

Научная статья

УДК 544.43:547-316

DOI: 10.26730/1999-4125-2023-3-52-59

ОЦЕНКА РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ПРЕДЕЛЬНЫХ ОДНОАТОМНЫХ И МНОГОАТОМНЫХ СПИРТОВ В РЕАКЦИЯХ ЭТЕРИФИКАЦИИ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**Пучков Сергей Вениаминович,
Непомнящих Юлия Викторовна**

Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева

*для корреспонденции: psv.toos@kuzstu.ru

**Информация о статье**

Поступила:

05 апреля 2023 г.

Одобрена после
рецензирования:

15 июня 2023 г.

Принята к публикации:

20 июня 2023 г.

Опубликована:

30 июня 2023 г.

Ключевые слова:спирты, квантово-химические
расчеты, эффективные
заряды, этерификация,
гидролиз, реакционная
способность**Аннотация.**

Для 12 одноатомных спиртов метанола, этанола, 1-пропанола, 2-пропанола, 1-бутанола, 2-метил-2-пропанола (трет-бутиловый спирт), 1-пентанола, 2,2-диметил-1-пропанола, 1-гексанола, 2-гексанола, 3-гексанола, циклогексанола в конформациях «кресло» и «ванна» и 5 многоатомных – 1,2-этандиола, 1,2-пропандиола, 1,3-пропандиола, 1,2,3-пропантриола (глицерин) и пентаэритрита были рассчитаны эффективные заряды на атомах кислорода. Геометрию всех структур оптимизировали методом функционала плотности (DFT) B3LYP / 6-311++G (d, p). Для анализа заселенности применяли метод натуральных валентных орбиталей (NBO) по натуральной схеме (NPA). Показано, что при снижении величины отрицательного заряда на атоме кислорода гидроксильной группы одноатомных предельных спиртов увеличивается скорость их этерификации карбоновыми кислотами. Оценен характер влияния величины отрицательного заряда на атоме кислорода спиртов на скорости лимитирующих стадий этерификации и гидролиза. Установлено, что для предельных многоатомных спиртов сохраняется такая же корреляция между величиной отрицательного заряда на атоме кислорода гидроксильной группы и реакционной способностью этих групп в реакциях этерификации, как и для предельных первичных одноатомных спиртов. Выявленные зависимости позволяют проводить сравнительную оценку реакционной способности спиртов в реакциях этерификации.

Для цитирования: Пучков С.В., Непомнящих Ю.В. Оценка реакционной способности предельных одноатомных и многоатомных спиртов в реакциях этерификации квантово-химическими методами // Вестник Кузбасского государственного технического университета. 2023. № 3 (157). С. 52-59. DOI: 10.26730/1999-4125-2023-3-52-59, EDN: JZKIDK

Реакции этерификации спиртов карбоновыми кислотами лежат в основе многих промышленных процессов получения растворителей, пластификаторов, полиэфирных смол, ароматизаторов и других ценных продуктов. Влияние строения спиртов на скорость реакции этерификации было подробно изучено Н.А. Меншуткиным и изложено им в ряде публикаций еще в конце 19-го столетия. В настоящее время исследования в этой области продолжают [1-8]. Известно, что первичные алифатические спирты, и особенно метанол, этерифицируются с наибольшей скоростью [1-3], причем удлинение и разветвление углеводородного скелета приводит к снижению скорости реакции этерификации [1, 2]. Скорость реакции этерификации

