

correlation between the chemical shift and the donor ability of the ligands.

The similar double parameter dependencies were found for the inorganic compounds  $\text{SnX}_n$ , where  $X=\text{H, F, Cl, Br, I}$ ;  $\text{SnCl}_6^{2-}$ ,  $X=\text{F, Cl, Br, I}$ ;  $\text{SnX}_4\text{Y}^{2-}$ ,  $X=\text{Cl, Br, I, Y}=\text{F, Cl, Br, I}$ ;  $\text{SnX}_5$  ( $X=\text{Cl, Br}$ ). (with respect to  $\delta\text{-SnO}_2$ ) [2-6].

$$\delta = 1.9N_s + 0.2N_p - 1.7 \quad (r=0.61, s=0.3) \quad (3)$$

as well as for the inorganic and organometallic compounds  $\text{SbMe}_n\text{X}_{3-n}$  ( $X=\text{F, Cl, Br, I}$ ;  $n=0-3$ );  $\text{SbMe}_n\text{X}_{5-n}$  ( $X=\text{F, Cl, Br, I}$ ;  $n=0-5$ );  $\text{SbPh}_3\text{X}_2$  ( $X=\text{Cl, Br, I}$ ) (with respect to  $\text{InSb}$ ) [14, 20]:

$$\delta = -61N_s + 0.4N_p + 115 \quad (r=0.58, s=3.5). \quad (4)$$

The obtained relations between Mössbauer's chemical shifts and 5s and 5p-populations of Sn and Sb atoms pointed to the same nature of the chemical shifts in any Sb and Sn compounds. These models studies provides also to a conclusion that Mössbauer's chemical shift should decrease with

increase of the donor ability of the ligands in the series of the  $\text{SnCl}_4\text{L}_2$  and  $\text{SbCl}_5\text{L}$  complexes.

## CONCLUSION

It seems very important that it is possible to use the chemical shift to the estimation of the donor ability of the ligand. Moreover these relations can be interpreted as the dependence of the chemical shift on charge on the central atom. The population of the 5s- and 5p- changes in proportion for the Sn and Sb atoms and chemical shift depends on the charge on the central atom for the studied complexes. For the other compounds of the Sb and Sn (eqs. 3-4) the relation between  $N_s$  and  $N_p$  in the series of the compounds is not strict proportional. This is due to the reason that chemical shift depends on more than only charge on the central atom, which is confirm by the equation 3-4 and relatively low curve fit standard error.

## Literature

1. Philipp J., Millins A., Curran C. // *Inorg. Chem.* 1968. V. 7. № 9. P. 1895.
2. Carty A., Hinsperger T., Mihichuk L., et al. // *Inorg. Chem.* 1970. V. 9. № 11. P. 2573-2576.
3. Bashkirov Sh., Kuramshin P., Manapov R. // *Russian. J. Struct. Chem.* 1973. V. 14. № 5. P. 935-940.
4. Yeats P., Sams J., Aubke F. // *Inorg. Chem.* 1970. V. 9. № 4. P. 740-745.
5. Fnedt J. M., Shenoy G. K., Leroy M. J. F. // *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* 1974. V. 13. № 4. P. 1374-1378.
6. Bashkirov Sh., Kuramshin P., Khramov A. et. all. // *Russian Coord. Chem.* 1979. V. 5. № 7. P. 1008-1015.
7. Varnek V. A., Poleshchuk O. Kh., Masalov L. N. et. all. // *Russian J. Struct. Chem.* 1982. V. 23. № 1. P. 98-101.
8. Makarov L., Zaicev Yu., Batrakov Yu. // *Russian Izv. AN USSR. Ser. Phys.* 1976. V. 40. № 2. P. 399-405.
9. Dautov L., Ishkenov E., Pichugina E. // *Russian Izv. AN KazSSR. Ser. Chem.* 1983. № 3. P. 56-61.
10. Dautov L., Gurkabaev B., Ishkenov E. // *Russian Phys. Stat. Solidi.* 1985. V. 27. № 10. P. 3150-3154.
11. Poleshchuk O. Kh., Nogaj B., Dolenko G. N. et. all. // *J. Mol. Struct.* 1993. V. 297. № 2. P. 295-312.
12. Poleshchuk O. Kh., Nogaj B., Kasprzak J. // *J. Mol. Struct.* 1994. V. 324. № 2. P. 215-220.
13. Ravenek W., Jacobs J. W. M., Avoird V. // *J. Chem. Phys.* 1983. V. 78. № 2. P. 391-430.
14. Kothekar V. // *Int. J. Quant. Chem.* 1976. V. 10. № 6. P. 993-1005.
15. Stewart J. J. P. // *Comput. Chem.* 1989. V. 10. № 1. P. 209-215.
16. Tudela D., Khan M. A., Zuckerman J. J. // *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* 1989. № 8. P. 558-560.
17. Freidt J. M., Shenoy G. K., Burgard M. // *J. Chem. Phys.* 1973. V. 59. № 20. P. 4468-4475.
18. Burger K., Fluck E. // *Inorg. Nucl. Chem. Lett.* 1974. V. 10. № 2. P. 171-176.
19. Townes C. H., Dailey B. P. // *J. Chem. Phys.* 1949. V. 17. № 3. P. 782-793.
20. Yanaga M., Miura T., Endo K. et. all. // *Bull. Chem. Soc. J.* 1986. V. 59. № 10. P. 3085-3092.

