

УДК 547.67.07:513.83

**ПРИМЕНЕНИЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИНДЕКСОВ В КОРРЕЛЯЦИОННОМ АНАЛИЗЕ N-АЛКИЛКАРБОКСИИМИДОВ ЦИКЛИЧЕСКИХ 1,2-ДИКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ**

© 2010 М.С. Салахов\*, О.Т. Гречкина, Б.Т. Багманов

*Институт полимерных материалов национальной академии наук Азербайджана, Сумгайыт**Статья поступила 29 января 2009 г.*

Исследованы корреляционные зависимости топологических индексов с физико-химическими параметрами N-алкилкарбоксиимидов циклических дикарбоновых кислот и проведен сравнительный анализ полученных результатов с корреляциями, связывающими эти параметры.

**Ключевые слова:** N-алкилкарбоксиимиды циклических 1,2-дикарбоновых кислот, теоретико-информационные индексы, константа кислотной ионизации, химический сдвиг протонов карбоксильных групп, химический сдвиг олефиновых протонов.

Поиск закономерностей в характере изменения различных свойств молекул в зависимости от их строения является одной из важнейших задач теоретической органической химии. В последнее время органическая химия переходит к количественной трактовке реакционной способности органических соединений и использованию корреляционного анализа. В литературе имеется достаточно большое число различных количественных зависимостей структура—свойство, предложенных в основном для различных гомологических рядов органических соединений [ 1—5 ], тем не менее проблема построения таких зависимостей по-прежнему остается актуальной задачей [ 6, 7 ]. При использовании топологического индекса важно знать, способен ли последний отражать структурные особенности молекул или дублирует информацию, получаемую с помощью других индексов, так как не все из них имеют ясный физический смысл и равноценны по своей корреляционной способности.

Известно, что реакция Дильса—Альдера благодаря своей высокой надежности количественных характеристик стала основанием для новых теоретических концепций и воззрений в органической химии [ 8, 9 ]. Выявление свойств аддуктов, связанных с целенаправленным синтезом таких соединений, ставит задачу дальнейшего расширения и углубления теоретических исследований этой реакции.

Ранее нами были проведены кинетические исследования [ 10—14 ] по диенофильной активности ангидридов и N-замещенных имидов тетрагидрофталевых и эндиковых кислот в реакции Дильса—Альдера с гексахлорциклопентадиеном (ГХЦПД) и кислотности N-алкилкарбоксиимидов циклических 1,2-дикарбоновых кислот [ 15, 16 ]. В связи с тем, что изучение зависимостей свойств аддуктов реакции диенового синтеза от структуры их молекул может дать ключ к решению проблемы прогнозирования свойств таких соединений, целью настоящей работы является попытка установления корреляционных зависимостей топологических индексов (ТИ) с некоторыми физико-химическими параметрами соединений ряда N-замещенных имидоуксусных кислот серии ненасыщенных 1,2-дикарбоновых кислот (I—V), имеющих циклы разной природы и жесткости, синтез которых был осуществлен ранее [ 17, 18 ], и проведение сравнительного анализа полученных результатов с взаимными корреляциями, связывающими эти параметры.