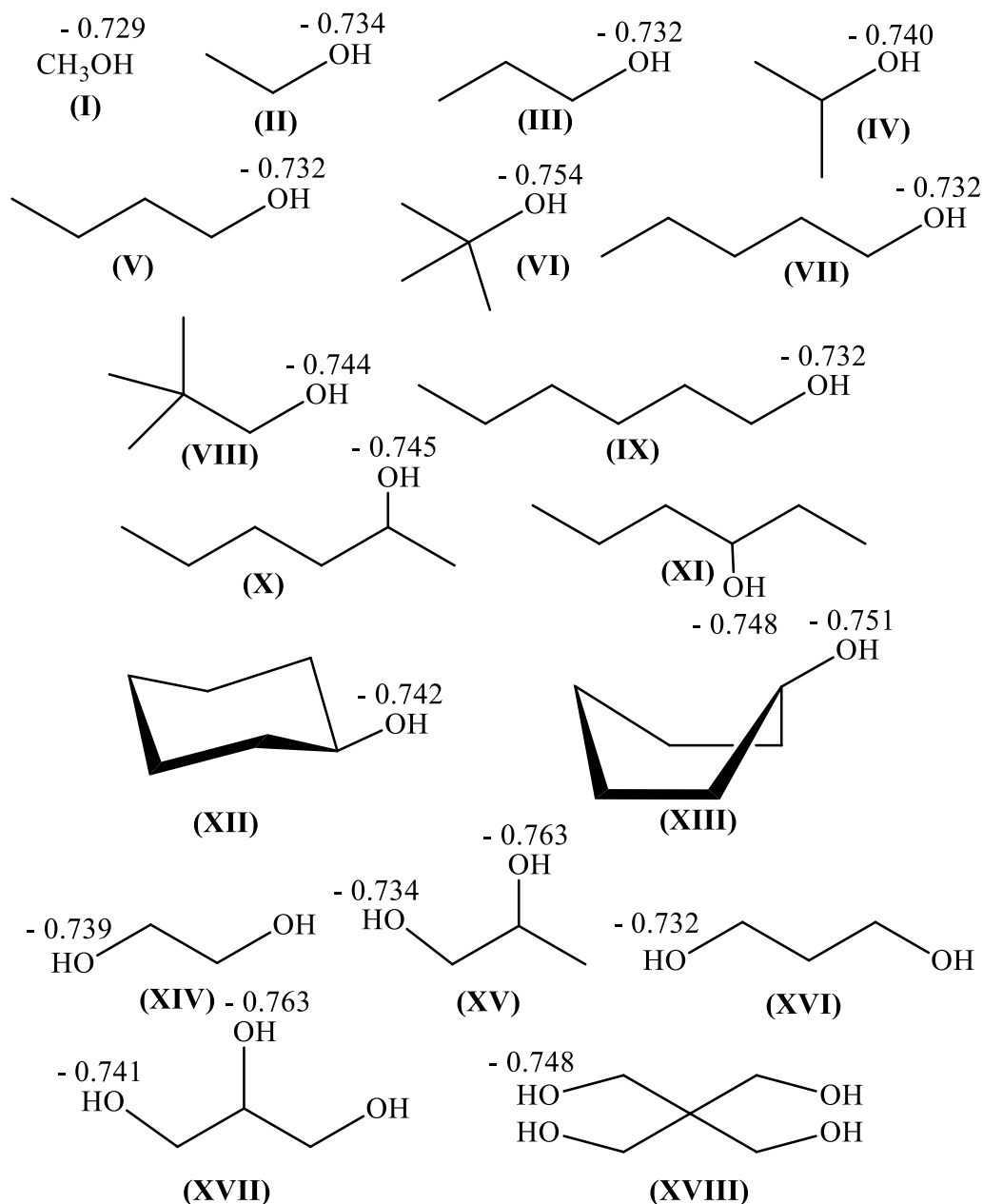


Рис. Эффективные заряды на атомах кислорода 12 одноатомных спиртов: 12 одноатомных спиртов: метанола (I), этанола (II), 1-пропанола (III), 2-пропанола (IV), 1-бутанола (V), 2-метил-2-пропанола (трет-бутиловый спирт) (VI), 1-пентанола (VII), 2,2-диметил-1-пропанола (VIII), 1-гексанола (IX), 2-гексанола (X), 3-гексанола (XI) и циклогексанола в конформациях «кресло» (XII) и «ванна» (XIII), и 5 много-атомных – 1,2-этандиола (XIV), 1,2-пропандиола (XV), 1,3-пропандиола (XVI), 1,2,3-пропантриола (XVII) и пентаэритрита (XVIII)

Fig. 12 monatomic alcohols: methanol (I), ethanol (II), 1-propanol (III), 2-propanol (IV), 1-butanol (V), 2-methyl-2-propanol (tert-butyl alcohol) (VI), 1-pentanol (VII), 2,2-dimethyl-1-propanol (VIII), 1-hexanol (IX), 2-hexanol (X), 3-hexanol (XI) and cyclohexanol in the "armchair" (XII) and "bath" (XIII) conformations, and 5 multi-atomic – 1,2-ethanediol (XIV), 1,2-propanediol (XV), 1,3-propanediol (XVI), 1,2,3-propanetriol (XVII) and pentaerythritol (XVIII)