УДК 541.49

О.Х. Полещук, В.Ф. Усов, Ю.А. Шашина

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ МЕЖДУ ЭЛЕКТРОННЫМ СТРОЕНИЕМ И СПЕКТРАЛЬНЫМИ ПАРАМЕТРАМИ В КОМПЛЕКСАХ ПЯТИХЛОРИСТОЙ СУРЬМЫ С ОРГАНИЧЕСКИМИ ЛИГАНДАМИ

Томский государственный педагогический университет

В настоящее время нет теории, позволяющей количественно объяснить стабильность ЭДА-комплексов и определить электронодонорные и электроноакцепторные свойства молекул. Естественно, что свойства, проявляемые молекулой донора в реакции комплексообразования, будут

в определенной мере зависеть от свойств акцептора, и наоборот, свойства акцептора в этой реакции в какой-то мере определяются свойствами донора. Для понимания характера этой взаимосвязи и природы донорно-акцепторного взаимодействия весьма важно выяснить, какие факторы

в основном определяют электронодонорные и, соответственно, электроноакцепторные свойства молекул, установить характер корреляций между параметрами исходных молекул и параметрами молекулярных комплексов.

Комплексы пятихлористой сурьмы являются достаточно характерным примером комплексов с переносом заряда с энергией порядка 30-120 кДж/моль. Можно только указать на то, что пятихлористая сурьма является стандартным акцептором, энтальпия комплексообразования которого с различными органическими лигандами позволяет располагать последние в определенном ряду по донорным свойствам [1].

Существует достаточно большое число экспериментальных данных различных физических методов по этим комплексам, таких как спектры ядерного квадрупольного резонанса, мессбауэровские спектры, дипольные моменты, термодинамические параметры и т.п. [2]. Объяснение наблюдаемых результатов является достаточно трудной задачей из-за значительного числа приближений, используемых при анализе экспериментальных данных.

В настоящей работе нами использованы результаты квантово-химического расчета комплексов пятихлористой сурьмы методом PM3 с использованием пакета квантово-химических программ MORAC [3] для оценки электронного строения комплексов. В связи с тем, что практически все наблюдаемые экспериментально свойства комплексов в конечном счете зависят от длины донорно-акцепторной связи, мы провели модельные расчеты достаточно большой серии комплексов  $SbCl_5$  с различными органическими лигандами (пиридином, хлороокисью фосфора, ацетонитрилом, диметилсульфидом, диметилсульфоксидом, диоксаном, гексаметаполом, диметилформамидом, хлороокисью серы). В качестве донорных атомов, связанных с атомом сурьмы, в лигандах выступают атомы азота, кислорода и серы. При этом мы задавали различные длины донорно-акцепторной связи  $Sb-L$  и наблюдали, как изменяются характеристики комплексов.

