



Доломатов М. Ю.
Dolomatov M. Yu.

доктор химических наук,
профессор,
профессор кафедры
технологии нефти и газа,
ФГБОУ ВО «Уфимский
государственный нефтяной
технический университет»,
профессор кафедры
физической электроники и
нанопластики,
ФГБОУ ВО «Башкирский
государственный
университет»,
г. Уфа,
Российская Федерация



Шуткова С. А.
Shutkova S. A.

кандидат химических наук,
доцент кафедры
теплоэнергетики и физики,
ФГБОУ ВО «Башкирский
государственный аграрный
университет»,
г. Уфа,
Российская Федерация



Бахтизин Р. З.
Bakhtizin R. Z.

доктор физико-
математических наук,
профессор,
заведующий кафедрой
физической электроники и
нанопластики,
ФГБОУ ВО «Башкирский
государственный
университет»,
г. Уфа,
Российская Федерация



Шарипов Т. И.
Sharipov T. I.

кандидат физико-
математических наук,
доцент кафедры
физической электроники
и нанопластики,
ФГБОУ ВО «Башкирский
государственный
университет»,
г. Уфа,
Российская Федерация



Рыжиков О. Л.
Ryzhikov O. L.

кандидат технических наук,
доцент кафедры
физической электроники
и нанопластики,
ФГБОУ ВО «Башкирский
государственный
университет»,
г. Уфа,
Российская Федерация



Гильманшина К. А.
Gilmanshina K. A.

аспирант кафедры
технологии нефти и газа,
ФГБОУ ВО «Уфимский
государственный нефтяной
технический университет»
г. Уфа,
Российская Федерация

ИССЛЕДОВАНИЕ ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНЫХ СВОЙСТВ АМОΡФНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ НА ОСНОВЕ НАНОКЛАСТЕРОВ НЕФТЯНЫХ АСФАЛЬТЕНОВ

Проведено исследование донорно-акцепторных свойств аморфных полупроводников на основе нанокластеров нефтяных асфальтенов. Определена молекулярная и электронная структура нанокластеров, состоящих из молекулярных фрагментов нефтяных асфальтенов «континентального» типа. Объектами исследования являются асфальтены гудрона Западно-Сибирской нефти. Выделение и разделение асфальтенов проводилось на аппарате Сокслета по методике И. Р. Хайрудинова. Регистрация спектров поглощения растворов в диапазоне 280–780 нм проводилась на спектрофотометре СФ-2000. В процессе изучения спектров поглощения асфальтенов и углеводородных систем различного происхождения методом оптической спектроскопии установлено, что асфальтеновая фракция является сильным донором и акцептором электронов. Значения эффективного потенциала ионизации находятся в пределах от 5,29 до 5,59 эВ, значения эффективного сродства к электрону – от 1,80 до 1,85 эВ, значения ширины запрещенной зоны — от 3,49 до 3,74 эВ.

Исследование электронной структуры молекулярных фрагментов наночастиц асфальтенов проведено методом DFT/B3LYP с базисным набором 6-31+G* с использованием программного пакета GAUSSIAN. Расчет нанокластеров асфальтенов, образованных молекулярными фрагментами, был проведен методом молекулярной механики MM+. Квантово-химические расчеты показали, что первый вертикальный потенциал ионизации равен 6,07 эВ, сродства к электрону — 1,22 эВ, энергия активации проводимости принимает значения в интервале от 0,99 до 1,96 эВ, что в целом отражает результаты эксперимента. Данная закономерность подтверждается при исследовании электропроводности асфальтенов и концентратов на их основе. Показано, что наиболее устойчивыми являются наноагрегаты, состоящие из 6–10 нафтенно-ароматических пластин.

Ключевые слова: аморфные полупроводники, донорно-акцепторные свойства, ширина запрещенной зоны, электропроводность, нефтяные асфальтены, нанокластеры, димеры, потенциал ионизации, сродство к электрону, оптическая спектроскопия, квантово-химические расчеты.