вторичных спиртов более чем в 10 раз ниже скорости этерификации первичных спиртов [3-5]. Увеличение длины углеродного скелета вторичных спиртов приводит к снижению скорости их этерификации [3-5]. Так же, как и в случае первичных спиртов, разветвление углеродного скелета вторичных спиртов приводит к снижению скорости реакции [3-5]. Третичные спирты этерифицируются с наименьшими скоростями [3].

В настоящее время большой интерес представляют методы прогнозирования реакционной способности спиртов в реакциях этерификации без проведения экспериментальных

исследований [2]. Ввиду значительного прогресса в квантово-химических расчетах и возможностях вычислительной техники оценка реакционной способности спиртов в реакциях этерификации с применением расчетных методов квантовой химии представляется достаточно актуальной.

В настоящей работе было сделано предположение о том, что реакционная способность спиртов в реакциях этерификации может определяться эффективным зарядом на атоме кислорода гидроксильной группы, величина которого, в свою очередь, должна быть связана со строением спирта.

Цель работы – провести квантово-химические расчеты эффективных зарядов на атомах предельных одноатомных и многоатомных спиртов и выявить возможную связь между величиной эффективного заряда на атомах кислорода и способностью этих спиртов к образованию сложных эфиров в реакции этерификации.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Геометрию всех структур оптимизировали методом (DFT) B3LYP / 6-311++G (d, p), как в работах [9, 10]. Для анализа заселенности применяли метод натуральных валентных орбиталей (NBO) по натуральной схеме (NPA) [11].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для 12 одноатомных спиртов: метанола (I), этанола (II), 1-пропанола (III), 2-пропанола (IV), 1-бутанола (V), 2-метил-2-пропанола (*трет*-бутиловый спирт) (VI), 1-пентанола (VII), 2,2-диметил-1-пропанола (VIII), 1-гексанола (IX), 2-гексанола (X), 3-гексанола (XI) и циклогексанола в конформациях «кресло» (XII) и «ванна» (XIII), и 5 многоатомных – 1,2-этандиола (XIV), 1,2-пропандиола (XV), 1,3-пропандиола (XVI), 1,2,3-пропантриола (XVII) и пентаэритрита (XVIII) были рассчитаны эффективные заряды на атомах кислорода:

По увеличению отрицательного заряда на атоме кислорода указанные выше одноатомные спирты можно расположить в ряд: $I < III, V, VII, IX \leq II < IV < XII < VIII \leq X < XI < XIII < VI$.

Видно, что величина отрицательного заряда минимальна на атоме кислорода метилового спирта (I), а наибольшее ее значение – на атоме кислорода *трет*-бутилового спирта (VI). Величина отрицательного заряда на атоме кислорода первичных спиртов с неразветвленным углеводородным скелетом практически одинакова и больше, чем в метаноле. В 2,2-диметил-1-пропаноле (VIII) – первичном спирте с разветвленным углеродным скелетом величина отрицательного заряда на атоме кислорода выше, чем в других рассмотренных первичных спиртах, и выше, чем во вторичных спиртах. Во вторичных спиртах IV, X, XI увеличение размера заместителей при атоме углерода, связанного с гидроксильной группой, приводит к увеличению отрицательного заряда на атоме кислорода. В циклогексаноле конформации «кресло» (XII) величина отрицательного заряда на атоме кислорода, как во вторичных нециклических спиртах, немного выше, чем в 2-пропаноле (IV) и меньше, чем в 2-гексаноле (X). В тоже время в конформации «ванна» (XIII) циклогексанола величина отрицательного заряда на атоме кислорода немногим меньше, чем в *трет*-бутиловом спирте (VI), выше, чем в конформации «кресло» (XII) циклогексанола, и выше, чем в других вторичных спиртах.

В полученном ряду спиртов, расположенных в порядке увеличения отрицательного заряда на атоме кислорода, снижается их способность к образованию сложных эфиров в реакциях этерификации [3], что, вероятно, позволяет распространить такую закономерность и на другие спирты.