В связи с ограниченностью места мы не можем привести полученные экспериментальные и расчетные параметры для всех комплексов, поэтому в качестве примера в таблице представлены рассчитанные дипольные моменты в зависимости от длины донорно-акцепторной связи  $Sb-L$  для комплекса с пиридином. Для остальных рассчитанных комплексов результаты подобны. Видно, что с увеличением расстояния  $Sb-L$  дипольный момент комплекса  $SbCl_5Py$  уменьшается:

$$\mu = -5,6 R_{Sb-N} + 20,2 \quad (r=0,996, s=0,2) \quad (1)$$

Данная зависимость вполне закономерна, так как известно, что дипольный момент комплекса

заметно отличается от векторной суммы дипольных моментов компонентов: акцептора и донора [4]. Обычно для анализа полученных экспериментально дипольных моментов комплексов используется векторная схема, в которой дипольный момент комплекса  $DA$  ( $\mu_k$ ) можно представить в виде векторной суммы дипольного момента донорно-акцепторной связи ( $\bar{\mu}_{DA}$ ) и дипольных моментов донорной ( $\bar{\mu}_D$ ) и акцепторной ( $\bar{\mu}_A$ ) частей комплекса [5]:

$$\bar{\mu}_k = \bar{\mu}_D + \bar{\mu}_{DA} + \bar{\mu}_A \quad (2)$$

Для того чтобы из дипольного момента комплекса получить дипольный момент  $DA$ -связи, нужно знать дипольные моменты донора и акцептора, а также взаимное расположение трех векторов. Считается, что молекулы доноров не претерпевают существенной перестройки при комплексообразовании, поэтому  $\bar{\mu}_D$  обычно принимают равным дипольному моменту донора. Необходимо иметь в виду, что дипольный момент  $DA$ -связи практически является измененным дипольным моментом неподеленной электронной пары (НЭП) гетероатома донора. Поэтому дипольный момент донорной части комплекса равен дипольному моменту исходного донора без того вклада, который вносит в дипольный момент донора НЭП. Принимая  $\bar{\mu}_D$  равным дипольному моменту донора, мы будем несколько занижать дипольный момент  $DA$ -связи. Вклады дипольного момента НЭП в дипольные моменты доноров неизвестны, и их трудно оценить [4, 6].

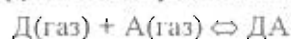
Дипольные моменты акцепторной части комплексов в большинстве случаев сильно отличаются от дипольных моментов исходных молекул акцепторов, поскольку акцепторы, как правило, изменяют свою конфигурацию при комплексообразовании. Основные затруднения при вычислении  $\bar{\mu}_{DA}$  связаны с оценкой дипольных моментов акцепторной части комплексов [5].

Таким образом, можно полагать, что величина прироста дипольного момента, непосредственно связанная с переносом заряда, зависит от прочности комплекса, которая уменьшается с ростом длины донорно-акцепторной связи. В этом случае, однако, действуют несколько механизмов. Из таблицы видно, что при увеличении длины  $Sb-L$  связи уменьшаются заряды на атомах хлора и сурьмы акцептора, что приводит к уменьшению значений дипольного момента акцептора ( $\mu_A$ ). Учитывая то, что рост длины связи  $Sb-L$  дает также и уменьшение заряда на координирующем атоме донора, можно считать, что  $\mu_{DA} = q_{Sb} q_D R_{Sb-L}$ , скорее всего, также падает, хотя и рост длины донорно-акцепторной связи должен приводить к его увеличению.

Изменение энергетических и структурных характеристик систем в результате связывания сво-

бодных молекул Д и А в молекулярные комплексы находит отражение в термодинамике реакций комплексообразования. Изменение энтальпии ( $\Delta H_k$ ), энтропии ( $\Delta S_k$ ) и свободной энергии Гиббса ( $\Delta G_k$ ) при образовании комплекса любого состава  $D_n A_m$  зависит от числа  $n$  энергий ДА-связей в нем, а также от изменения структурных характеристик и степеней свободы движения молекул Д и А в результате связывания их в комплексе [5].

