

УДК 535.33

Потапова Людмила Ильинична

кандидат химических наук, доцент

E-mail: ludmilapo@mail.ru

Фурер Виктор Львович

доктор химических наук, профессор

E-mail: furter@kgasu.ru

Казанский государственный архитектурно-строительный университет

Адрес организации: 420043, Россия, г. Казань, ул. Зеленая, д. 1

Коваленко Валерий Игнатьевич

доктор химических наук, профессор

E-mail: koval@iopc.ru

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова

Адрес организации: 420088, Россия, г. Казань, ул. Арбузова, д. 8

Изучение конформаций *p*-1-адамантилкаликс[8]арена методом ИК-спектроскопии – основа для создания полимерных материалов нового поколения

Аннотация

Постановка задачи. Определение пространственной структуры каликс[8]арена для создания потенциально эффективных полифункциональных стабилизаторов.

Изучение водородных связей и конформации молекул каликс[8]арена с трет-бутильным и адамантиловым заместителем в различных состояниях методом ИК-спектроскопии, для определения способности приспосабливаться к различным полимерным соединениям.

Результаты. Водородные связи и конформации молекул каликс[8]арена с *p*-трет-бутильным и *p*-1-адамантильным заместителями были изучены методом инфракрасной спектроскопии в различных состояниях. Конформации, реакционная способность, распределение заряда и ИК-спектры каликсаренов были рассчитаны методом теории функционала плотности (ТФП). Проведено сравнение ИК-спектров молекул каликс[8]аренов в конформации складчатой петли и кресла. Оптимизированная геометрия молекул воспроизводит экспериментальные рентгеновские данные. Конформация-кресло на 20 ккал/моль менее предпочтительна, чем конформация-складчатая петля. Конформация складчатой петли является наиболее стабильной в твердом состоянии и растворе. Водородные связи определяют стабильность этой структуры. В *p*-1-адамантилкаликс[8]арене реализуются более сильные водородные связи по сравнению с *p*-трет-бутилкаликс[8]ареном. Наблюдаемые ИК-спектры были интерпретированы с использованием рассчитанного распределения потенциальной энергии с квантово-химическими силовыми константами. Теоретические кривые поглощения, рассчитанные для конформации складчатой петли, соответствуют экспериментальным ИК-спектрам каликс[8]аренов.

Выводы. Значимость полученных результатов для строительной отрасли состоит в том, что изучены новые материалы, применяемые для термостабилизации пленочных покрытий, эпоксидных смол, а также других полимерных изделий. Изучены ИК-спектры *p*-трет-бутилкаликс[8]арена и *p*-1-адамантилкаликс[8]арена в кристаллическом состоянии, в растворе и при различных температурах. Каликс[8]арены занимают конформацию-складчатая петля с циклической системой внутримолекулярных водородных связей. Эта конформация является более стабильной, чем конформация-кресло. Для создания потенциально эффективных полифункциональных стабилизаторов изучена каликсареновая платформа, которая из-за своей отличительной геометрии способна приспосабливаться к различным соединениям, образуя комплексы включения посредством нековалентной связи, взаимодействия Ван-дер-Ваальса и водородной связи.

Ключевые слова: ИК-спектроскопия, каликсарены, водородная связь, квантовая химия, конформация.

Введение

Каликсарены представляют собой хорошо известный класс органических веществ, состоящих из связанных друг с другом ароматических групп [1]. Водородные связи влияют на форму молекул и их способность удерживать и транспортировать активные вещества [1]. Каликсарены способны к межмолекулярным взаимодействиям и включению небольших нейтральных органических молекул [1]. Эти взаимодействия играют важную роль в биологических системах и могут использоваться для регистрации вредных выбросов в атмосферу, а так же как основа для создания эффективных стабилизаторов полимеров нового поколения. Силы взаимодействия гость-хозяин зависят от размера полости и конформации каликсаренов. Поэтому изучение структуры и водородных связей в каликсаренах представляет очевидный интерес [1-9].

Замещенные полициклические каликсарены остаются малоизвестными [2]. Адамантильный фрагмент был выбран в качестве заместителя, поскольку он имеет липофильную структуру, которая обеспечивает растворимость в органических растворителях. Он также имеет несколько позиций для добавления заместителей и модификации способности каликсаренов образовывать комплексы. Пространственные молекулярные модели показывают, что введение 1-адамантильных заместителей в каликсарены увеличивает размер макроцикла [2]. Мы можем ожидать, что эти каликсарены являются новыми полезными хозяевами.