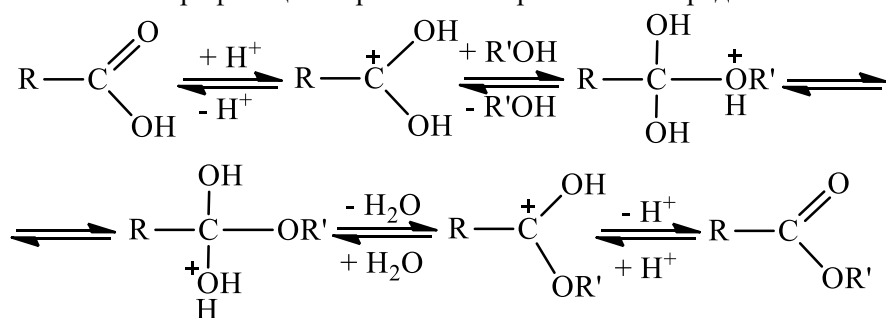
В 1,2-этандиоле (XIV) и 1,2,3-пропантриоле (глицерине) (XVII) величина отрицательного заряда на атомах кислорода первичных гидроксильных групп больше, чем в первичных одноатомных спиртах с неразветвленным углеводородным скелетом. Из этого можно сделать заключение о меньшей способности обеих гидроксильных групп 1,2-этандиола (XIV) и двух первичных гидроксильных групп глицерина (XVII) к образованию сложных эфиров в реакциях этерификации. Вместе с тем обе первичные гидроксильные группы 1,3-пропандиола (XVI) и первичная гидроксильная группа 1,2-пропандиола (XV), исходя из величин отрицательного заряда на атомах кислорода этих функциональных групп указанных спиртов, в реакциях этерификации проявляют реакционную способность, соизмеримую с реакционной способностью первичных одноатомных спиртов. Величины отрицательных зарядов на атомах кислорода вторичных спиртовых групп 1,2-пропандиола (XV) и глицерина (XVII) выше, чем во вторичных спиртах, одноатомных спиртах и даже выше, чем в *трет*-бутиловом спирте (VI). Поскольку

известно об очень низкой способности к образованию сложных эфиров у вторичных спиртовых групп многоатомных спиртов [3], полученные расчетные данные хорошо согласуются с существующими представлениями о реакционной способности одноатомных и многоатомных спиртов в реакциях этерификации. В пентаэритрите (XVIII) величина отрицательного заряда на атомах кислорода его первичных спиртовых групп близка к величине отрицательного заряда на атоме кислорода гидроксильных групп вторичных одноатомных спиртов – 2-гексанола (X) и 3-гексанола (XI). Вероятно, способность к образованию сложных эфиров в реакциях этерификации у этих спиртов также близка.

Так как этерификация и гидролиз протекают по ионному механизму, влияние на скорость этих процессов оказывает величина электронной плотности и ее распределение в зоне карбоксильной, спиртовой и сложноэфирной функциональных групп [12]. Увеличение длины и (или) разветвленности (объема) алкильных заместителей приводит к снижению реакционной способности спиртов в реакциях этерификации [1-5, 13]. Влияние пространственных факторов в реакциях этерификации совпадает с влиянием этих факторов при гидролизе сложных эфиров [14]. Вместе с тем небольшой выход эфиров третичных спиртов объясняется не только медленностью их этерификации, но и образованием побочных продуктов – непредельных углеводов [12].

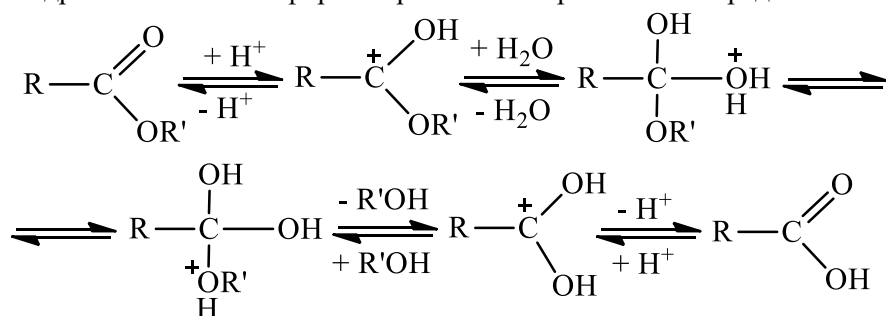
Поскольку на скорость процессов этерификации и гидролиза оказывают влияние несколько факторов, объяснить различие в реакционной способности спиртов в реакциях этерификации влиянием только одного из них затруднительно. Тем не менее, теоретически можно оценить характер влияния величины отрицательного заряда на атоме кислорода спиртов на скорости этих процессов, исходя из сложившихся представлений о механизмах реакций этерификации и гидролиза.