---

\* E-mail: salahov\_mustafa@mail.ru

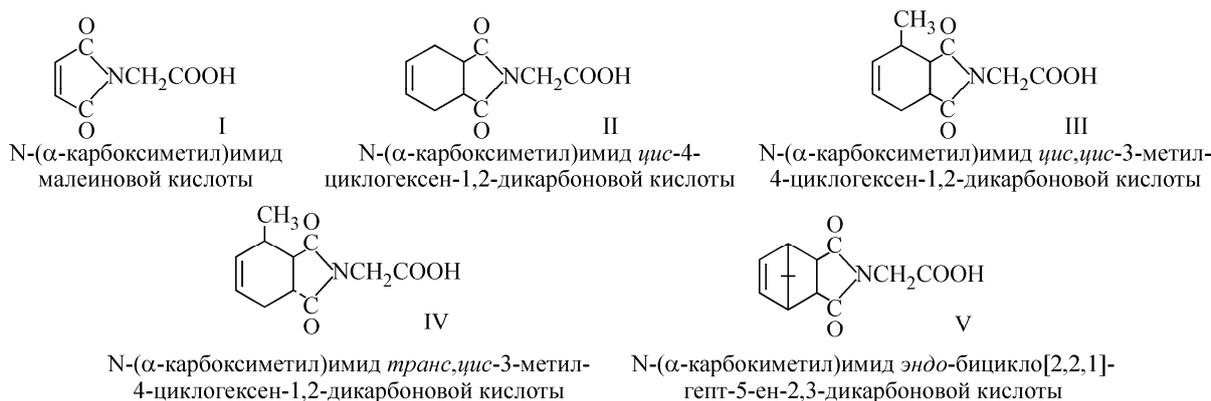


Схема 1

Для реализации поставленной цели из всего многообразия топологических индексов нами были выбраны наиболее используемые в корреляционном анализе индексы Винера [ 8 ], Рандича [ 4 ] и теоретико-информационные индексы или индексы симметрии окрестности, последние из которых, как мы показали [ 19 ], имеют то преимущество, что учитывают не только ближайшие, но и отдаленные взаимодействия в молекуле, тем самым обеспечивают наиболее полное описание структуры молекулы.

При рассмотрении ПМР-спектров исследуемых имидокарбоновых кислот I—V нами обнаружено существование линейной корреляции между химическими сдвигами олефиновых протонов  $\delta_{\text{H}}(\text{CH}=\text{CH})$  и протонами карбоксильных групп  $\delta_{\text{H}}(\text{COOH})$  (рис. 1). Наличие такой корреляции позволяет делать вывод о существовании линейной зависимости между константой скорости реакции ( $\lg k$ ) соединений I—V в реакции диеновой конденсации с ГХЦПД и величинами константы кислотной ионизации  $pK_{\alpha}$  (рис. 2). Было обнаружено, что определяющее влияние на кислотность соединений оказывает имидный фрагмент молекулы и, следовательно, группу А можно рассматривать как варьируемый заместитель, что позволило использовать уравнение Тафта для соединений I—V:  $pK_{\alpha} = pK_{\alpha}^0 + \rho\sigma_{\text{R}}^*$ .

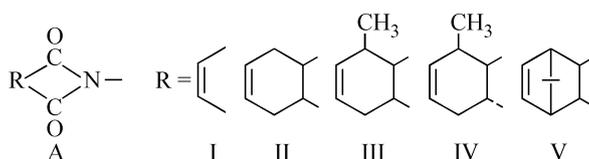


Схема 2

Получены значения  $\sigma_{\text{R}}^*$ , которые отражают суммарное влияние различных по стереохимическим и электронным свойствам заместителей, содержащих циклоимидный фрагмент, на свободную карбоксильную группу и установлена зависимость между  $\sigma_{\text{R}}^*$  и химическими сдвигами  $\delta_{\text{H}}(\text{COOH})$  протонов карбоксильной группы соединений I—V (рис. 3).

На полученных графиках (см. рис. 1—3) видно, что точка I, соответствующая N-(α-карбоксиметил)имиду малеиновой кислоты удалена от точек, соответствующих соединениям II—V, что объясняется отдаленностью N-заместителей от двойной связи C=C в кольцах для II—V.

Исходя из существования линейных корреляций (см. рис. 1—3), нами осуществлена попытка установления зависимости между ТИ соединений I—V и параметрами, участвующими в этих корреляциях.