Огромные практические возможности каликсаренов продолжают привлекать научные группы к своим исследованиям. ИК-спектроскопия позволяет подробно описать эволюцию системы водородных связей соединений (эти изменения, в свою очередь, отражают состояние и перестройку электронных облаков молекул). Водородная связь является зондом для изучения структуры сложных молекулярных систем, таких как гидроксильированные каликсарены. Водородные связи в каликсарене удобнее изучать с помощью ИК-спектроскопии. Тем не менее интерпретация ИК-спектров каликсаренов в основном выполняется только для характеристических частот и имеет ограниченное значение. Необходимо интерпретировать экспериментальные ИК-спектры с помощью квантовых расчетов.

Теория функционала плотности (ТФП) позволяет изучать структуру и конформации каликсаренов и их комплексов с анионами, катионами и нейтральными молекулами. Метод ТФП широко используется для интерпретации экспериментальных данных ЯМР- и ИК-спектроскопии. Расчеты позволяют оценить влияние различных структурных факторов: природы функциональных групп, размера, конформационной подвижности макроцикла – на способы приспосабливаться к различным соединениям, образуя комплексы включения посредством нековалентной связи, взаимодействия Ван-дер-Ваальса и водородной связи.

Целью данной работы было установление конформаций и изучение водородных связей в *p*-1-адамантилкаликс[8]арене (АД8) с помощью ИК-спектроскопии и квантовых методов (рис. 1).

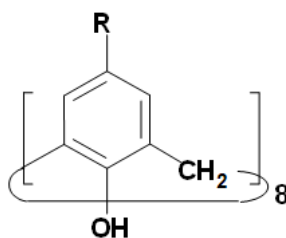


Рис. 1. Структура каликс[8]аренов; R = H, t-Бутил, АД (иллюстрация авторов)

Интересно было проследить эволюцию силы водородной связи в молекулах каликс[8]арена в зависимости от типа заместителя. Конформация складчатой петли преобладает для каликс[8]аренов, но в присутствии молекул пиридина образуется форма кресла [10]. В экспериментальных ИК-спектрах наложение отдельных полос конформеров затрудняет их идентификацию. Мы рассчитали кривые поглощения ИК-спектров конформеров складчатой петли и кресла каликс[8]аренов и сравнили их с экспериментальным спектром.

Методика съемки и расчета ИК-спектров каликсаренов

Синтез *p*-1-адамантилкаликс[8]арена (АД8) впервые был проведен авторами ранее [2] (рис. 1). Для сравнения авторы также изучали *p*-трет-бутилкаликс[8]арен (ТБ8) и каликс[8]-арен (К8) (рис. 1). Их синтез и их основные характеристики были ранее описаны [1]. В процессе очистки эти соединения кристаллизовали из смеси CHCl_3 -MeOH и сушили в вакууме при 140°C (кипящий ксилол). Температуры плавления и разрушения этих соединений достаточно высоки – 350°C и выше [1]. Оставшуюся воду и растворитель удаляли из каликсаренов нагреванием.

Инфракрасные спектры каликс[8]аренов в таблетках KBr записывали в области 4000-400 cm^{-1} с помощью ИК-анализатора Bruker Vector-22 с разрешением 2 cm^{-1} , накапливая 64 скана спектра.

Авторы создали модели АД8, ТБ8 и К8. Оптимизация геометрии молекул проводилась методом ТФП с применением программы PRIRODA. Авторы выбрали эту программу для получения оптимального соотношения точности и времени расчета для молекулы АД8, содержащей 304 атома. Большой размер молекулы АД8 не позволял проводить расчеты более высокого уровня. Процедура масштабирования частот не применялась.

При построении теоретических инфракрасных спектров использовалась лоренцева форма полос с полушириной 10 cm^{-1} . Отесение колебаний выполнялось путем расчета распределения потенциальной энергии с использованием программы SHRINK. Авторы выполнили анализ естественных связей с использованием программного обеспечения Gaussian 09, рассчитали молекулярные дескрипторы, используя энергию ионизации и сродство к электрону.