Механизм этерификации первичных спиртов можно представить схемой [15]:



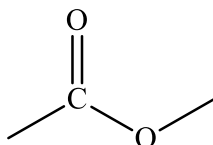
Стадия, определяющая скорость этерификации – атака спиртом протонированной карбоксильной группы [15]. Тогда чем выше электронная плотность, а, следовательно, и величина отрицательного заряда на атоме кислорода спирта, тем выше должна быть скорость этой стадии и всей реакции в целом. Такой вывод противоположен полученным результатам. Так как реакция этерификации обратима, то, вероятно, необходимо наряду с прямой реакцией рассматривать также и обратную (гидролиз).

Механизм гидролиза сложных эфиров первичных спиртов можно представить схемой [15]:



Скорость гидролиза определяют первые две стадии [15].

Скорость присоединения протона по карбонильному кислороду сложноэфирной группы тем больше, чем больше электронная плотность этой группы [12, 15]:

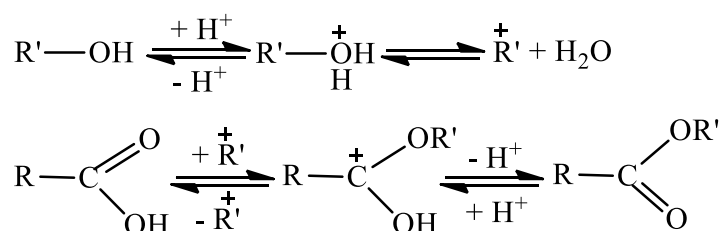


Вместе с тем скорость реакции образующегося протонированного комплекса с водой больше, когда электронная плотность этой группы, связанной с протоном, меньше [12, 15].

Очевидно, что чем меньше величина отрицательного заряда на спиртовом атоме кислорода, тем меньше электронная плотность в зоне этой группы и тем меньше скорость стадии ее взаимодействия с протоном, а значит, и меньше скорость всей реакции. Для второй стадии, напротив, увеличение отрицательного заряда на спиртовом атоме кислорода должно приводить к снижению скорости стадии и скорости гидролиза.

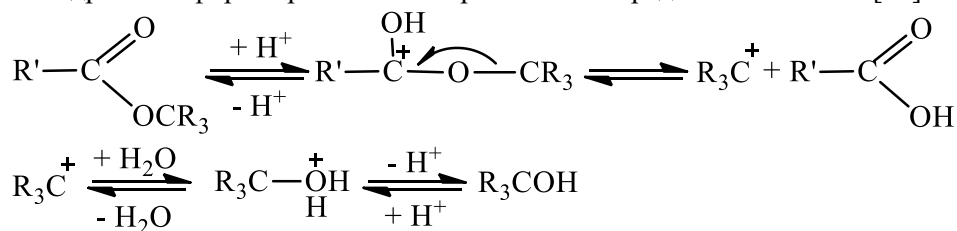
Таким образом, увеличение скорости накопления сложного эфира в процессе этерификации при снижении величины отрицательного заряда на атоме кислорода спирта можно объяснить снижением скорости первой стадии гидролиза, и в таком случае скорость этерификации может превышать скорость гидролиза.

Этерификация третичных спиртов в большинстве своем протекает по механизму [15]:



В этом случае лимитирующей стадией является образование иона карбеня из сопряженной третичному спирту кислоты [15]. На скорость этой стадии будет влиять устойчивость образующегося карбокатиона, чем он устойчивее, тем больше скорость. Стабильность образующегося карбокатиона: третичный > вторичный > первичный, определяется его строением, которое им наследуется от спирта. В представленных спиртах величина отрицательного заряда на атоме кислорода повышается в ряду первичный < вторичный < третичный. Следовательно, увеличение отрицательного заряда на атоме кислорода спирта должно приводить к увеличению скорости лимитирующей стадии и скорости этерификации в целом.