RESEARCH OF AMORPHOUS SEMICONDUCTORS DONOR AND ACCEPTOR PROPERTIES ON OIL ASPHALTENES NANOCLUSTERS BASIS

The study of amorphous semiconductors donor and acceptor properties on the basis of oil asphaltene nanoclusters is conducted. The molecular and electronic structure of the nanoclusters consisting of molecular fragments of «continental» type oil asphaltene is defined. Research objects are asphaltene of West Siberian oil tar and asphaltene of the West Siberian Oil. Selection and division of asphaltene was carried out on the device Soxlet by I.R. Hayrudinov's technique. Registration of absorption spectrum of solutions in the range of 280-780 nanometers was carried out on spectrophotometer SP-2000. In the course of studying of absorption spectrum of asphaltene and the hydrocarbon systems of different origin by method of optical spectroscopy it is established that the asphaltene fraction is a strong donor and an acceptor of electrons. The values of the effective ionization potential are in the range from 5.29 to 5.59 eV, the values of the effective electron affinity are from 1.80 to 1.85 eV, and the band gap is from 3.49 to 3.74 eV.

The electronic structure of the molecular fragments of asphaltene nanoparticles was studied using the DFT/B3LYP method with a basic set of 6–31 + G * using the GAUSSIAN software package. The calculation of asphaltene nanoclusters formed by molecular fragments was carried out using the molecular mechanics MM+ method. Quantum chemical calculations showed that the first vertical ionization potential is 6.07 eV, electron affinity (SE) is 1.22 eV, and the conductivity activation energy takes values in the range from 0.99 to 1.96 eV, which generally reflects the results of the experiment. This pattern is confirmed in the study of the electrical conductivity of asphaltene and concentrates based on them. It is shown that the most stable are nanoaggregates consisting of 6–10 naphthenic-aromatic plates.

Key words: amorphous semiconductors, donor-acceptor properties, width of a forbidden band, conductivity, oil asphaltenes, nanoclusters, dimers, ionization potential, electron affinity, optical spectroscopy, quantum-chemical calculations.

Высокомолекулярные соединения нефти — асфальтены имеют определенную перспективу применения в качестве органических материалов для электроники и электротехники [1, 2]. В асфальтосмолистых веществах нефти, в частности асфальтенах, методами спектроскопии установлено присутствие структур, состоящих из конденсированных бензольных и нафтеновых шестичленных колец. Количество асфальтенов в сырых нефтях варьируется от 0,1 % масс. до 50,0 % масс. [3, 4]. Кроме того, в асфальтенах содержатся структуры, представляющие собой стабильные свободные радикалы, то есть частицы, имеющие неспаренные электроны. По данным многочисленных исследований методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) концентрация свободных радикалов достигает 10^{20} спин/г [5]. Многочисленные эксперименты показывают, что при высоких концентрациях свыше 100 мг/л образуются стопкообразные частицы и ассоциаты. Молекулярные массы асфальтенов по данным осмометрии, криоскопии, хромато-масс-спектрометрии варьируются от 700 до 8000 а.е.м. [6, 7]. Исследования, проведенные методом масс-спектрометрии, показывают, что молекулы нефтяных асфальтенов имеют ароматические ядра (7–8 колец) с длинными алкилированными цепочками (в среднем ~7 атомов углерода) [8]. Основными компонентами нефтяных асфальтенов являются алкилароматические, циклоалкановые, парафиновые углеводороды [8, 9]. В молекулах асфальтенов содержатся структуры, содержащие гетероатомы и металлы. Так, в молекулах асфальтенов обнаружены фрагменты пиридина, пиррола, порфириновые комплексы, а также кислотные гидроксильные, тиоловые, сложноэфирные и другие группы [9, 10]. Результаты исследования методом ^{13}C ЯМР-спектроскопии показали, что молекулы нефтяных асфальтенов имеют структуру преимущественно «континентального» типа [11].

