Studentski dom „Evropa” – Európa Kollégium Egyetemista Központ, Újvidék

25. Vajdasági Magyar Tudományos Diákköri Konferencia

PIRAZOL- 3,5-DIKARBONSAV DERIVATIZÁLÁSA

Mentor:

Dr. Barta Holló Berta

Kollégista:

Ana Popović

Természettudományi -matematikai Kar

Kémia 4. évfolyam

2026. november, Újvidék

TARTALOMJEGYZÉK

TARTALOMJEGYZÉK 2
ABSZTRAKT 3
BEVEZETÉS 3
ELMÉLETI RÉSZ 3
SZERKEZETI TULAJDONSÁGOK 3
KÉMIAI ÉS FIZIKAI TULAJDONSÁGOK 4
ELMÉLETEK ÉS HIPOTÉZISEK 4
KISÉRLETI RÉSZ 5
PIRAZOL-DIKARBONSAV (PZ DCA) DERIVATIZÁLÁSA HIDARZINNAL 5
A PIRAZOL-DIKARBONSAV DERIVATIZÁLÁSA AMINOGUANIDIN-BIKARBONNÁTAL 5
ELÉRT EREDMÉNYEK 6
KÖVETKEZTETÉS 11
IRODALOMJEGYZÉK 12

ABSZTRAKT

A pirazol-3,5-dikarbonsav (PDC) szerkezeti adottságaiból kifolyólag alkalmas és gyakran használt ligandum koordinációs polimerek szintézise során, melyeket egyre több területen alkalmaznak, mint adszorbens, vagy katalizátor. Munkánk célja a PDC derivatizálása, majd a kapott származékok felhasználása új koordinációs vegyületek szintéziséhez átmenetifémekkel. Ebben a dolgozatban két, a derivatizálásra irányuló kísérletet mutatunk be. Az első lépésben a PDC-t hidrazinnal (HZ) és aminoguanidinnel (AG) reagáltatjuk, majd a kapott termékeket karakterizáljuk a további kísérlet lefolytatása előtt. A karakterizáció első lépései közé tartozik a szerkezet, tisztaság, vezetőképesség meghatározása, illetve a spektroszkópiai vizsgálatok. Az felsoroltak közül a szintézis bemutatása mellett a kapott termékek infravörös spektrumait tárgyaljuk a továbbiakban. Az összegyűjtött és bemutatott adatok egyelőre a munka folytatásához fontosak, mert alapvető információkat nyújtanak a további vizsgálatok megtervezéséhez.

BEVEZETÉS

A pirazol-3,5-dikarbonsav (PDC) egy heterociklusos szerves vegyület, amely egy öttagú pirazolgyűrűből áll, a 3-as és az 5-ös pozícióban elhelyezkedő két karboxilcsoporttal. Leggyakrabban monohidrát formában fordul elő (egy vízmolekulával). Ez a vegyület elsősorban a koordinációs kémiában és az anyagtudományban jelentős, mint a fémorganikus térhálók (MOF-ok) építőeleme. Elsősorban ligandumként vagy linkerként („összekötőként”) használják MOF-ok és koordinációs polimerek előállítása során a pirazolgyűrű merevsége és a karboxilcsoportok orientációja miatt. A PDC-alapő komplexeket (pl. cinkkel) fluoreszcens szenzorokként vizsgálják vas(III)-ionok vagy bizonyos oldószerek, például aceton kimutatására. Emellett tanulmányozzák hatékonyságát káros fémek (például réz) eltávolításában szennyvizekből és korróziógátló hatékonyságát is.[1] A PDC derivatizálásával megnövelhető a reaktív funkcióscsoportok száma és geometriája, ami újabb komplexek és koordinációs polimerek szintézisét teszi lehetővé. Mindezek ellenére a PDC derivatizálására irányuló eredményekből keveset találtunk.