В газовой фазе, где процесс комплексообразования не осложняется взаимодействием с окружающей средой, изменение энтальпии реакции:



можно представить как [7]:

$$\Delta H_k = \Delta E_{\text{ДА}} + (\Delta E^D + \Delta E^A), \quad (3)$$

где  $\Delta E_{\text{ДА}}$  — энергия образования ДА-связи в комплексе,  $\Delta E^D, \Delta E^A$  — суммарное изменение энергий связи в молекуле Д и молекуле А.

В таблице приведены значения энтальпий комплексообразования, рассчитанные по соотношению (3), а на рис. 1 зависимость между энтальпией комплексообразования и длиной донорно-акцепторной связи также для комплекса с пиридином (для всех комплексов получаются аналогичные зависимости). Видно, что зависимость нелинейная, и её можно описать неким многочленом. Получается, что с увеличением длины Sb-L связи энтальпия комплексообразования сначала уменьшается, а затем при некотором значении  $R_{\text{Sb-L}}$  увеличивается. Подобные зависимости наблюдаются всегда, когда две молекулы постепенно приближаются друг к другу с образованием устойчивой системы при каком-то оптимальном расстоянии [8] (при этом в разных комплексах такое оптимальное расстояние различно). По-видимому, в этом случае длина координационной связи оптимальна, а комплекс обладает повышенной устойчивостью.

До настоящего времени нет окончательной ясности в том, является ли мессбауэровский химический сдвиг (ХС) в спектрах сурьмы мерой эффективности донорно-акцепторного взаимодействия в комплексах. При использовании различных формул, выражающих зависимость  $\delta$  от заселенностей орбиталей атомов сурьмы или олова, можно в принципе сделать различные выводы о соотношении прямого вклада и экранировки в общую величину химического сдвига. Существующая в литературе интерпретация химического сдвига во многом носит качественный характер, причем высказываются альтернативные точки зрения. Так, наблюдаемое экспериментально систематическое понижение химического сдвига при переходе от  $\text{SnCl}_4$  к комплексам было объяснено переносом НЭП с молекулы донора на 5p, d-

ТАБЛИЦА 1

Параметры расчета комплекса  $\text{SbCl}_3\text{Py}$

$R_{\text{Sb-L}}, \text{ \AA}$	$-\Delta H, \text{ ккал/моль}$	$m, D$	$q_{\text{Sb}}, e$	$^*q_{\text{Cl}}, e$	$N_s^{5s}, e$	$N_p^{5p}, e$	$n^{55}\text{Cl}, \text{ МГц}$
2,0	29,60	9,02	1,17	0,32 0,19	1,830	2,000	40,58 31,44 35,76
2,1	35,08	8,43	1,15	0,31 0,19	1,835	2,015	40,32 31,88 36,43
2,2	39,31	7,98	1,14	0,31 0,20	1,837	2,022	39,80 34,16
2,3	39,08	7,34	1,13	0,30 0,20	1,840	2,033	39,66 34,87
2,4	34,41	6,69	1,11	0,28 0,20	1,843	2,046	39,58 35,49
2,5	36,78	6,04	1,10	0,27 0,20	1,846	2,057	39,62 36,14
2,6	35,40	5,72	1,08	0,26 0,21	1,848	2,070	39,42 34,90 38,63
2,7	34,14	5,17	1,07	0,28 0,20	1,850	2,082	39,59 34,90 39,68

орбитали атома олова молекулы-акцептора и уменьшением за счет этого 5s-электронной плотности на ядре атома олова [9]. Позднее эффект понижения ХС был объяснен перегибридизацией химических связей ( $sp^3 \rightarrow sp^3d^2$ ), происходящей при переходе тетраэдрического  $\text{SnCl}_4$  к октаэдрическим комплексам [10]. Как было показано в [10], изменение координации приводит к понижению s-характера связей Sn-Cl, а заселение d-орбиталей приводит к уменьшению s-электронной плотности на ядре олова, что в совокупности и дает понижение ХС. Считалось также [9], что понижение ХС является тем более сильным, чем сильнее перенос электронной плотности от молекулы донора, т.е. чем выше донорная сила органического лиганда. Основываясь на этой точке зрения, донорные свойства O-, N-, S-, P-доноров в порядке их увеличения следовало бы расположить в следующем порядке:  $O > N > S > P$ .