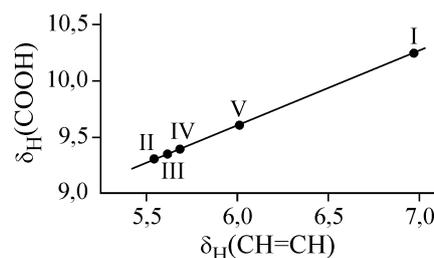


Рис. 1. Зависимость  $\delta_{\text{H}}(\text{COOH})$  от  $\delta_{\text{H}}(\text{CH}=\text{CH})$  для соединений I—V

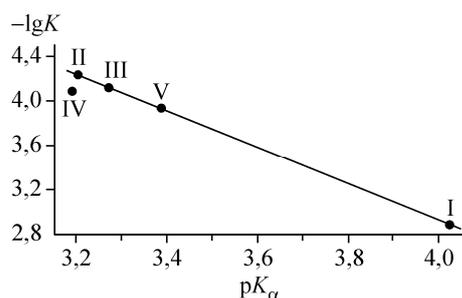


Рис. 2. Зависимость константы скорости реакции ( $-\lg K$ ) от  $pK_a$  для соединений I—V

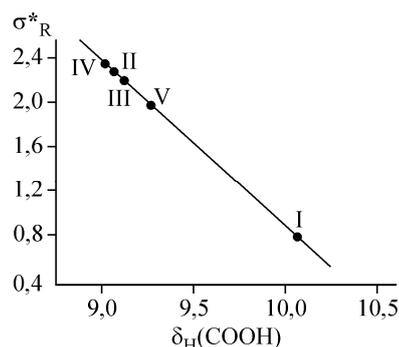


Рис. 3. Зависимость  $\sigma_R^*$  от  $\delta_H(\text{COOH})$  для соединений I—V

Были рассчитаны теоретико-информационные индексы информационного содержания графа относительно окрестности  $k$ -го порядка в расчете на одну вершину ( $IC_k$ ), полного информационного содержания ( $TIC_k$ ), структурного информационного содержания ( $SIC_k$ ) и комплементарного информационного содержания ( $CIC_k$ ) для соединений I—V по формулам (1)—(4) для  $k = 0—2$  [20]:

$$IC_k = -\sum_{i=1} p_i \cdot \log_2 p_i, \quad p_i = n_i / n, \quad (1)$$

$$TIC_k = n \cdot IC_k, \quad (2)$$

$$SIC_k = IC_k / \log_2 n, \quad (3)$$

$$CIC_k = \log_2 n - IC_k. \quad (4)$$

Индекс Винера определяли как полусумму топологических расстояний между всеми  $N$  атомами в молекулярном графе и рассчитывали по формуле [21]:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{i=1, j=1}^N d_{ij}, \quad (5)$$

где  $d_{ij}$  —  $i$ - и  $j$ -элемент матрицы расстояний, который показывает наикратчайшее расстояние между вершинами  $i$  и  $j$  в графе. Элементы матрицы вычислены по формулам:

$$d_{ii} = 1 - \frac{6}{z_i}, \quad (6)$$

$$d_{ij} = \sum b \frac{36}{z_i z_j}, \quad (7)$$

где  $z_i$  и  $z_j$  — заряд ядра атомов  $i$  и  $j$ , соединенных данной связью;  $b$  — величина, характеризующая порядок связи.

Индекс связности Рандича, представляющий собой информацию о числе атомов в молекуле, их связи между собой, о степени разветвления молекулы [22], вычисляется по формуле:

$${}^{(1)}\chi = \sum (\delta_i \cdot \delta_j)^{-1/2}, \quad (8)$$

где  $\delta_i$  и  $\delta_j$  — степени вершин молекулярного графа. Они соответствуют связям, соединяющим атомы  $i$  и  $j$ , и отображают состав графа. Суммирование проводится по всем ребрам графа.