ELMÉLETI RÉSZ

SZERKEZETI TULAJDONSÁGOK

A pirazolgyűrű aromás jellege és a két karboxilcsoport (–COOH) szimmetrikus elrendeződése stabil molekulszerkezetet eredményez. A molekula nagyfokú szimmetriával rendelkezik; a 3-as és 5-ös helyzetű karboxilcsoportok kémiailag ekvivalensek. Több potenciálisan reaktív atommal is rendelkezik (két nitrogénatom a gyűrűben és két oxigénatom a karboxilcsoportokból), ezért egyszerre több fémionhoz is képes kapcsolódni, 2D vagy 3D hálózatokat kialakítva. Szilárd állapotban (különösen monohidrátként) erős intermolekuláris hidrogénkötéseket alakít ki, amelyek rétegekbe rendezik a molekulákat a kristályosodás során, nagy termikus stabilitást biztosítva. [2]

KÉMIAI ÉS FIZIKAI TULAJDONSÁGOK

Két disszociációs állandóval rendelkezik a két karboxilcsoport miatt, de bizonyos körülmények között a gyűrű nitrogénatomjáról (NH-csoport) is leadhat egy protont, így tágabb értelemben triprotikus savnak tekinthető. Hideg vízben és általános szerves oldószerekben (pl. éter, kloroform) rosszul oldódik, de jobban oldódik forró vízben és poláris oldószerekben, mint például a DMSO (dimetil-szulfoxid). Nagyon hőálló; csak 280 °C felett kezd bomlani (CO_2-vesztéssel, dekarboxilezéssel), ami alkalmassá teszi magas hőmérsékleten stabil anyagok szintézisére. A nitrogén- és oxigénatomok közelsége miatt könnyen képez kelátgyűrűket fémekkel (például réz, cink vagy nikkel esetén), ami rendkívül stabil komplexek kialakulásához vezet. [3]

ELMÉLETEK ÉS HIPOTÉZISEK

Miért szükséges a derivatizáció (szerkezetmódosítás)? A derivatizáció során új csoportokat (pl. alkil-, amino- vagy nitrocsoportokat) kapcsolunk a PDC gyűrűjére vagy karboxilcsoportjaira. Ezzel megváltozhatnak a koordinációs képességei és a kapott komplexek stabilitása, fizikai és kémiai tulajdonságai is. Az ilyen változatások célja az oldhatóság beállítása különböző polárosságú oldószerekben. Emellett az elektronsűrűség módosításával szabályozható a ligandum kötődési erőssége, ami befolyásolja, hogy a komplex melyik fémionokkal lesz stabilabb. Továbbá fluoreszcens csoport beépítésével olyan molekulák hozhatók létre, amelyek fluoreszcens tulajdonságai megváltoznak bizonyos feltételek mellett és alkalmasak különböző ionok vagy molekulák szelektív kimutatására.

A későbbiekben tervezzük a kapott hidrazon típusú PDC-származékok koordinációs- és komplexalkotó képességeinek kivizsgálását is különböző átmenetifémek ionjaival.

KISÉRLETI RÉSZ

PIRAZOL-3,5-DIKARBONSAV (PZ DCA) DERIVATIZÁLÁSA HIDARZINNAL

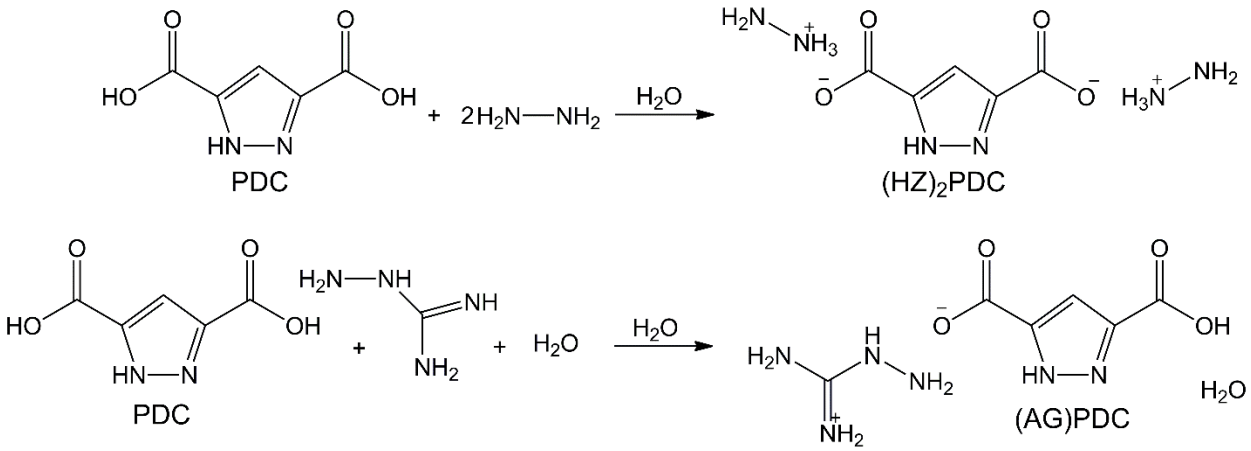
A PDC-t (0,5 mmol, 0,087 g) 5 mL vízben oldottuk fel 100 °C-on refluxálva a keveréket. Miután a PDC feloldódott, 2 mL hidrazin-monohidrátot és 1 csepp tömény sósavat adtunk hozzá, majd az elegyet további 2 órán át refluxáltuk 100 °C-on. A színtelen oldatból szobahőmérsékleten 15 nap elteltével fehér, tűszerű kristályok váltak ki. A kapott kristályos csapadékot leszűrtük és kevés hideg vízzel mostuk. (Hozam: 32,2%)