Механизм гидролиза эфиров третичных спиртов можно представить схемой [16]:



В процессе гидролиза сложных эфиров третичных спиртов, катализируемого кислотами, лимитирующей является стадия разрыва связи C—O с образованием стабильного третичного карбокатиона и карбоновой кислоты [16]. Как и в реакции этерификации, связь между кислородом и алкильной группой разрывается легче при наличии заместителей, снижающих энергию разрыва этой связи [12]. Таким образом, как и в реакции этерификации, увеличение отрицательного заряда на атоме кислорода спирта должно приводить к увеличению скорости лимитирующей стадии и скорости гидролиза.

В случае третичных спиртов при увеличении отрицательного заряда на атоме кислорода спирта должна увеличиваться как скорость этерификации, так и скорость гидролиза. Можно предположить, что низкая по сравнению с первичными и вторичными спиртами скорость накопления сложного эфира в процессе этерификации третичных спиртов, обусловлена более высокой скоростью гидролиза.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Osatiashtiani A. [et al.] Influence of alkyl chain length on sulfated zirconia catalysed batch and continuous esterification of carboxylic acids by light alcohols // *Green Chem.* 2016. № 18. P. 5529–5535. (doi: 10.1039/c6gc01089j)
2. Vojtko J., Tomčík P. A Method for Esterification Reaction Rate Prediction of Aliphatic Monocarboxylic Acids with Primary Alcohols in 1,4-Dioxane Based on Two Parametrical Taft Equation // *International Journal of Chemical Kinetics.* 2014. V. 46. № 3. P. 189–196. (doi: 10.1002/kin.20845)
3. Реутов А. О. Теоретические проблемы органической химии. М. : Издательство Московского университета, 1964. 700 с.
4. Vojtko J. [et al.] Prediction of esterification rate constants for secondary alkan-2-ols based on one- and two-parameter Taft equations // *Progress in Reaction Kinetics and Mechanism.* 2020. V. 45:1–9. (doi: 10.1177/1468678319825731)
5. O'Lenick A. J., Parkinson J. K. A comparison of the rates of esterification of some hydroxy compounds // *J. Soc. Cosmet. Chem.* 1994. V. 45. P. 247–256.
6. Yao P. [et al.] Greener and higher conversion of esterification via interfacial photothermal catalysis // *Nature Sustainability.* 2022. V. 5. P. 348–356. (doi: /10.1038/s41893-021-00841-0)
7. Farouq R., Selim Y. Functionalized Polyethylene Glycol as a Catalyst for Esterification of Salicylic Acid // *Journal of Polymers and the Environment.* 2023. P. 1–9. (doi: 10.1007/s10924-022-02754-1)
8. Castello A. M. [et al.] Solid catalyzed esterification reaction of long chain acids and alcohols in fixed bed reactors at pilot plant scale // *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification.* 2022. V. 178. P. 1–8 (109038). (doi: 10.1016/j.cep.2022.109038)
9. De Vleschouwer F. Electrophilicity and Nucleophilicity Index for Radicals // *Org. Lett.* 2007. V. 9. № 14. P. 2721–2724. (doi: 10.1021/ol071038k)
10. Sun X.-H. Calculation of the rate constants for concerted elimination reaction class of hydroperoxyl-alkyl-peroxyl radicals // *Theor. Chem. Acc.* 2017. 136:64. P. 1–12. (doi: 10.1007/s00214-017-2086-y)
11. Gangadharan R., Sampath K. First Order Hyperpolarizabilities, NPA and Fukui Functions of Cyclohexanone by Density Functional Theory Method // *Acta Physica Polonica A.* 2015. V. 127. № 3. P. 748–752. (doi: 10.12693/APhysPolA.127.748)
12. Темникова Т. И. Курс теоретических основ органической химии. Л. : Госхимиздат, 1959. 808 с.
13. Беккер, Хейнц, Беккерт, Райнер, Гевальд, К., Генц, Ф., Глух, Р., Домшке, Г., Зайлер, Э., Майер, Р., Мец, П., Мюллер, К. Органикум, [Текст], учебное пособие для студентов высших учебных заведений, обучающихся по специальности ВПО 020101.65 - химия : в 2 т., пер. с нем. д-ра хим. наук Н. А. Беликовой и проф., д-ра хим. наук Г. В. Гришиной, Т. 1 Москва : [2008] .- Мир , 504 с. .- ил., табл.
14. Химические реакции полимеров / под ред. Е. Феттеса. М. : Мир, 1967. 1040 с.
15. Гауптман З., Грефе Ю., Ремане Х. Органическая химия. М. : Химия, 1979. 832 с.
16. Сайкс П. Механизмы реакций в органической химии. М. : Химия, 1991. 448 с.