Как видно из табл. 1 индексы  $IC_k$ ,  $TIC_k$ ,  $SIC_k$ ,  $CIC_k$  ( $k = 0—2$ ),  ${}^{(1)}\chi$  и  $W$  различают имидокарбоновые кислоты I—V в зависимости от изменения цикла. Для построения корреляционных зависимостей из теоретико-информационных индексов нами был выбран индекс  $IC_2$ , так как индексы второго порядка являются более информативными, чем индексы нулевого и первого порядков [19]. Используя данные табл. 1 для соединений I—V, мы построили корреляционные зависимости  $f(IC_2) - pK_a$ ,  $f(IC_2) - \delta_H(\text{COOH})$ ,  $f({}^{(1)}\chi) - pK_a$  и  $f({}^{(1)}\chi) - \delta_H(\text{COOH})$  (рис. 4, 5).

Т а б л и ц а 1

Индексы  $IC_k$ ,  $TIC_k$ ,  $SIC_k$ ,  $CIC_k$  ( $k = 0-2$ ),  ${}^{(1)}\chi$ ,  $W$ ,  $T_{пл}$  ( $^{\circ}C$ ),  $pK_{\alpha}$ ,  $\delta_H(COOH)$ ,  $\delta_H(CH=CH)$  и  $\sigma_R^*$  соединений I—V

Соединение	${}^{(1)}\chi$	W	$IC_0$	$TIC_0$	$CIC_0$	$SIC_0$	$IC_1$	$TIC_1$	$CIC_1$	$SIC_1$
I	3,810	156,582	1,806	28,896	2,194	0,452	2,953	47,248	1,047	0,738
II	5,778	363,43	1,650	42,907	3,050	0,351	3,39	88,140	1,310	0,721
III	6,204	423,358	1,609	46,657	3,249	0,331	2,897	84,013	1,961	0,239
IV	6,204	423,358	1,609	46,657	3,249	0,331	2,897	84,013	1,961	0,239
V	6,294	412,608	1,639	42,279	3,166	0,246	2,903	78,381	1,852	0,611
Соединение	$IC_2$	$TIC_2$	$CIC_2$	$SIC_2$	$pK_{\alpha}$	$\delta_H(COOH)$	$\delta_H(CH=CH)$	$\sigma_R^*$	$T_{пл}$	
I	3,375	54	0,625	0,844	4,12	10,15	6,84	0,88	99—102	
II	4,362	113,412	0,338	0,928	3,20	9,05	5,75	2,34	108—110	
III	4,164	120,756	0,694	0,857	3,26	9,14	5,82	2,24	84—85	
IV	4,164	120,756	0,694	0,857	3,16	9,06	5,76	2,39	90—91	
V	3,864	104,328	0,891	0,812	3,38	9,33	6,03	2,05	146—148	

Выявлено существование линейных зависимостей  $f({}^{(1)}\chi) \rightarrow pK_{\alpha}$ ,  $f({}^{(1)}\chi) \rightarrow \delta_H(COOH)$ ,  $f(IC_2) \rightarrow pK_{\alpha}$  и  $f(IC_2) \rightarrow \delta_H(COOH)$  (см. рис. 4, 5) для соединений II, III, V, которые выражены рассчитанными по методу наименьших квадратов [ 23 ] регрессионными уравнениями (9)—(12):

$$pK_{\alpha} = -0,368 \cdot IC_2 + 4,799, \tag{9}$$

$$\delta_H(COOH) = -0,536 \cdot IC_2 + 11,387, \tag{10}$$

$$pK_{\alpha} = 0,483 \cdot {}^{(1)}\chi + 6,227, \tag{11}$$

$$\delta_H(COOH) = 0,285 \cdot {}^{(1)}\chi + 1,545. \tag{12}$$

Уравнения регрессии (9) и (10) получены с погрешностью  $\bar{\sigma}_{ост} = 0,01$ , соотношения (11) и (12) имеют погрешность  $\bar{\sigma}_{ост}$  0,07 и 0,1 соответственно, что указывает на более строгий характер корреляционных зависимостей  $f(IC_2) \rightarrow pK_{\alpha}$  и  $f(IC_2) \rightarrow \delta_H(COOH)$ , чем соотношения  $f({}^{(1)}\chi) \rightarrow pK_{\alpha}$ ,  $f({}^{(1)}\chi) \rightarrow \delta_H(COOH)$ .

