Baboul, A. G., Clifford, S., Cioslowski, J., Stefanov, B. B., Liu, G., Liashenko, A., Piskorz, P., Komaromi, I., Martin, R. L., Fox, D. J., Keith, T., Al-Laham, M. A., Peng, C. Y., Nanayakkara, A., Challacombe, M., Gill, P. M. W., Johnson, B., Chen, W., Wong, M. W., Gonzalez, C., & Pople, J. A. (2004). *Gaussian 03 (Revision E.01)* [Computer software]. Gaussian Inc., Wallingford CT.
- [12] Butyrinskaya, E. V. (2011). [Computational chemistry: bases of theory and work with the programs of Gaussian and GaussView]. Moscow, Russian Federation: SOLON-PRESS (in Russian).
- [13] Tomasi, J. (2011). Selected features of the polarizable continuum model for the representation of solvation. *WIREs Comput. Mol. Sci.*, 1(5), 855–867. doi: [10.1002/wcms.54](https://doi.org/10.1002/wcms.54)
- [14] Chen, C., Liu, W., Zhou, P. (2016). TBHP-mediated highly efficient dehydrogenative cross-oxidative coupling of methylarenes with acetanilides. *Beilstein J. Org. Chem.*, (12), 2250–2255. doi: [10.3762/bjoc.12.217](https://doi.org/10.3762/bjoc.12.217)
- [15] Kumar, A., Kumar, B. A. (2014). Nanoparticle mediated organic synthesis (NAMO-synthesis): CuI-NP catalyzed

- ligand free amidation of aryl halides. *RSC Adv.*, 4(78), 41631–41635. doi: [10.1039/C4RA06804A](https://doi.org/10.1039/C4RA06804A)
- [16] Burya, O. I., Suchilina-Sokolenko, S. P., Sokolenko, V. V., Larchikova, O. G. (2006). *Ukraine Patent no. 76293*. Kyiv, Ukraine. Dnipropetrovsk state agrarian university.
- [17] Tokar, A., Chigvintseva, O. (2021). The quantum-chemical and spectral criteria for hydrogen bonding efficiency in structural analysis of aramides. *Chem. Chem. Technol.*, 15(1), 9–15. doi: [10.23939/chcht15.01.009](https://doi.org/10.23939/chcht15.01.009)
- [18] Volkov, V. I., Yarmolenko, O. V., Chernyak, A. V., Slesarenko, N. A., Avilova, I. A., Baymuratova, G. R., Yudina, A. V. (2022). Polymer Electrolytes for Lithium-Ion Batteries Studied by NMR Techniques. *Membranes*, 12(4), 416. doi: [10.3390/membranes12040416](https://doi.org/10.3390/membranes12040416)
- [19] Wolff, S. K., Ziegler, T. (1998). Calculation of DFT-GIAO NMR shifts with the inclusion of spin-orbit coupling. *J. Chem. Phys.*, 109(3), 895–905. doi: [10.1063/1.476630](https://doi.org/10.1063/1.476630)
- [20] Kupka, T., Pasterna, G., Lodowski, P., Szeja, W. (1999). GIAO-DFT prediction of accurate NMR parameters in selected glucose derivatives. *Magn. Reson. Chem.*, 37(6), 421–426. doi: [10.1002/\(SICI\)1097-458X\(199906\)37:6<421::AID-MRC479>3.0.CO;2-W](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-458X(199906)37:6<421::AID-MRC479>3.0.CO;2-W)
- [21] Tokar, A. V. (2016). [*Thesaurus in Polymer Chemistry*]. Dnipro, Ukraine: DSAEU-DNU (in Ukrainian).
- [22] Guo, X., Tang, L., Yang, Y., Zha, Zh., Wang, Zh. (2014). An efficient synthesis of amides from alcohols and azides catalyzed by a bifunctional catalyst Au/DNA under mild conditions. *Green Chem.*, 16(5), 2443–2447. doi: [10.1039/C3GC42485E](https://doi.org/10.1039/C3GC42485E)
- [23] Tokar, A., Kabat, O., Chigvintseva, O., Belošević, S. (2021). Intermolecular Interactions in Complex Systems “Polyamide-Silica Gel”: The Quantum-Chemical Interpretation. In I. Karabegović (Eds.), *New Technologies, Development and Application IV. Lecture Notes in Networks and Systems* (pp. 875–882). Springer Nature, Switzerland: Springer Cham. doi: [10.1007/978-3-030-75275-0_96](https://doi.org/10.1007/978-3-030-75275-0_96)
- [24] Tokar, A. V., Chigvintseva, O. P. (2022). [*The intermolecular and intramolecular interactions in complex phenylone based systems: a quantum-chemical interpretation*]. The current state of fundamental and applied natural sciences research (pp. 327–352). Riga, Latvia: Baltija Publishing. (in Ukrainian). doi: [10.30525/978-9934-26-212-8-15](https://doi.org/10.30525/978-9934-26-212-8-15)
- [25] Vorsina, I. A., Grigoreva, T. F., Vosmerikov, S. V., Lyakhov, N. Z. (2015). Mechanocomposites on the basis of polyamide. *Nauka i Studia*, 5(136), 20–25.