© 2023 Авторы. Эта статья доступна по лицензии Creative Commons «Attribution» («Атрибуция») 4.0 Всемирная (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Об авторах:

Пучков Сергей Вениаминович, кандидат хим. наук, доцент, Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева, (650000, Россия, г. Кемерово, ул. Весенняя, 28), psv.toos@kuzstu.ru
Непомнящих Юлия Викторовна, кандидат хим. наук, доцент, Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева, (650000, Россия, г. Кемерово, ул. Весенняя, 28), nyuv.toos@kuzstu.ru

Заявленный вклад авторов:

Пучков Сергей Вениаминович – постановка исследовательской задачи, обзор соответствующей литературы, проведение квантово-химических расчетов, анализ данных, выводы, написание текста.
Непомнящих Юлия Викторовна – обзор соответствующей литературы, проведение квантово-химических расчетов, анализ данных, выводы, написание текста.

.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

Original article

EVALUATION OF MONOHYDRIC AND POLYHYDRIC ALCOHOLS
REACTIVITY IN THE ESTERIFICATION BY QUANTUM CHEMICAL METHODSSergey V. Puchkov,
Yulia V. Nepomnyashchikh

T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University

*for correspondence: psv.toos@kuzstu.ru



Article info

Received:
05 April 2023Accepted for publication:
15 June 2023Accepted:
20 June 2023Published:
30 June 2023**Keywords:** alcohols, quantum
chemical methods, effective
charges, esterification,
hydrolysis, reactivity

Abstract.

For 12 monohydric alcohols of methanol, ethanol, 1-propanol, 2-propanol, 1-butanol, 2-methyl-2-propanol (tert-butyl alcohol), 1-pentanol, 2,2-dimethyl-1-propanol, 1-hexanol, 2-hexanol, 3-hexanol, cyclohexanol in the "chair" and "boat" conformations and 5 polyatomic – 1,2-ethanediol, 1,2-propanediol, 1,3-propanediol, 1,2,3-propanetriol (glycerin) and pentaerythritol the effective charges on oxygen atoms were calculated. It is shown that with a decrease in the value of the negative charge on the oxygen atom of the hydroxyl group of monohydric alcohols, the rate of their esterification by carboxylic acids increases. The nature of the influence of the magnitude of the negative charge on the oxygen atom of alcohols on the speed of the limiting stages of esterification and hydrolysis is estimated. It has been found that for polyhydric alcohols, the same correlation remains between the magnitude of the negative charge on the oxygen atom of the hydroxyl group and the reactivity of these groups in esterification reactions as for primary monohydric alcohols. The revealed dependencies allow a comparative assessment of the reactivity of alcohols in esterification reactions.

For citation: Puchkov S.V., Nepomnyashchikh Yu.V. Evaluation of monohydric and polyhydric alcohols reactivity in the esterification by quantum chemical methods. *Vestnik Kuzbasskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*=Bulletin of the Kuzbass State Technical University. 2023; 3(157):52-59. (In Russ., abstract in Eng.). DOI: 10.26730/1999-4125-2023-3-52-59, EDN: JZKIDK