Изучение водородных связей в адамантилкаликс[8]арене

Каликсарены характеризуются конформационной подвижностью за счет вращения ароматических фрагментов [1, 2]. Для каликс[4]аренов возможны четыре конформации: конус, частичный конус, 1,2-альтернат и 1,3-альтернат [1, 2]. Для каликс[8]аренов число конформаций увеличивается до шестнадцати [1, 2]. Как следует из рентгеновских данных, в твердом состоянии каликс[8]арены находятся в конформации складчатой петли [1]. В этой структуре гидроксильные группы находятся выше и ниже плоскости, в которой лежат атомы кислорода и реализуется циклическая система водородных связей [1]. Конформация-кресло состоит из двух фрагментов каликс[4]арена в виде частичного конуса [10]. Изучение молекулярных моделей, полученных в этой статье, дает более наглядное представление об этих конформациях.

На рис. 2-3 и в таблице приведены ИК-спектры кристаллического АД8 и ТБ8.

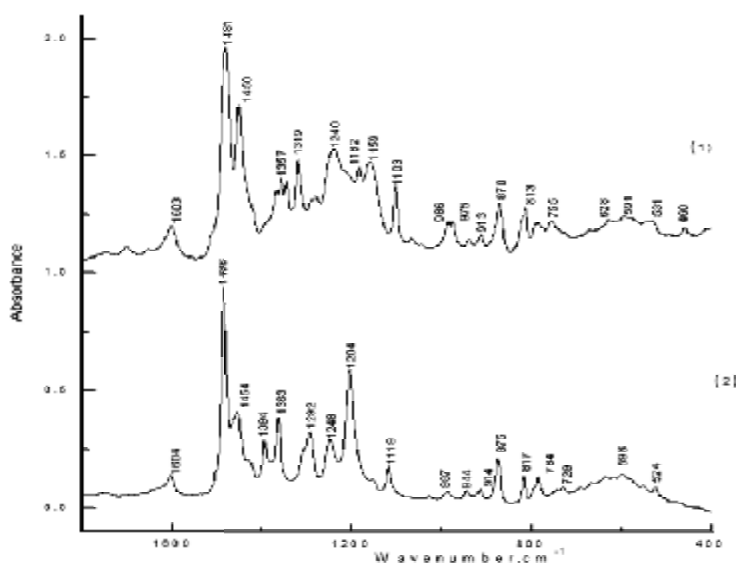


Рис. 2. Экспериментальные ИК-спектры АД8 (1) и ТБ8 (2) в кристаллическом состоянии в области 1800-400 cm^{-1} (иллюстрация авторов)

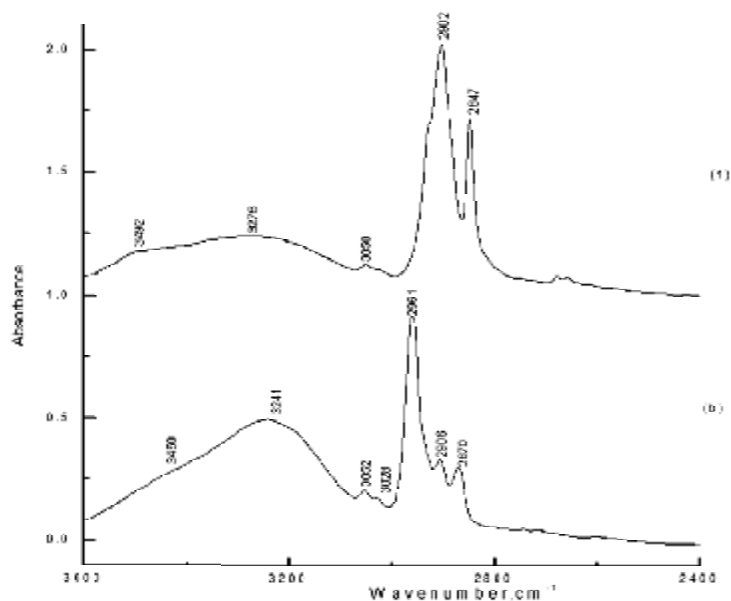


Рис. 3. Экспериментальные ИК-спектры АД8 (1) и ТБ8 (2) в кристаллическом состоянии в области 3600-2400 см⁻¹ (иллюстрация авторов)

Таблица

Экспериментальные частоты колебаний гидроксильных групп νОН кристаллов и разбавленных растворов в ССl₄ и относительные энергии ΔЕ (ккал/моль) конформеров производных каликс[8]аренов