N-( $\alpha$ -карбоксиметил)имид *транс*-,*цис*-3-метил-4-циклогексен-1,2-дикарбоновой кислоты IV незначительно отклоняется от выявленных зависимостей в силу того, что соединения IV

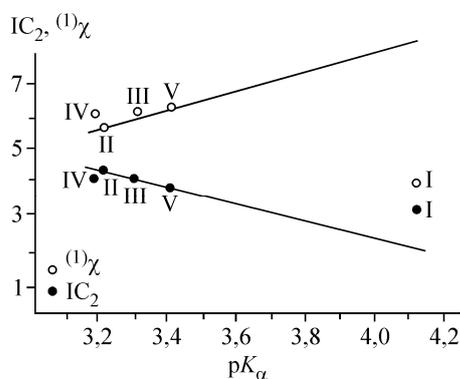


Рис. 4. Зависимость индексов  $IC_2$ ,  ${}^{(1)}\chi$  от  $pK_{\alpha}$  для соединений I—V

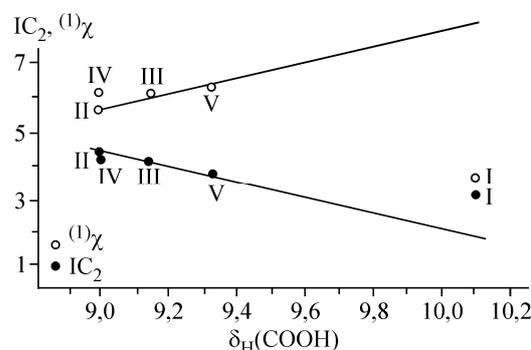


Рис. 5. Зависимость индексов  $IC_2$ ,  ${}^{(1)}\chi$  от  $\delta_H(COOH)$  соединений I—V

и III имеют одинаковые значения ТИ, так как они являются пространственными изомерами одного и того же соединения, а ТИ представляют численное выражение двумерного изображения молекулы и не способны различать стереоизомеры.

Вследствие того, что цикл N-( $\alpha$ -карбоксиметил)имида малеиновой кислоты отличается от циклов соединений II—V, соединение I отклоняется от найденных корреляционных зависимостей (9)—(12). Используя соотношения (9), (11), мы вычислили значения  $pK_\alpha$  для соединения I, которые равны соответственно 3,56 и 2,63, следовательно N-( $\alpha$ -карбоксиметил)имид малеиновой кислоты меньше отклоняется от корреляционной зависимости  $f(IC_2) - pK_\alpha$ , чем от  $f(^{(1)}\chi) - pK_\alpha$  (см. рис. 4). Рассчитав значения химических сдвигов протонов карбоксильных групп  $\delta_H(\text{COOH})$  для I по уравнениям (10) и (12), получили соответственно  $\delta_H(\text{COOH})$  9,58 и 8,07, следовательно, отклонение N-( $\alpha$ -карбоксиметил)имида малеиновой кислоты от зависимости  $f(IC_2) - \delta_H(\text{COOH})$  менее значительно, чем от  $f(^{(1)}\chi) - \delta_H(\text{COOH})$  (см. рис. 5).

Из существования линейных корреляций между химическими сдвигами олефиновых протонов  $\delta_H(\text{CH}=\text{CH})$  и протонами карбоксильных групп  $\delta_H(\text{COOH})$  (см. рис. 1) и между  $\delta_H(\text{COOH})$  и индексами  $IC_2$  и  $^{(1)}\chi$  (10), (12) следует наличие зависимостей  $f(IC_2) - \delta_H(\text{CH}=\text{CH})$  и  $f(^{(1)}\chi) - \delta_H(\text{CH}=\text{CH})$  для II, III и V. Уравнение (13), описывающее зависимость между индексом  $IC_2$  и химическим сдвигом  $\delta_H(\text{CH}=\text{CH})$  для соединений II, III, V, имеет меньшую погрешность, чем уравнение (14) для  $f(^{(1)}\chi) - \delta_H(\text{CH}=\text{CH})$ :