A PIRAZOL-3,5-DIKARBONSAV DERIVATIZÁLÁSA AMINOGUANIDIN-BIKARBONNÁTAL

A PDC-t (1 mmol, 0,164 g) 10 mL vízben oldottuk fel 100 °C-on refluxálva a keveréket. Miután feloldódott a vízben, aminoguanidin-bikarbonátot (2 mmol, 0,272 g) adtunk hozzá, majd az elegyet további 2 órán át refluxáltuk 100 °C-on. A reflux befejezése után megmértük az oldat pH-értékét, ami 4,0 – 4,5 volt. A oldatból szobahőmérsékleten 10 nap elteltével nagy méretű, fehér, tűszerű kristályok váltak ki, melyeket leszűrtünk és kevés hideg vízzel átmostunk. (Hozam: 36,4 %)

ELÉRT EREDMÉNYEK

A munka céljaként kitűzött derivatizációt két módon próbáltuk elérni. Az első módon a pirazol-3,5-dikarboxilsav (PDC) vizes oldatát reagáltattuk hidrazin hidráttal nagy feleslegben enyhén savas közegben 100 °C-on refluxálva két órán át. Ennek a reakciónak az eredményeként a pirazol-3,5-dikarboxilsav hidrazínium sója, $(HZ)_2PDC$, kristályosodott ki fehér tűszerű kristályok formájában 15 nap után. A másik szintézisnél a PDC vizes oldatát aminoguanidin-bikarbonáttal reagáltattuk 1:2 mólarányban két órán át 100 °C-on refluxálva a reakcióelegyet. A reakciótermék nagy, fehér, tűszerű kristályai 10 nap után jelentek meg a reakcióelegyben. Ebben az esetben is sót kaptunk, a PDC aminoguanidínium sóját, $(AG)PDC{\cdot}H_2O$.



1. Ábra: A 3,5-pirazoldikarboxilsav hidrazinnal és aminoguanidinnel alkotott sói

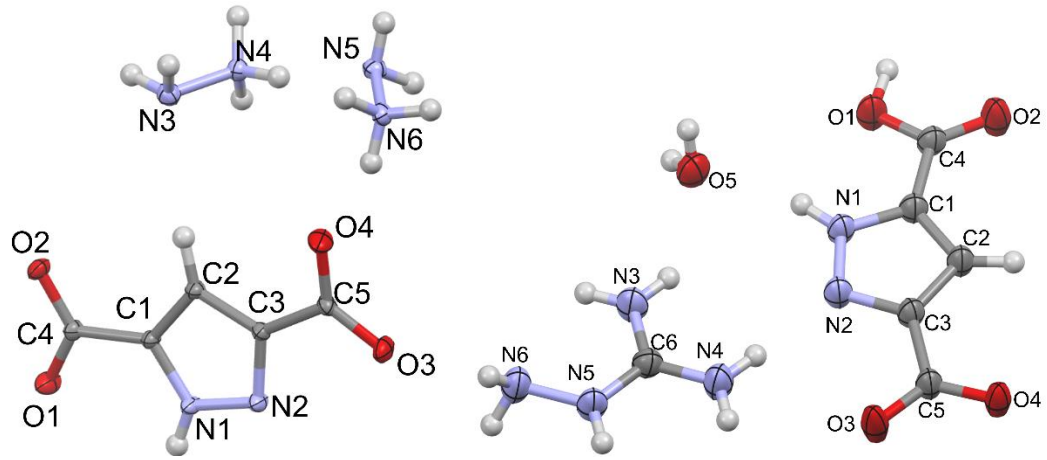
A következő lépés a keletkezett kristályok röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálata volt. Ennek alapján határoztuk meg a molekulaszerkezeteket. A hidrazinnal már ismert sót kaptunk, a $(HZ)_2PDC$-t, melynek szerkezetét publikálták [4]. Az aminoguanidinnel viszont új, szintén só típusú vegyületet kaptunk, melyet az (AG)PDC·H2O képlettel írhatunk le, melyben az AG az aminoguanidint jelöli, a PDC viszont a pirazol-3,5-dikarboxilsavat. Ennek a sónak a kialakulása során a kiindulási pirazol-3,5-dikarboxilsav (PDC) csak részleges, egyszeres deprotonálódáson ment keresztül, ellentétben a $(HZ)_2PDC$-vel, melyben a PDC mindkét karboxil csoportja deprotonálódik. Ezzel a részleges deprotonálódással összhangban az (AG)PDC·H2O-ben különböznek a karboxil csoportokban a kötéstávolságok nagyobb különbségeket mutatnak, mint a $(HZ)_2PDC$ pirazol egységében. A C5–O3 és C5–O4 kötések hosszai a $(HZ)_2PDC$-ben szinte azonosak, 1,257 és 1,252 Å, viszont az $(AG)PDC{\cdot}H_2O$-ban mutatnak némi eltérést: 1,243 és 1,260 Å. Nagyobb különbségek a C4–O1 és C4–O2 kötéseknél figyelhetőek meg. A korábbról ismert $(HZ)_2PDC$-ben ezek a kötések 1,248 és 1,264 Å hosszúak, viszont az (AG)PDC·H2O analóg csoportja protonált, ami miatt a C4–O1 kötés jelentősen hosszabb, 1,302 Å, mint a többi C–O kötés a pirazol-3,5-dikarboxilsavban. Ezzel összhangban a C4–O2 kötés viszont jelentősen rövidebb, 1,211 Å, vagyis egyértelműen megkülönböztethető az egyszeres C–OH és a kettős C=O kötés. Annak ellenére, hogy az N1 atom protonált, az N2 viszont nem, a C1–N1 és a C3–N2 kötések hossza nem különbözik jelentősen: 1,352 és 1,340 Å. A protonálódás következtében a C1–N1 kötés