Существует и противоположная точка зрения, согласно которой повышение s-электронной плотности на ядре олова связано с повышением донорной силы лиганда [11]. При этом считается, что изменения ХС в широком ряду комплексов  $\text{SnCl}_4L_2$  довольно велики, чтобы отнести их за счет изменения числа 5p, d-электронов. Это подразумевает, что основной вклад в ХС вносят 5s-электроны, причем ХС тем выше, чем выше донорные свойства лигандов. Абсолютно идентичная картина наблюдается и для комплексов пятихлористой сурьмы. Поэтому нами рассмотрено влияние увеличения донорно-акцепторной связи на заселе-



ности и заряды на атомах сурьмы и хлора, а также на величину изомерного сдвига.

В таблице в качестве примера приведены заселенности *s*- и *p*-орбиталей атома сурьмы для комплекса с пиридином в зависимости от длины донорно-акцепторной связи *Sb-L*. Расчеты показывают прежде всего, что при переходе от самого акцептора  $SbCl_5$  к модельным комплексам происходит увеличение положительного заряда на атоме сурьмы, отрицательного заряда на атомах хлора, а также увеличение электронной плотности на акцепторе в целом. Это подтверждает донорно-акцепторный механизм образования химических связей в комплексах, в результате чего осуществляется перенос заряда с лигандов (органических молекул) на акцептор ( $SbCl_5$ ).

Например, для комплекса с  $OPCl_3$  изменения зарядов на атомах сурьмы и хлора имеют следующий вид:

$$q_{Sb} = -0,28 R_{Sb-L} + 1,86 \quad (r=0,982, s=0,02), \quad (4)$$

$$-q_{Cl} = -0,10 R_{Sb-L} + 0,50 \quad (r=0,968, s=0,01), \quad (5)$$

Выяснив, как ведут себя названные характеристики при увеличении длины донорно-акцепторной связи, можно получить представление об их поведении при уменьшении донорной способности лигандов. Ранее предполагалось [12], что увеличение переноса электронной плотности от *L* к  $SbCl_5$  должно приводить к уменьшению положительного заряда на атоме сурьмы и, как следствие, к увеличению отрицательного заряда на атомах хлора. Проведенный расчет показал ошибочность такой концепции. Видно, что отрицательный заряд на атомах хлора действительно возрастает, однако положительный заряд на атоме сурьмы при этом не уменьшается, а растет. Подобного поведения зарядов на атомах сурьмы и хлора следует ожидать, по-видимому, и при увеличении донорной силы лиганда.

Из сказанного выше ясно, что в принципе химический сдвиг центрального атома в спектре Мёссбауэра зависит от заселенности как *s*-, так и *p*-орбиталей атома сурьмы [12, 13]:

$$d = aN_s + bN_p. \quad (6)$$

Полученные нами зависимости, например, для комплекса с диметилформамидом:

$$N_p = 0,26 R_{Sb-L} + 1,37 \quad (r=0,993, s=0,01), \quad (7)$$

$$N_s = 0,03 R_{Sb-L} + 1,76 \quad (r=0,972, s=0,02) \quad (8)$$

показывают, что коэффициенты при длине донорно-акцепторной связи существенно больше для корреляционной зависимости заселенности *Sp*-орбитали атома сурьмы, чем *5s*-орбитали. Это указывает на то, что изменения заселенностей *p*-орбиталей атома сурьмы в основном отражаются на длине донорно-акцепторной связи. Можно предполагать, что и химический мёссбауэровский