$$\delta_H(\text{CH}=\text{CH}) = -0,608 \cdot IC_2 + 8,378, \quad \bar{\sigma}_{\text{ост}} = 0,04, \quad (13)$$

$$\delta_H(\text{CH}=\text{CH}) = 0,391 \cdot ^{(1)}\chi + 3,481, \quad \bar{\sigma}_{\text{ост}} = 0,18. \quad (14)$$

Следствием зависимостей  $f(IC_2) - pK_\alpha$  (9),  $f(^{(1)}\chi) - pK_\alpha$  (11) и  $f(-\lg K) - pK_\alpha$  (см. рис. 2) является существование корреляций между константой скорости реакции ( $-\lg K$ ) и ТИ  $IC_2$  и  $^{(1)}\chi$  из соотношений (10) и (12) и зависимости  $f(\sigma_R^*) - \delta_H(\text{COOH})$  (см. рис. 3) соблюдаются корреляционные зависимости между  $\sigma_R^*$  и индексами информационного содержания графа в расчете на одну вершину второго порядка и Рандича соединений II, III, V, причем уравнение (15), рассчитанное для  $f(IC_2) - \sigma_R^*$ , имеет меньшую погрешность по сравнению с уравнением (16) для  $f(^{(1)}\chi) - \sigma_R^*$ .

$$\sigma_R^* = 0,584 \cdot IC_2 - 0,202, \quad \bar{\sigma}_{\text{ост}} = 0,01, \quad (15)$$

$$\sigma_R^* = -0,503 \cdot ^{(1)}\chi + 3,481, \quad \bar{\sigma}_{\text{ост}} = 0,12. \quad (16)$$

Мы обнаружили, что ТИ Винера, Рандича и теоретико-информационные индексы  $IC_k$ ,  $TIC_k$ ,  $SIC_k$ ,  $CIC_k$  ( $k = 0-2$ ) не коррелируют с  $T_{\text{пл}}$  соединений I—V (см. табл. 1). Также не обнаружено существования корреляционных зависимостей между индексом Винера и  $pK_\alpha$ ,  $\delta_H(\text{COOH})$ ,  $\delta_H(\text{CH}=\text{CH})$  и  $\sigma_R^*$  исследуемых соединений.

Таким образом, нами показана предпочтительность использования теоретико-информационных индексов, в частности индекса  $IC_2$  относительно ТИ  $W$  и  $^{(1)}\chi$ , для установления корреляций ТИ—свойство ряда N-алкилкарбоксиметилимидов циклических 1,2-дикарбоновых кислот, так как  $IC_2$ , различая имидокарбоновые кислоты I—V в зависимости от изменения циклов, хорошо коррелирует с  $pK_\alpha$ ,  $\delta_H(\text{COOH})$ ,  $\delta_H(\text{CH}=\text{CH})$  и  $\sigma_R^*$  соединений II, III, V и, следовательно, может использоваться для предсказания значений этих величин для имидокарбоновых кислот исследуемого ряда в тех случаях, когда экспериментальные данные отсутствуют. Предпочтительность теоретико-информационных индексов относительно ТИ  $W$  и  $^{(1)}\chi$  обусловлена тем, что для получения первых из них множество вершин молекулярного графа разбивается на непересекающиеся множества на основе соотношения эквивалентности, определенного относительно степеней симметрии окрестности, тем самым наиболее полно учитывается взаимное влияние атомов в молекуле.

В качестве примера рассчитаны индексы  $IC_2$  для соединений VI—VIII и с помощью уравнений (9), (10), (13) и (15) найдены значения  $\delta_H(\text{COOH})$ ,  $\delta_H(\text{CH}=\text{CH})$ ,  $\sigma_R^*$  и  $pK_\alpha$  этих соединений.