Молекулы асфальтенов взаимодействуют с электрическим полем, так как имеют

дипольный момент до 4 D. Показано, что асфальтены являются хорошими донорами и акцепторами электронов, что подтверждается зависимостью растворимости от энергии ионизации соответствующего сольвента [12]. Проведенные исследования указывают на возможность использования асфальтенов в качестве органических электропроводящих материалов [13–15]. Целью данной работы является исследование донорно-акцепторных свойств аморфных полупроводников на основе нанокластеров димеров нефтяных асфальтенов.

Объекты исследования

Объектами исследования являются асфальтены гудрона Западно-Сибирской нефти (ЗСН).

Экспериментальные методы

Для выделения и разделения асфальтенов использована методика И.Р. Хайрудинова [16]. Электронные абсорбционные спектры растворов асфальтенов в толуоле в видимой и УФ-области (280–780 нм) регистрировались на спектрофотометре СФ-2000. Определение эффективных потенциалов ионизации (ЭПИ), сродства к электрону (ЭСЭ) и физико-химических свойств проводили по методикам [17, 18].

Расчетные методы

Исследования электронной и химической структур молекулярных фрагментов наночастиц асфальтенов проведено методом DFT/B3LYP с базисным набором 6-31+G*, используя программный пакет GAUSSIAN. Расчет нанокластеров асфальтенов, образованных молекулярными фрагментами, был проведен методом молекулярной механики MM+. Все расчеты проведены с полной оптимизацией геометрии.

Известно, что в аморфных материалах, построенных из органических молекул, происходит локализация носителей заряда, обусловленная затуханием волновых функций между молекулами. При этом предполагается, что энергия активации проводимости нанокластера зависит от энергетической щели молекулы в газовой фазе E_g^0 и энергии

поляризации P . Значения энергетической щели в газовой фазе E_g^0 определяются как разность IP потенциала ионизации и EA сродства к электрону молекулы

$$E_g^0 = IP - EA. \quad (1)$$

Химическое взаимодействие молекул может быть обусловлено образованием водородных связей внутримолекулярного типа и образованием комплексов с переносом заряда. Энергия поляризации возникает при взаимодействии электрона с полярными молекулами и дыркой, поэтому очевидно равенство

$$P = E_p. \quad (2)$$

Энергия электростатических электрон-дырочных взаимодействий E_p определяется по формуле

$$E_p = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0\epsilon\bar{r}}, \quad (3)$$

где e — элементарный заряд электрона;

ϵ_0 — электрическая постоянная;

ϵ — диэлектрическая проницаемость среды ($\epsilon=2$);

\bar{r} — среднее расстояние между молекулярными фрагментами в нанокластере ($\bar{r}=3.6 \text{ \AA}$).

В нашем случае для фрагментов асфальтенов характерно сильное межмолекулярное взаимодействие за счет образования водородных связей и переноса заряда, поэтому вносится поправка ΔE_M , которая учитывает межмолекулярное взаимодействие за счет образования водородных связей и дальнедействующих сил Ван-дер-Ваальса. Эти поправки учитываются эмпирическими парными потенциалами в методе молекулярной механики. Энергию межмолекулярного взаимодействия ΔE_M молекулярных фрагментов в структурах нанокластеров определяли по зависимости:

$$\Delta E_M = \left| \frac{E - N \cdot E_{M_i}}{N} \right|, \quad (4)$$

где E — энергия взаимодействия частиц, составляющих нанокластеры;

E_{M_i} — потенциальная энергия структурной единицы, входящей в состав нанокластера;

N — количество структурных единиц в нанокластере.