kicsivel hosszabb, mint a C3–N2. A só kationja a protonálódott aminoguanidínium ion, melyben a C–N kötések mind 1,321±0,02 Å hosszúak.

1. táblázat: Az (AG)PDC·H_2O és a $(HZ)_2$PDC kiválasztott kötéstávolságai [Å]

Kötés	(AG)PDC·H_2O	$(HZ)_2$PDC
C1 – C4	1,480	1,484
C4 – O1	1,302	1,248
C4 – O2	1,211	1,264
C3 – C5	1,499	1,493
C5 – O3	1,243	1,257
C5 – O4	1,260	1,252
N2–N1	1,336	1,352
C6 – N3	1,323	-
C6 – N4	1,319	-
C6 – N5	1,321	-
N5– N6	1,408	1,451
N3 – N4	-	1,444

A pirazol-3,5-dikarboxilát ion teljesen sík szerkezetű, csakúgy, mint az aminoguanidínium ion. Azonban az aminoguanidínium ion és a pirazol-3,5-dikarboxilát ion két külön síkban helyezkednek el. A kationt és az aniont hidrogénhíd kötések kapcsolják össze. A hidrogénhídak kialakításában egy molekula kristályvíz is részt vesz, amint az alábbi ábrán látható.

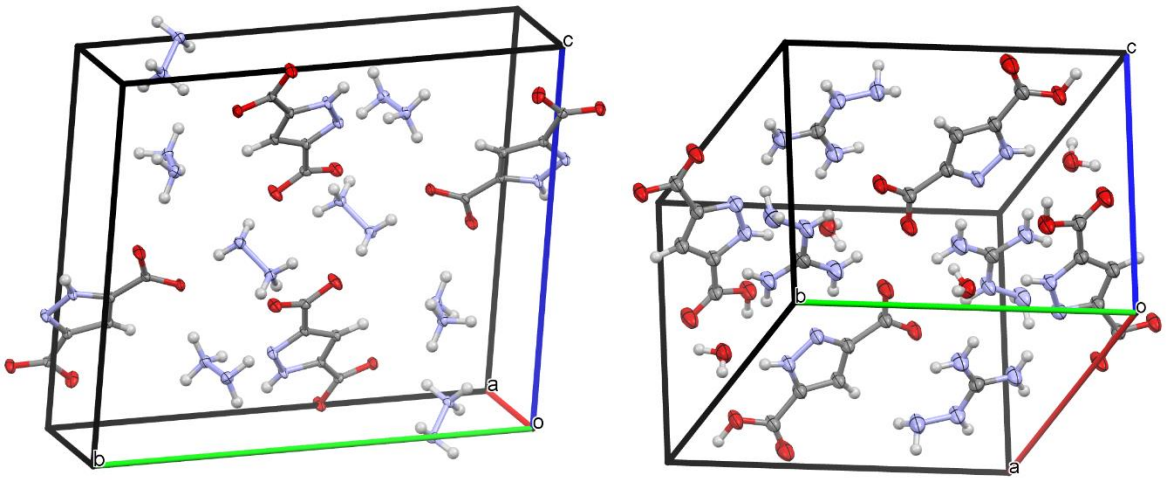


a b

2. Ábra: A 3,5-pirazoldikarboxilsav hidrazinnal (a) és aminoguanidinnel (b) alkotott sóinak molekulaszerkezete

A vegyület monoklin elemi cellájában négy (AG)PDC·H2O egység helyezkedik el, melyek síkokba rendeződtek. Az egy síkban elhelyezkedő szomszédos aminoguanidínium és pirazol-3,5-dikarboxilát ionok további AG–AG, PDC–PDC és AG–PDC hidrogénhidakat alakítanak ki, melyek

stabilizálják a kristályszerkezetet. Az egyes síkok között csak a kristályvízmolekulának köszönhetően alakultak ki hidrogénhíd kötések. Az (AG)PDC·H2O-val ellentétben, a (HZ)2PDC kristályrácsában a PDC egységek síkjait a hidrazínium ionok kötik összse, amelyek az előzőek síkjai között helyezkednek el, ahogyan az alábbi 2. ábrán is látható.



a b

3. Ábra: A $(HZ)_2PDC$ (a) és az $(AG)PDC·H_2O$ (b) elemi cellái