Схема 3

Предсказанные нами значения  $pK_\alpha$ ,  $\delta_H(\text{COOH})$ ,  $\delta_H(\text{CH}=\text{CH})$  и  $\sigma_R^*$  соединения VI подтверждаются полученными ранее данными [24], а значения, вычисленные для VII, отклоняются от экспериментальных данных [24], что объясняется отсутствием планарности циклогексанового кольца, с одной стороны, и индукционным влиянием  $\pi$ -электронов — с другой, у соединения VII, которое имеет место в ароматическом кольце N-(α-карбоксиметил)имида фталевой кислоты VI. Что же касается индукционного влияния  $\pi$ -электронов циклогексенового кольца в соединениях II—V и VIII, то существование корреляции ТИ—свойство обусловлено  $\pi$ -электронным влиянием двойной связи C=C через пространство, так как наличие 1,4-бипланарных группировок обеспечивает их сближение (а). Сказанное подтверждается жесткой пространственной структурой бициклопентенового кольца соединения V, однозначно моделирующей строение циклогексенового фрагмента (б).

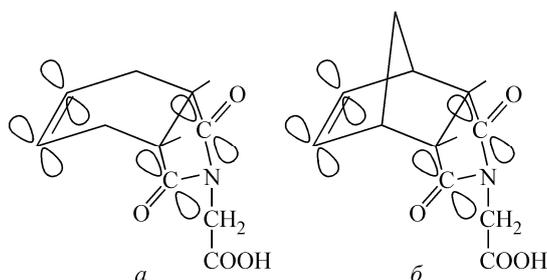


Схема 4

Из приведенных данных (см. табл. 1, 2) вытекает, что при удалении метильной группы от имидного фрагмента в молекулах ряда монометилзамещенных N-(α-карбоксиметил)имидов 4-циклогексен-1,2-дикарбоновой кислоты (4-ЦГДК) III, VIII значение индекса  $IC_2$  уменьшается (см. табл. 1, 2) и, как следует из зависимостей (9), (10), (13) и (15), значения  $pK_\alpha$ ,  $\delta_H(\text{COOH})$  и  $\delta_H(\text{CH}=\text{CH})$  будут увеличиваться, а  $\sigma_R^*$  — уменьшаться, что хорошо согласуется с полученными ранее выводами [25, 26]. Так, в работе [25] показано, что для монометилзамещенных 4-ЦГДК аналогично существует линейная корреляционная зависимость между  $pK_1$  и  $IC_k$ , которая подобно зависимости  $f(IC_2) - pK_\alpha$  (9) также носит антибатный характер. Увеличение значения константы кислотной ионизации при переходе метильной группы из положения 3 в положение 4 циклогексенового кольца в соединениях III, VIII подтверждается увеличением значения  $pK_1$  *цис*-изомеров метил-4-циклогексен-1,2-дикарбоновой кислоты при аналогичном изменении положения метильной группы [26].

Т а б л и ц а 2

Индекс  $IC_2$  и рассчитанные значения  $pK_\alpha$ ,  $\delta_H(\text{COOH})$ ,  $\delta_H(\text{CH}=\text{CH})$  и  $\sigma_R^*$  для VI—VIII

Соединение	$IC_2$	$\delta_H(\text{COOH})$	$\delta_H(\text{CH}=\text{CH})$	$\sigma_R^*$	$pK_\alpha$
VI	3,457	10,1	6,28	1,81	3,54
VII	3,545	9,5	6,22	1,86	3,49
VIII	3,935	9,3	5,98	2,09	3,35