Энергию активации проводимости вычисляем по известной зависимости:

$$E_A = E_g^0 - 2P - \Delta E_M. \quad (5)$$

В структуры молекулярных фрагментов нанокластеров включены ароматические, нафтеновые и пиррольные кольца, карбонильные группы, а также цепочки C_2H_5 -заместителей. Молекулярные нафтеноароматические фрагменты в димерах соединены алкановыми мостиками, состоящими из четырех атомов углерода. Структура молекулярного димера содержит 24 ароматических, 2 нафтеновых и 2 пиррольных кольца. Молекулярная масса нафтеноароматического фрагмента равна 1234 а.е.м. Отношение (С/Н)мол димера равно 17,27. Изучены нанокластеры, содержащие от 2 до 10 молекулярных фрагментов.

Результаты и обсуждение

Методом электронной феноменологической спектроскопии определены эффективные потенциалы ионизации (5,29–5,59 эВ), сродства к электрону (1,80–1,85 эВ) и ширины запрещенной зоны в газовой фазе (3,49–3,74 эВ) асфальтенов гудрона ЗСН. Среднечисловая молекулярная масса асфальтенов находится в диапазоне от 3798 до 3884 а.е.м.

Исследование электронной структуры молекулярных фрагментов наночастиц нефтяных асфальтенов, проведенное методом DFT/B3LYP, показало, что адиабатический первый потенциал ионизации равен 6,07 эВ, сродство к электрону — 1,22 эВ. Результаты расчета согласуются с данными, полученными термодинамическим методом [19].

Рассчитаны значения дипольных моментов нанокластеров (от 2,80 до 3,44 D).

Рассчитаны значения энергии активации проводимости нефтяных асфальтенов. Показано, что при увеличении количества молекулярных фрагментов в кластере от 2 до 10 значения энергии активации проводимости находятся в пределах от 0,99 до 1,96 эВ. Результаты расчета энергии активации проводимости совпадают с данными, полученными путем измерения электрической проводимости [20].

Исследования показывают, что, начиная с определенного значения количества молекулярных фрагментов в нанокластере (около 6),

значения энергии активации проводимости принимают определенное значение (1,86 эВ). Следовательно, при определенном количестве молекулярных фрагментов наступает стабилизация образованных нанокластеров. Тем самым подтверждается теория, согласно которой наиболее устойчивыми являются наноагрегаты, состоящие из 6–10 нафтоароматических пластин.

Выводы

Экспериментально установлено, что величина эффективного потенциала ионизации находится в пределах от 5,29 до 5,59 эВ, а величина эффективного сродства к электрону — от 1,80 до 1,85 эВ.

Расчеты показывают, что величина запрещенной зоны проводимости варьируется от

3,49 до 3,74 эВ. Квантово-химические расчеты показали, что первый вертикальный потенциал ионизации равен 6,07 эВ, сродство к электрону — 1,22 эВ. Кроме того, по результатам экспериментального исследования установлено, что энергия активации проводимости достигает 1,35 эВ [20]. Это подтверждают расчеты, согласно которым эта энергия активации проводимости нанокластеров нефтяных асфальтенов принимает значения в интервале от 0,99 до 1,96 эВ. Показано, что наиболее устойчивыми являются наноагрегаты, состоящие из 6–10 нафтоароматических пластин.

Работа выполнена по гранту РФФИ № 17-42-020616.

Список литературы

1. Elbing M., Ochs R., Koentopp M., Fischer M., Hanisch C., Weigend F., Evers F., Weber H.B., Mayor M. A Single-Molecule Diode // *Proceedings of the National Academy of Sciences Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2005. No. 102. P. 8815.
2. Bracciale M., Sennato S., Marrocchi A. On Evaluating Organic Electronic Materials of Asphaltene Components // *Sixth International Meeting on Molecular Electronics*. 03–07 December 2012, Grenoble, France. P. 285.
3. Speight J.G. *Handbook of Petroleum Analysis*. JohnWiley & Sons, 2001. 480 p.
4. Sharma C.D., Bhagat S.D., Erhan S.Z. Maltenes and Asphaltenes of Petroleum Vacuum Residues: Physico-Chemical Characterization // *Petroleum Science and Technology*. 2007. No. 25. P. 93-104.
5. Унгер Ф.Г., Андреева Л.Н. *Фундаментальные аспекты химии нефти. Природа смол и асфальтенов*. Новосибирск: Наука, 1995. 192 с.
6. Hortal A.R., Martinez-Haya B., Lobato M.D., Pedrosa J.M., Lago S. On the Determination of Molecular Weight Distributions of Asphaltenes and Their Aggregates in Laser Desorption Ionization Experiments // *J. Mass Spectrom.* 2006. Vol. 41. No. 7. P. 960–968.
7. Groenzin H., Mullins O.C. Molecular Size and Structure of Asphaltenes from Various Sources // *Energy Fuels*. 2000. Vol. 14, No 3. P. 677.