Az infravörös spektroszkópia egy nem destruktív és kis mintaigényű módszer, melyet előszeretettel alkalmaznak már ismert vegyületek azonosítására, illetve új vegyületek karakterizálására. Az általunk előállított vegyületeket is karakterizáltuk az infravörös spektrumaik alapján. Az egyes rezgések asszignációját a szakirodalmi adatok [4–7] alapján végeztük el és az alábbi táblázatban (2. táblázat) foglaltuk össze. Felvettük a kereskedelmi forgalomban kapható PDC, valamint az általunk előállított sók spektrumát, majd az eredményeket összevetettük a szakirodalmi adatokkal. A kiinduló vegyületek spektrumaihoz viszonyítottuk a kapott termékek spektrumait, hogy eldönthessük, keletkezett-e új vegyület.

A kereskedelmi PDC esetében 3202 cm^{-1} hullámszámnál a hidroxilcsoporthoz tartozó jelet azonosítottuk, míg a kapott $(HZ)_2PDC$ származék 3253 cm^{-1}-nél mutat csúcsot, amely a hidrazínium kationok NH-csoportjaitól származik (4. ábra). A hidrazin hidrokloridhoz képest jelentkező jelentős eltérést nagy valószínűséggel a hidrogénhíd kötések összetett hálózata okozza, melyben a karboxil csoportok és a hidrazínium katiomnok is részt vesznek.

A következő lényeges különbség 1967 cm^{-1} hullámszámnál látható: itt a kereskedelmi vegyület karboxilcsoportja ad jelet [5], míg a $(HZ)_2PDC$ só megfelelő csúcsa 2181 cm^{-1}-nél jelentkezik. Feltételezhető, hogy ez az eltolódás a karboxil csoport deprotonálódásának és az újonnan kialakult hidrogénhíd kötéseknek a következménye. A több mint 200 cm^{-1}-nyi különbség a hasonló jellegű sávok között jelentős kémiai változásra utal a kiinduló PDC szerkezetéhez és összetételéhez képest. Ez összhangban van a hidrogénkötések igen sűrű hálózatával, melyek a deprotonálódott karboxil csoportok és az amin, illetve, protonálódott NH_2^+/NH_3^+ csoportok között alakultak ki. A hidrogénhidak három dimenziós hálózata a PDC, HZ, illetve az AG jellemző abszorpciós sávjainak eltolódását eredményezi. Ezzel összhangban jelentős eltérés észlelhető az 1700–1100 cm^{-1} tartományban is, ahol jellemzően a C=O és C=N