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Скворцова М.И., Федяев К.С., Палюлин В.А., Зефиоров Н.С. // Изв. РАН. Сер. хим. – 2004. – № 8. – С. 1527.
2. Смоленский Е.А., Власова Г.В., Платунов Д.Ю. и др. // Там же. – 2006. – № 9. – С. 1454.
3. Смоленский Е.А., Рыжов А.Н., Бавыкин В.М. и др. // Там же. – 2007. – № 9. – С. 1619.
4. Курбатова С.В., Финкельштейн Е.Е., Колосова Е.А. и др. // Журн. структур. химии. – 2004. – **45**, № 1. – С. 150.
5. Красных Е.Л. // Там же. – 2008. – **49**, № 6. – С. 1026.
6. Радченко Е.В., Палюлин В.А., Зефиоров Н.С. // Росс. хим. журн. – 2006. – **50**, № 2. – С. 76.
7. Гальберштам Н.М., Баскин И.И., Палюлин В.А. и др. // Успехи химии. – 2003. – **72**, № 7. – С. 706.
8. Урядов В.Г., Офицеров Е.Н. // Химия и компьютерное моделирование. Бутлеровские сообщения. – 2002. – № 11. – С. 7.
9. Урядов В.Г., Офицеров Е.Н. // Там же. – 2003. – № 1. – С. 1.
10. Салахов М.С., Мусаева Н.Ф., Гусейнов М.М. и др. // Азерб. хим. журн. – 1976. – № 5. – С. 32.
11. Салахов М.С., Мусаева Н.Ф., Алескерев А.А. и др. // В Сб.: Реакционная способность органических соединений. – Тарту, 1978. – **15**, № 2. – С. 272.
12. Мусаева Н.Ф., Салахов М.С., Сулейманов С.Н. // Там же. – 1979. – **16**, № 1. – С. 65.
13. Мусаева Н.Ф., Салахов М.С., Исрафилов А.И. и др. // Докл. АН АзССР. – 1982. – **38**, № 7. – С. 41.
14. Мусаева Н.Ф., Гасанова А.А., Салахов М.С. // Там же. – 1984. – **40**, № 3. – С. 44.
15. Салахов М.С., Гусейнов М.М., Гусейнов Э.М. и др. // Журн. орган. химии. – 1976. – **12**, № 8. – С. 1719.
16. Салахов М.С., Трейвус Э.М., Салахова Р.С. и др. // В Сб.: Вопросы стерохимии. – Киев—Одесса, 6. – 1977. – С. 50.
17. Салахов М.С., Тейвус Э.М., Умаева В.С. и др. // Сб.: Исследования в области синтеза полимерных и мономерных подуктов. – Баку. – 1979. – С. 3.
18. Салахов М.С., Каткова И.В., Умаева В.С. и др. // Азерб. хим. журн. – 1980. – № 2. – С. 63.
19. Салахов М.С., Багманов Б.Т., Гречкина О.Т. и др. // Химические проблемы. – Баку. – 2008. – № 2. – С. 289.
20. Магнусон В., Харрис Д., Бейсак С. Топологические индексы, основанные на симметрии окрестностей: химические и биохимические применения // Химические приложения топологии и теории графов / Под ред. Р. Кинг. – М.: Мир, 1987.
21. Gutman I., Estrada E. // J. Chem. Inf. Comput. Sci. – 1996. – **36**. – Р. 541.
22. Рувре Д. Химические приложения топологии и теории графов / Под. ред. Р. Кинг. – М.: Мир, 1987.
23. Манита А.Д. Теория вероятностей и математическая статистика. – М.: Издат. отдел. УНЦ ДО, 2001. – 120 с.
24. Каткова И.В. Диеновая конденсация гексахлорциклопентадиена с N-алкил(арил)карбоксимидами ненасыщенных 1,2-дикарбоновых кислот: Дис. ... канд. хим. наук. – Сумгаит: Ин-т хлорорганического синтеза АН АзССР, 1985.
25. Салахов М.С., Багманов Б.Т., Гречкина О.Т. // Журн. структур. химии. – 2009. – **50**, № 1. – С. 183.
26. Салахов М.С., Исрафилов А.И., Шамилов Т.О. // Азерб. хим. журн. – 1973. – № 2. – С. 55.