REFERENCES

1. Osatiashtiani A. [et al.] Influence of alkyl chain length on sulfated zirconia catalysed batch and continuous esterification of carboxylic acids by light alcohols. *Green Chem.* 2016; 18:5529–5535. (doi: 10.1039/c6gc01089j)
2. Vojtko J., Tomčík P. A Method for Esterification Reaction Rate Prediction of Aliphatic Monocarboxylic Acids with Primary Alcohols in 1,4-Dioxane Based on Two Parametrical Taft Equation. *International Journal of Chemical Kinetics.* 2014; 46(3):189–196. (doi: 10.1002/kin.20845)
3. Reutov A.O. *Teoreticheskie problemy organicheskoy himii.* M.: Izdatel'stvo Moskovskogo universiteta; 1964. 700 s.
4. Vojtko J. [et al.] Prediction of esterification rate constants for secondary alkan-2-ols based on one- and two-parameter Taft equations. *Progress in Reaction Kinetics and Mechanism.* 2020; 45:1–9. (doi: 10.1177/1468678319825731)
5. O'Lenick A.J., Parkinson J.K. A comparison of the rates of esterification of some hydroxy compounds. *J. Soc. Cosmet. Chem.* 1994; 45:247–256.
6. Yao P. [et al.] Greener and higher conversion of esterification via interfacial photothermal catalysis. *Nature Sustainability.* 2022; 5:348–356. (doi: /10.1038/s41893-021-00841-0)
7. Farouq R., Selim Y. Functionalized Polyethylene Glycol as a Catalyst for Esterification of Salicylic Acid. *Journal of Polymers and the Environment.* 2023. P. 1–9. (doi: 10.1007/s10924-022-02754-1)
8. Castello A.M. [et al.] Solid catalyzed esterification reaction of long chain acids and alcohols in fixed bed reactors at pilot plant scale. *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification.* 2022; 178:1–8(109038). (doi: 10.1016/j.cep.2022.109038)
9. De Vleeschouwer F. Electrophilicity and Nucleophilicity Index for Radicals. *Org. Lett.* 2007; 9(14):2721–2724. (doi: 10.1021/ol071038k)
10. Sun X.-H. Calculation of the rate constants for concerted elimination reaction class of hydroperoxyl-alkyl-peroxyl

radicals. *Theor. Chem. Acc.* 2017; 136(64):1–12. (doi: 10.1007/s00214-017-2086-y)

11. Gangadharan R., Sampath K. First Order Hyperpolarizabilities, NPA and Fukui Functions of Cyclohexanone by Density Functional Theory Method. *Acta Physica Polonica A.* 2015; 127(3):748–752. (doi: 10.12693/APhysPolA.127.748)

12. Temnikova T.I. Kurs teoreticheskikh osnov organicheskoy himii. L.: Goshim-izdat; 1959. 808 s.

13. Becker, Heinz, Beckert, Rainer, Gewald, K., Gentz, F., Gluh, R., Domschke, G., Seiler, E., Mayer, R., Metz, P., Muller, K. Organicum, [Text], textbook for students of higher educational institutions studying in the specialty of HPE 020101.65 - chemistry : in 2 vols., trans. from it. Dr. of Chemical Sciences N. A. Belikova and Prof., Dr. of Chemical Sciences G. V. Grishina, Vol. 1 Moscow : [2008] .- Mir , 504 p.- ill., tab.Fettes E.M. Chemical reactions of polymers. New York: Interscience Publishers; 1964. 1304 p.

14. Hauptmann S., Graefe J., Remane H. Lehrbuch der Organischen Chemie. VEB deutscher Verlag fur Grundstoffindustrie. Leipzig, 1976.

15. Sykes P. A Guidebook to Mechanism in Organic Chemistry. London: Longman; 1971. 416 c.

© 2023 The Authors. This is an open access article under the CC BY license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

The authors declare no conflict of interest.

About the authors:

Sergey V. Puchkov, C. Sc. in Chemistry, T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University, (28 street Vesennyaya, Kemerovo, 650000, Russian Federation), e-mail: psv.toos@kuzstu.ru

Yulia V. Nepomnyashchikh, C. Sc. in Chemistry, T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University, (28 street Vesennyaya, Kemerovo, 650000, Russian Federation), e-mail: nyuv.toos@kuzstu.ru

Contribution of the authors:

Sergey V. Puchkov – formulation of a research problem, review of relevant literature, conducting quantum chemical calculations, data analysis, conclusions, writing a text.

Yulia V. Nepomnyashchikh – review of relevant literature, conducting quantum chemical calculations, data analysis, conclusions, writing text..

All authors have read and approved the final manuscript.