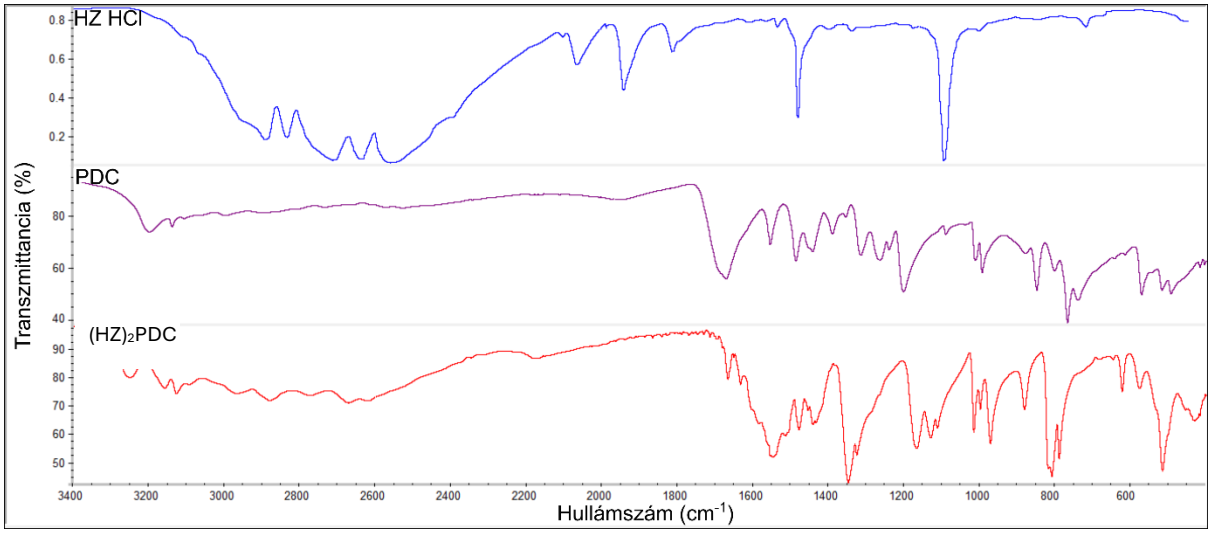
vegyértékrezgések sávjai jelentkeznek. A PDC spektrumában 1674 cm^{-1}-en látható a legnagyobb intenzitású sáv, ami a karboxilcsoportok C=O rezgéseihez rendelhető, viszont a $(HZ)_2$PDC spektrumában 1669–1636 cm^{-1}-en csak kis intenzitású sávok vannak. Nagy intenzitású sávok a $(HZ)_2$PDC spektrumában 1549 és 1350 cm^{-1}-en figyelhetőek meg. Ezek közül az első társítható a pirazol gyűrű C–N vegérték- és a C–N–H deformációs rezgéseinek kombinációjához míg az utóbbi inkább az N–H és OCN deformációs rezgésekhez. 625 cm^{-1}-nél egy, csak a $(HZ)_2$PDC sóra jellemző sáv látható, nagy valószínűséggel a C–H és N–H kötések, valamint a pirazol gyűrű deformációs rezgéseinek kombinációja.[7,8]

2. Táblázat: A 3,5-pirazoldikarboxilsav és a kapott származékok jellemző IR sávjai, valamint a megfelelő irodalmi adatok

AG HCO_3 Irodalmi [6]	(AG)PDC·H_2O	$(HZ)_2$PDC	PDC mért	PDC irodalmi [5]	Asszignáció
	3421				*ν* OH
3324	3350			3353	*ν* NH
	3273	3253			*ν* NH
			3202	3220	*ν* OH
	3143	3161	3142	3144	*ν* CH
3126		3130			*ν* NH, *ν* OH
	3055			3064	*ν* CH
	2988	2970	3000	3002	*ν* =CH
	2887	2882		2876	*ν* CCH
	2749	2776			*ν* CCH
		2674	2528		*ν* CCH
2215		2181			*ν* CON
			1967	1968	ν_a COO
	1715			1717	ν_s COO
1683			sh	1700	ν_a C=O
	1667	1669	1674	1633	ν_s C=O
		1653			*ν* C=N
1631		1636			*ν* C=N
	1553	1549	1557	1560	δ ring*
1495	1495	1481	1489	1492	*υ* ring
1457	1446	1445	1445	1460	*υ* N=N, ν ring
	1394		1393	1395	*υ* ring
1347	1339	1350	1357	1357	*υ* ring,δ C-NH/ δ C-OH
		1328	1317	1322	*υ* C–O
1256	1270		1268	1278	δ CH
1256	1225		1243	1244	δ CH, COC
	1190	1169	1204	1210	*νs* C=O, δ NH