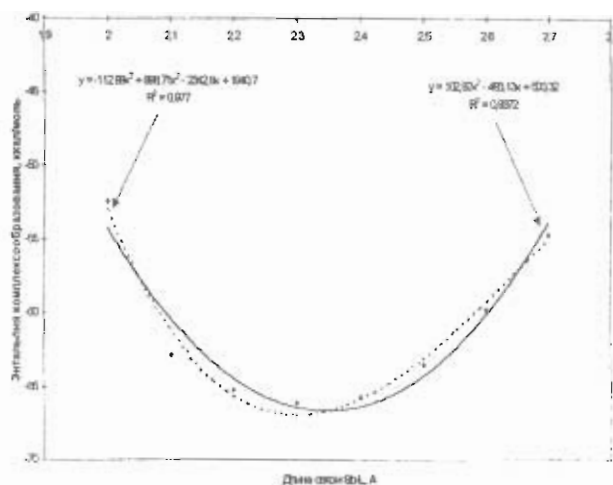


Рис. 1. Зависимости энтальпии комплексообразования от длины связи *Sb-L* в комплексе  $SbCl_5Py$

сдвиг также будет в большей степени зависеть от заселенности *p*-орбиталей атома сурьмы, чем от заселенности *s*-орбиталей. Если в результате изучения мёссбауэровских спектров комплексов  $SnCl_4L_2$  было показано [7], что в результате повышения *5s*-электронной плотности лигандами с высокими донорными свойствами, ХС определяется в основном заселенностью *5s*-орбитали атома олова, то проведенный расчет комплексов  $SbCl_5L$  дает противоположные результаты. Это означает, что в данных комплексах эффекты экранирования, по-видимому, играют определяющую роль. Такие различные зависимости легко объяснимы с точки зрения энергий *ns* - *np* разделения, которые для атома сурьмы существенно больше, чем для атома олова [7], что означает больший вклад *s*-орбиталей центрального атома в химические связи с лигандами для комплексов олова.

Комплексообразование таких акцепторов, как пятихлористая сурьма, происходит в основном с полной перестройкой всей электронной системы молекулы и образованием одной или нескольких дополнительных вакантных орбиталей. Естественно, что при перестройке геометрии молекул происходят и изменения параметров связей *Sb-Cl* (ионность, двоесвязность и т.п.). Приблизительно весь процесс можно представить в форме двух этапов: 1) перестройка молекулы акцептора  $SbCl_5$  и 2) перенос заряда на образующиеся вакантные молекулярные орбитали с соответствующим распределением этого заряда. Долю его, находящуюся только в системе акцептора, можно считать степенью переноса заряда. С определенной достоверностью можно также полагать, что в пределах какого-то ограниченного ряда комплексов одного и того же акцептора с различными донорами изменение электронного распределения только за счет перестройки электронной системы акцептора для всех комплексов будет примерно одинаково.

во. Тогда изменение внутри этого ряда при переходе от одного комплекса к другому можно полностью отнести за счет переноса заряда. Увеличение степени переноса будет способствовать увеличению электронной плотности в *s*-системе акцептора и, следовательно, уменьшению градиента поля на атомах X. Сокращение длины донорно-акцепторной связи моделирует увеличение переноса электронной плотности с донора на акцептор и, следовательно, согласно ниже приведенному соотношению, должно приводить к уменьшению частоты ЯКР  $^{35}\text{Cl}$ .

Для анализа сдвигов частот ЯКР обычно используется соотношение, вытекающее из теории Дейли-Таунса [14]:

$$v/v_{\text{от}} = U_p = (N_x + N_y)/2 - N_x = (1 - \alpha)(1 - I) - (3/2 - \alpha)\pi. \quad (9)$$

В этом соотношении  $v$  – частота ЯКР атома хлора в соединении,  $v_{\text{от}}$  – частота ЯКР одного р-электрона,  $U_p$  – число несбалансированных р-электронов,  $\alpha$  – степень *sp*-гибридизации,  $I$  – степень ионного и  $\pi$ -ковалентного характеров связи.