Соединение	Исходный кристалл, T _к	T=180° С	Охлажденный кристалл, T _к	Раствор в ССl ₄	Складчатая петля	Кресло
С8	3274, 3343	3281, 3343	3272, 3343	3310	0	19,6
ТБ8	3248	3265	3243	3282	0	25,5
АД8	3372	3375	3372	3254	0	24,6

Полосы поглощения валентных колебаний гидроксила в разбавленных растворах каликс[8]аренов в ССl₄ с трет-бутильными и *p*-1-адамантильными заместителями находятся в узком частотном диапазоне 3185 см⁻¹ для АД8 и 3192 см⁻¹ для ТБ8 (таблица). В обоих случаях наблюдаются широкие полосы поглощения νОН. Степень смещения полосы ν(ОН) в сторону низких частот зависит от энергии водородной связи. В молекуле АД8 водородная связь слабее, чем в молекуле ТБ8. Наши ИК-спектральные данные согласуются с результатами, полученными рентгеновским и ЯМР-методами [1-8].

В ИК-спектрах кристаллических образцов каликс[8]аренов частоты валентных колебаний гидроксильных групп несколько выше, чем в спектрах растворов в ССl₄ (табл.), 3241 см⁻¹ (ТБ8) и 3276 см⁻¹ (АД8). Стерические помехи ослабляют водородную связь в АД8 по сравнению с ТБ8.

Рассмотрим эволюцию ИК-спектров каликс[8]аренов с ростом температуры (табл., рис. 2-3). При слабом нагревании до 100-180° С полоса νОН сдвигается для всех каликс[8]аренов. Но у разных каликсаренов это происходит по-разному. Например, при 180° С в ИК-спектре ТБ8 частота полосы νОН увеличивается на 4 см⁻¹, в то время как в ИК-спектре АД8 она уменьшается в тех же пропорциях. Неизменность ИК-спектров при нагревании до 180° С обусловлено реализацией конформации складчатой петли во всех исследованных каликс[8]аренах.

Удаление молекул воды и растворителя при нагревании может сопровождаться уменьшением дефектов кристаллического блока. Полосы в ИК-спектре сужаются, и он становится более разрешенным. Важная информация содержится в значениях смещений полос νОН при нагревании. Они зависят как от степени теплового движения фрагментов арена в кристалле, так и от различий в упаковке этих фрагментов каликсарена. Изучение ИК-спектров каликсаренов при различных температурах позволяет проследить

изменения конформационного состояния молекул и перестройки системы водородных связей, а также способности к образованию комплекса и свойств рецепторы.

Конформация-кресло на 20 ккал/моль менее предпочтительна, чем складчатая петля. Рассчитанная длина связи для АД8 и ТБ8 соответствует экспериментальным данным, полученным рентгеновским методом для ТБ8. В конформации-складчатая петля молекулы АД8 и ТБ8 имеют восемь водородных связей, расстояние между атомами кислорода равно 2,68 Å. Теоретические углы O(9)–H (11) ... O (22) в молекулах АД8 и ТБ8 равны 174,1 ° и 173,9 °.

Для характеристики водородных связей использовались индексы связи Виберга. Для молекулы АД8 среднее значение этого индекса составляет 0,117, а для молекулы ТБ8 – 0,077. Таким образом, в первой системе реализуются более прочные водородные связи.

Кольца, образованные на нижнем и верхнем краях каликсаренов, определяют структуру молекул. Для каликс[8]аренов размеры ковалентных и водородно-связанных макроциклов сопоставимы по размеру, а молекулы плоские. Как правило, в кристаллическом состоянии молекулы каликс[8]арена имеют конформацию складчатой петли. В этом случае атомы кислорода находятся в плоскости, образуя круг, а бензольные кольца образуют чередующиеся углы с этой плоскостью, и создают симметричные складки (рис. 4). Поэтому для данного конформера понятие молекулярной полости теряет смысл.