1113	1120	1132			δ NH, δ OCN
1062	1081	1114	1092	1094	*ν* ring, *ν* CH
1017	1010	1018	1014	1018	δ CH
988	993	1000	996	998	δ ring
	894	883	880	881	δ CH
	859		851	852	δ CH
	815	811	803	806	δ CH
	797	791			δ C–N
	773		770	772	δ CH
693	690				δ NH, δ N–N
	624	625			*υ* C–C, δ O–C–N
	563	579	573	577	δ ring
	511	518	519	522	δ NH
	503	433	495	499	δ OCO

* A „ring” jelölést a pirazolgyűrűre használtuk és a gyűrű vegyérték- illetve vázrezgéseit írtuk le vele.

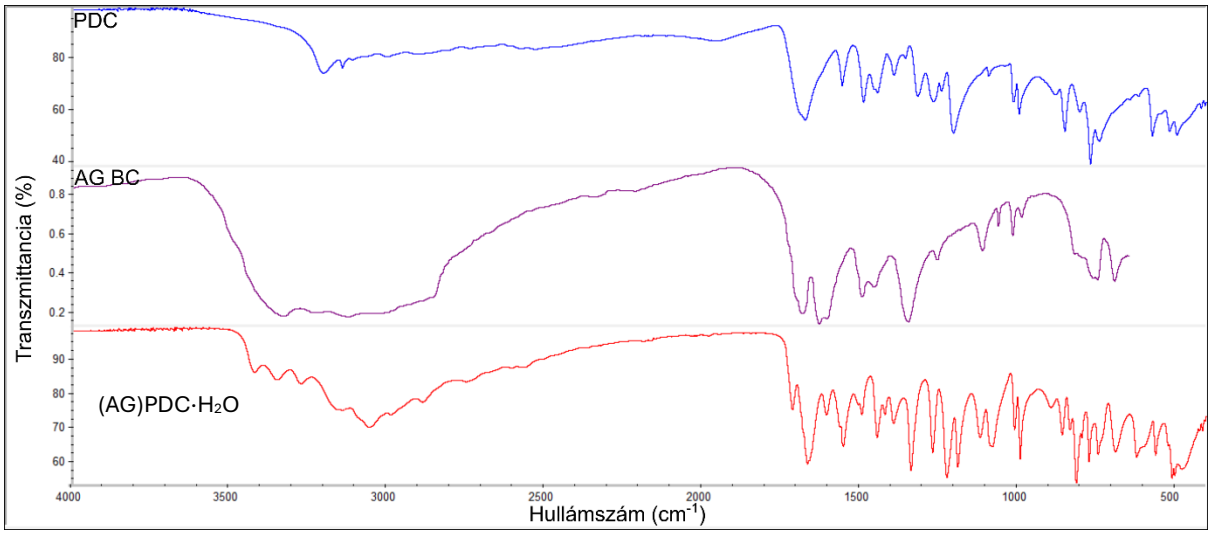


4. Ábra: A hidrazin hidroklorid (HZ HCl) [6], PDC és a reakciótermék (PDC(HZ)$_2$) IR spektruma
(Az adatbázisban a hidrazin hidrát IR spektruma nem szerepel, ezért a hidrazin hidroklorid spektrumát használtuk fel.)

A (AG)PDC·H_2O só esetében 3500–2500 cm^{-1} tartományban jelentős különbségek észlelhetők (5. ábra). A nagy számú rezgési sáv ebben a tartományban a kristályvíztől és a különböző sztereokémiai környezetű amino- és imino csoportoktól ered. Hasonlóan a (HZ)$_2$PDC-hoz, a (AG)PDC·H_2O spektrumában is megfigyelhető a jelentős számú hidrogén-híd kötés hatása a jellemző rezgési sávok eltolódására. Az aminogunaidin és a (AG)PDC·H_2O só spektrumában is megfigyelhető kis intenzitású, viszonylag széles sáv 2200 cm^{-1} körül, a PDC spektrumában viszont 1967 cm^{-1}-en jelentkezik hasonló jellegű sáv, ami az irodalmi adatok [5] alapján a karboxil csoport vegyértékrezgéseihez rendelhető. Majd, 1715 cm^{-1}-en megfigyelhető egy kis intenzitású sáv, amit