Комплексы пятихлористой сурьмы имеют октаэдрическое строение [5], причем четыре атома хлора обычно лежат в плоскости, а пятый атом выходит из плоскости. Отсюда нетрудно видеть, что из пяти атомов хлора четыре должны быть

эквивалентными друг другу (экваториальные атомы), а один – неэквивалентным (аксиальный, находящийся в транс-положении к молекуле донора). Таким образом, без учета стерических факторов и кристаллических эффектов спектр ЯКР  $^{35}\text{Cl}$  комплексов  $\text{SbCl}_5\text{L}$  должен состоять из двух линий с соотношением интенсивностей 4:1. Действительно, экспериментально наблюдаются в основном именно такие спектры [7]. В нашем расчете также получились различные значения частот ЯКР для аксиальных и экваториальных атомов хлора (табл.) верхние значения соответствуют аксиальным атомам хлора, нижние – экваториальным атомам. Зависимости частот для аксиального и экваториальных атомов хлора от длины донорно-акцепторной связи, например, для комплекса с диоксаном имеют следующий вид:

$$v^{35}\text{Cl}(\text{экв.}) = 5,8R_{\text{Sb-L}} + 25,4 \quad (r=0,999, s=0,1), \quad (10)$$

$$v^{35}\text{Cl}(\text{акс.}) = 4,0R_{\text{Sb-L}} + 27,5 \quad (r=0,954, s=0,3). \quad (11)$$

Из зависимостей (10), (11) следует, что с уменьшением расстояния *Sb-L* частоты ЯКР как аксиального атома хлора, так и экваториальных атомов падают. Согласно соотношению (9) это указывает на то, что с увеличением прочности донорно-акцепторной связи увеличивается ионный характер связей *Sb-Cl*.

Работа выполнена при поддержке МО РФ.

## Литература

1. Gutmann V. // *Coord. Chem. Rev.* 1975. V. 15. № 1. P. 207-245.
2. Полещук О.Х. Электронное строение комплексов непереходных элементов с органическими лигандами: Дис. ... докт. хим. наук. Иркутск: ИГУ, 1997. 346 с.
3. Dewar M.J.S., Stewart J.J.P. // *QCPE Bull.* 1986. V. 6. № 3. P. 506-570.
4. Полещук О.Х., Доленко Г.Н., Латошинска И. // *Координационная химия.* 1997. Т. 23. № 10. С. 740-743.
5. Гурьянова Е.Н., Гольдштейн И.П., Ромм И.П. Донорно-акцепторная связь. М.: Химия, 1973. 400 с.
6. Комплексообразование в неводных растворах. М.: Наука, 1989. 256 с.
7. Mayer I. // *Chem. Phys. Lett.* 1983. V. 97. № 1. P. 270-275.
8. Жидомиров Г.М., Багатурьянц А.А., Абронин И.А. Прикладная квантовая химия. М.: Химия, 1979. 296 с.
9. Гольданский В.И., Махаров Е.Ф., Стукан Р.А. // *Доклады АН СССР.* 1964. Т. 156. № 2. С. 400-406.
10. Ichiba S., Mishima M., Sakai H. et al. // *Bulletin of Chemical Society of Japan.* 1968. V. 41. № 1. P. 49-56.
11. Варнек В.А., Юрченко Э.Н., Коган В.А. и др. // *Ж. структ. химии.* 1975. Т. 16. № 3. С. 359-366.
12. Варнек В.А., Полещук О.Х., Мазалов Л.Н. и др. // *Ж. структ. химии.* 1982. Т. 23. № 1. С. 98-101.
13. Варнек В.А., Варнек А.А. // *Ж. структ. химии.* 1997. Т. 38. № 6. С. 1160-1164.
14. Семин Г.К., Бабушкина Т.А., Якобсон Г.Г. Применение ядерного квадрупольного резонанса в химии. Л.: Химия, 1972. 536 с.