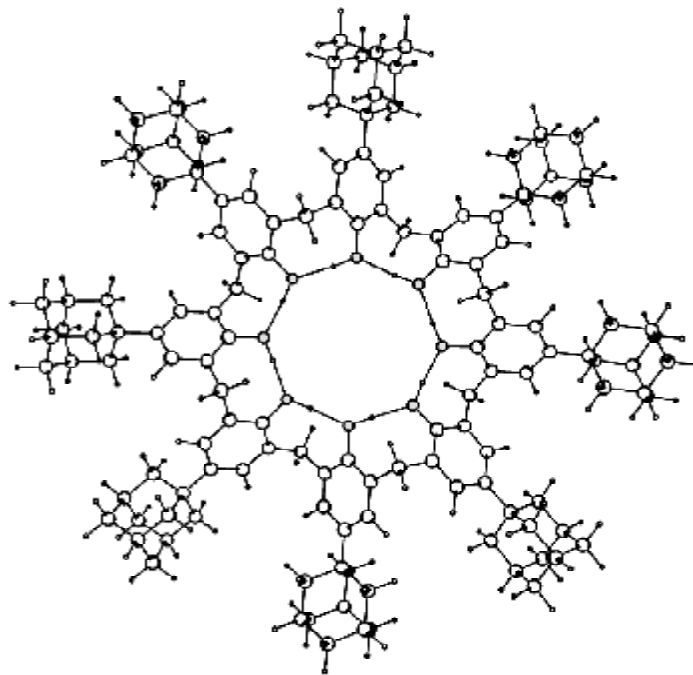


Рис. 4. Структура АД8 в конформации складчатой петли (иллюстрация авторов)

Углы кручения φ (C6-C3-C11-C14) и χ (C3-C11-C14-C17) определяют конформацию каликсаренов. Вычисленные угловые значения для молекул каликс[8]арена достаточно совместимы с экспериментальными значениями рентгеновского излучения. Средние абсолютные значения торсионных углов в молекуле ТБ8 в конформации складчатой петли составляют 91,2 и 85,6° и соответствуют экспериментальным данным 85,4 и 91,4°. В конформации складчатой петли молекулы АД8 средние значения углов φ и χ равны 101,6 и 89,3°. Видно, что смена заместителя в пара-положении ароматических фрагментов влияет на ориентацию бензольных колец.

В экспериментальном ИК-спектре АД8 наблюдаются сдвиги и расщепления полос. Классификация нормальных колебаний молекул ТБ8 и АД8 проводилась с помощью анализа распределенной потенциальной энергии.

Полосы валентных колебаний связей ОН и СН находятся в области 2800-3400 см⁻¹ экспериментального ИК-спектра АД8 (рис. 3). Значение частоты полосы ν (ОН) при 3276 см⁻¹ в ИК-спектре АД8 указывает на образование водородной связи. Слабые полосы

при 3050 и 3024 cm^{-1} относятся к валентным колебаниям связей СН ароматических групп. Частоты 2902 и 2847 cm^{-1} представляют собой $\nu_s(\text{CH}_2)$ колебания.

Линии 1603 и 1481 cm^{-1} в опытном ИК-спектре АД8 были отнесены к валентным колебаниям ароматических связей СС (рис. 2). Плоские колебания связей СН бензольных колец показывают полосы 1182, 1159 и 1103 cm^{-1} . Полоса 870 cm^{-1} относится к внеплоскостным колебаниям связей СН ароматических групп. Валентные колебания связей СС и СО показывают полосу при 1240 cm^{-1} .

Растягивающие колебания связей СС и изгибные колебания ССН вызывают появление полос при 939, 913 и 813 cm^{-1} . Крутильные колебания бензольных колец дают полосу при 755 cm^{-1} в ИК-спектре АД8.

Интересно наблюдать модификацию ИК-спектра каликс[8]аренов при переходе от конформации складчатой петли к конформации кресла. Для этого был проведен расчет ИК-спектров каликс[8]аренов в этих конформациях. Сравнение теоретических ИК-спектров молекул ТБ8 и АД8 в конформации складчатой петли и кресла показывает изменения частот и интенсивностей полос. Для аналитических целей были выбраны характеристические полосы каждого конформера молекулы АД8: 1457, 1252, 1203, 1091, 720 cm^{-1} (складчатая петля), 1235, 1123, 1087, 935 cm^{-1} (кресло).

Исследование модификаций электронной плотности позволяет определить природу внутримолекулярных водородных связей. При образовании водородной связи электронная плотность неподеленной электронной пары кислорода переносится на антисвязывающую орбиталь связи ОН. Это приводит к гибридизации орбиталей неподеленных электронных пар атомов кислорода и ОН.

Заключение

Авторами были изучены ИК-спектры *p*-трет-бутилкаликс[8]арена и *p*-1-адамантилкаликс[8]арена в кристаллическом состоянии, в растворе и при различных температурах. Каликс[8]арены занимают конформацию складчатой петли с циклической системой внутримолекулярных водородных связей. Эта конформация является более стабильной, чем конформация кресла. Представлены теоретические инфракрасные спектры и определены характерные полосы для каждой конформации. Данные соединения можно применять для комплексной свето- и термостабилизации полиолефинов при изготовлении погодостойких плёночных покрытий, смол и других полимерных материалов.