követ a jóval intenzívebb 1667 cm^{-1}-en. Viszont az aminogunaidin bikarbonátra jellemző 1650–1600 cm^{-1} körül jelentkező nagy intenzitású sáv helyett egy kevésbé intenzív sáv látható 1607 cm^{-1}-en. Majd a szintén intenzív, aminoguanidinre jellemző sáv figyelhető meg 1339 és 1120 cm^{-1}-en. [6,7] Ezekhez a sávokhoz a C–N, N–N és N–H kötések különféle vibrációit és azok kombinációit társíthatjuk. A (AG)PDC·H_2O spektrumában 815 és 624 cm^{-1}-en megfigyelt sávok egyik kiinduló vagy hasonló funkciós csoportokkal rendelkező vegyület spektrumában sem jelentősek, amit szintén a nagyszámú hidrogénkötés kialakulásával hozhatunk összefüggésbe.

Az IR spektrumok mindkét reakciótermék esetében összhangban vannak a kapott termékek molekulaszerkezetével.



5. Ábra: A PDC, aminoguanidin bikarbonát (AG BC) [6] és reakciójuk termékének ((AG)PDC·H_2O) IR spektruma

KÖVETKEZTETÉS

A bemutatott eredményekből látszik, hogy a két, a PDC derivatizálására irányuló reakció a kiindulási anyagokhoz viszonyítva só típusú vegyületeket adott. A $(HZ)_2PDC$ szerkezete már ismert, viszont az aminoguanidinnel új vegyületet sikerült előállítanunk $(AG)PDC{\cdot}H_2O$. A röntgendiffrakciós mérések bizonyítjak a só-szerű szerkezetet mindkét esetben. Emellett a PDC részleges deprotonációját a $(AG)PDC{\cdot}H_2O$-ban. Mindkét só kristályszerkezetét jelentős számú hidrogénhíd stabilizálja, melyek hatására a kiinduló vegyületek jellemző IR rezgési sávjai jelentősen eltolódnak. Az itt bemutatott kísérletek és eredmények a teljes kísérlet kezdete, viszont kulcsfontosságúak a további kutatások és a komplexképzés szempontjából. A következő lépés a kapott származékok koordinációs készségének kivizsgálása és a kapott vegyületek további jellemzése.

IRODALOMJEGYZÉK

1. Jing Sun, Ke-Xia Shang, Ya-Jun Wu, Qian Zhang, Xiao-Qiang Yao, Yun-Xia Yang, Dong-Cheng Hu, Jia-Cheng Liu, “Three new Coordination Polymers based on a 1-(3,5-dicarboxy-benzyl)-1H-pyrazole-3,5-dicarboxylic acid ligand: Synthesis, crystal structures, magnetic properties and selectively sensing properties”, *Polyhedron* 141 (2018) 223-229. https://doi.org/10.1016/j.poly.2017.11.037
2. Essam Alkhnaifes, Marco Santucci, Laura Gemmrich Hernandéz, Felix Steinke, Ute Kolb, Tobias A. Engesser, Christian Näther, Norbert Stock, “Synthesis and Crystal Structure of Two Fe(III) Pyrazole-3,5-Dicarboxylates”, *Cryst.Growth Des*. 25 (2025) 8420–8430. https://doi.org/10.1021/acs.cgd.5c00729
3. National Library of Medicine USA, PubChem adatbázis, utoljára megtekintve: 2026. 4. 21. https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/pyrrolidine-3-carboxylic%20acid
4. Nedeljko Latinović, Sladjana B. Novaković, Goran A. Bogdanović, Vlatko Kastratović, Gerald Giester, Željko K. Jaćimović, “Crystal structure of dihydrazinium 1*H*-pyrazole-3,5-dicarboxylate, C5H12N6O4”, *Z. Kristallogr. NCS* 234 (2019) 957–958. https://doi.org/10.1515/ncrs-2019-0168
5. Irena Kostova, Niculina Peica, Wolfgang Kiefer, “Raman, FT-IR, and DFT studies of 3,5-pyrazoledicarboxylic acid and its Ce(III) and Nd(III) complexes”, *J. Raman Spectrosc.* 38 (2007) 1–10. https://doi.org/10.1002/jrs.1562
6. NIST Chemistry WebBook, SRD 69, utoljára megtekintve: 2026. 4. 22. https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C2582301&Units=SI&Mask=80#IR-Spec ,
7. Helmut Günzel, Hans-Ulrich Gremlich, “Uvod u infracrvenu spektroskopiju”, 2001, Školska knjiga Zagreb
8. Slobodan M. Milosavljević, “Strukturne instrumentalne metode”, 1994, Hemijski fakultet u Beogradu