Список библиографических ссылок

1. Gutsche C. D. Calixarenes revisited. The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 1998. 248 p.
2. Шокова Э. А., Хомич Э. В., Ахметов Н. Н., Вацуро И. М., Лузиков Ю. Н., Ковалев В. В. Синтез и конформационные свойства адамантилированных каликс[5] и [6]аренов // Ж. Орг. Хим. 2003. V. 39. P. 400–414.
3. Abdrakhmanova L. A., Stroganov V. F. Modification of polyvinylchloride compositions by polymerizable epoxy oligomers // Polymer Science D. 2019. V. 12. P. 121–123.
4. Коваленко В. И., Чернова А. В., Борисоглебская Е. И., Кацюба С. А., Зверев В. В. Кооперативная внутримолекулярная водородная связь и конформации молекул тиокаликс[4]аренах // Изв. Акад. наук. Сер. хим. 2002. № 5. С. 762–764.
5. Katsyuba S. A., Kovalenko V. I., Chernova A. V., Vandyukova E. E., Zverev V. V., Shagidullin R. G., Antipin I. S., Solovieva S., Stoikov I. Vibrational Spectra, Co-operative Intramolecular Hydrogen Bonding and Conformations of Calix[4]arene and Thiacalix[4]arene Molecules and Their para-tert-Butyl Derivatives // Org. Biomol. Chem. 2005. V. 3. № 14. P. 2558–2565.
6. Furer V. L., Borisoglebskaya E. I., Kovalenko V. I. Band intensity in the IR-spectra and conformations of calix[4]arene and thiacalix[4]arene // Spectrochim. Acta, A. 2005. V. 61. P. 355–359.

7. Furer V. L., Vandyukov A. E., Zaripov S. R., Solovieva S. E., Antipin I. S., Kovalenko V. I. FT-IR and FT-Raman study of hydrogen bonding in p-alkylcalix[8]arenes // *Vibrational Spectroscopy*. 2018. Vol. 95. № 1. P. 38–43.
8. Furer V. L., Potapova L. I., Vatsouro I. M., Kovalev V. V., Shokova E. A., Kovalenko V. I. Investigation of structure and hydrogen bonds in adamantyl[6]calixarene by IR-spectroscopy and DFT // *Vibrational Spectroscopy*. 2018. Vol. 96. № 1. P. 60–66.
9. Furer V. L., Potapova L. I., Kovalenko V. I. DFT study of hydrogen bonding and IR-spectra of calix[6]arene // *J. Molecular Structure*. 2017. V. 1128. P. 439–447.
10. Czugler M., Tisza S., Speir G. Versatility in inclusion hosts. Unusual conformation in the crystal structure of the p-tert-butylcalix[8]arene: pyridine (1:8) clathrate // *J. Incl. Phenom.* 1991. V. 11. P. 323–331.

Potapova Ludmila Ilinichna

doctor of chemical sciences, associate professor

E-mail: ludmilapo@mail.ru

Furer Victor Lvovich

doctor of chemical sciences, professor

E-mail: furer@kgasu.ru

Kazan State University of Architecture and Engineering

The organization address: 420043, Russia, Kazan, Zelenaya st., 1

Kovalenko Valery Ignatievich

doctor of chemical sciences, professor

E-mail: koval@iopc.ru

A.E. Arbuzov Institute of Organic and Physical Chemistry, RAS

The organization address: 420088, Russia, Kazan, Arbuzov st., 8

The study of conformations of p-1-adamantylcalix[8]arene by IR-spectroscopy is the basis for the creation of a new generation of polymeric materials**Abstract**

Problem statement. Determination of the spatial structure of the calix[8]arene to create potentially effective multifunctional stabilizers. The study of hydrogen bonds and the conformation of calix[8]arene molecules with a tert-butyl and adamantyl substituent in various states by IR-spectroscopy to determine the ability to adapt to various polymer compounds.

Results. Hydrogen bonds and conformations of calix[8]arene molecules with p-tert-butyl and p-1-adamantyl substituents were studied by infrared spectroscopy in various states. Conformations, reactivity, charge distribution, and IR-spectra of calixarenes were calculated using the DFT method. The IR-spectra of calix[8]arenes were compared in the conformation of a folded loop and chair. Optimized molecular geometry reproduces experimental X-Ray data. A 20 kcal/mol chair conformation is less preferred than a folded loop conformation. The folded loop conformation is most stable in solid and solution. Hydrogen bonds determine the stability of this structure. In the p-1-adamantylcalix[8]arene, stronger hydrogen bonds are realized in comparison with the p-tert-butylcalix[8]arene. The observed IR-spectra were interpreted using the calculated potential energy distribution with quantum chemical force constants. The theoretical absorption curves calculated for the conformation of the folded loop correspond to the experimental IR-spectra of calix[8]arenes.

Conclusions. The significance of the results obtained for the construction industry lies in the fact that new materials used for the thermal stabilization of film coatings, epoxy resins, as well as other polymer products, have been studied. The IR-spectra of p-tert-butylcalix[8]arene and p-1-adamantylcalix[8]arene were studied in the crystalline state, in solution, and at various temperatures. The calix[8]arenes occupy the conformation of a folded loop with a cyclic system of intramolecular hydrogen bonds. This conformation is more stable than the conformation of the chair. Theoretical infrared spectra are presented and characteristic bands for each conformation are determined. To create potentially effective multifunctional stabilizers, a capixarene platform was studied, which, due to its distinctive geometry, is able to adapt to

various compounds, forming inclusion complexes via non-covalent bonds, Van der Waals interactions, and hydrogen bonds.

Keywords: IR-spectroscopy, calixarenes, hydrogen bonding, quantum chemistry, conformation.

References

1. Gutsche C. D. Calixarenes revisited. The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 1998. 248 p.
2. Shokova E. A., Khomich E. V., Akhmetov N. N., Vatsuro I. M., Luzikov Yu. N., Kovalev V. V. Synthesis and conformations of adamantylated calix[5]- and [6]arenes // J. Org. Khim. 2003. V. 39. P. 368–383.
3. Abdrakhmanova L. A., Stroganov V. F. Modification of polyvinylchloride compositions by polymerizable epoxy oligomers // Polymer Science D. 2019. V. 12. P. 121–123.
4. Kovalenko V. I., Chernova A. V., Borisoglebskaya E. I., Katsyuba S. A., Zverev V. V. Co-operative intramolecular hydrogen bonding and conformations of thiacalix[4]arene molecules // Izv. Akad. nauk. Ser. khim. 2002. № 5. P. 762–764.
5. Katsyuba S. A., Kovalenko V. I., Chernova A. V., Vandyukova E. E., Zverev V. V., Shagidullin R. G., Antipin I. S., Solovieva S. E., Stoikov I. Vibrational Spectra, Co-operative Intramolecular Hydrogen Bonding and Conformations of Calix[4]arene and Thiacalix[4]arene Molecules and Their para-tert-Butyl Derivatives // Org. Biomol. Chem. 2005. V. 3. № 14. P. 2558–2565.
6. Furer V. L., Borisoglebskaya E. I., Kovalenko V. I. Band intensity in the IR-spectra and conformations of calix[4]arene and thiacalix[4]arene // Spectrochim. Acta, A. 2005. V. 61. P. 355–359.
7. Furer V. L., Vandyukov A. E., Zaripov S. R., Solovieva S. E., Antipin I. S., Kovalenko V. I. FT-IR and FT-Raman study of hydrogen bonding in p-alkylcalix[8]arenes // Vibrational Spectroscopy. 2018. Vol. 95. № 1. P. 38–43.
8. Furer V. L., Potapova L. I., Vatsuro I. M., Kovalev V. V., Shokova E. A., Kovalenko V. I. Investigation of structure and hydrogen bonds in adamantyl[6]calixarene by IR-spectroscopy and DFT // Vibrational Spectroscopy. 2018. Vol. 96. № 1. P. 60–66.
9. Furer V. L., Potapova L. I., Kovalenko V. I. DFT study of hydrogen bonding and IR-spectra of calix[6]arene // J. Molecular Structure. 2017. V. 1128. P. 439–447.
10. Czugler M., Tisza S., Speir G. Versatility in inclusion hosts. Unusual conformation in the crystal structure of the p-t-butylcalix[8]arene: pyridine (1:8) clathrate // J. Incl. Phenom. 1991. V. 11. P. 323–331.