8. Andrews A.B., Edwards J.C., Pomerantz A.E., Mullins O.C., Dennis Nordlund D.K. Comparison of Coal-Derived and Petroleum Asphaltenes by ¹³C Nuclear Magnetic Resonance // DEPT, and XRS Energy Fuels. 2011. Vol. 25. No. 7. P. 3068.
9. Mullins O.C., Sheu E.Y. *Structures and Dynamics of Asphaltenes*. Springer Science+Business Media, LLC, 1998. 293 p.
10. Mitra-Kirtley S., Mullins O.C., Van Elp J., George S.J., Chen J., Cramer S.P. Determination of the Nitrogen Chemical Structures in Petroleum Asphaltenes Using XANES Spectroscopy. *J. Am. Chem. Soc.* 1993. Vol. 115. No. 1. P. 252–258.
11. Sabbah H., Morrow A.L., Pomerantz A.E., Zare R.N. Evidence for Island Structures as the Dominant Architecture of Asphaltenes // *Energy Fuels*. 2011. Vol. 25. No. 4. P. 1597–1604.
12. Варфоломеев Д.Ф., Доломатов М.Ю., Хайрутдинов И.Р., Унгер Ф.Г. К вопросу о донорно-акцепторных взаимодействиях при растворении асфальтенов // *Достижения в исследовании высокомолекулярных соединений нефти*. Томск, 1985. С. 11.
13. Дезорцев С.В., Доломатов М.Ю., Шуткова С.А. Технология получения полупроводниковых материалов на основе нефтяных асфальтенов // *Химическая технология*. 2012. Т. 13. № 2. С. 88–92.
14. Доломатов М.Ю., Дезорцев С.В., Шуткова С.А., Шуляковская Д.О. Асфальто-

смолистые вещества и продукты на их основе как возможные материалы для нанoeлектроники // *Наукоемкие технологии*. 2012. Т. 13. № 6. С. 18-22.

15. Dolomatov M.Yu., Desortsev S.V., Shutkova S.A. Ashaltenes of Oil and Hydrocarbon Distillates as Nanoscale Semiconductors // *Journal of Materials Science and Engineering*. 2012. Vol. 2. No. 2. P. 151–157.

16. Хайрудинов И.Р., Султанов Ф.М., Теляшев Э.Г. Современные процессы сольвентной деасфальтизации нефтяных остатков. Уфа: Изд-во ГУП ИНХП РБ. Серия «Библиотека нефтепереработчика», 2011. 208 с.

17. Долوماتов М.Ю., Шуляковская Д.О. Оценка физико-химических свойств многокомпонентных углеводородных систем по интегральным характеристикам электронных спектров поглощения // *Химия и технология топлив и масел*. 2013. № 2. С. 49–52.

18. Dolomatov M.Yu., Shulyakovskaya D.O., Mukaeva G.R., Yarmukhametova G.U., Latypov K.F. Simple Characteristics Estimation Methods of Material and Molecule Electronic Structure // *Journal of Materials Science and Engineering*. 2012. Т. 2. No. 4. P. 261–268.

19. Долوماتов М.Ю., Марушкин А.Б., Гимаев Р.Н., Селивестров М.М. Термодинамика формирования надмолекулярной структуры асфальтенов // *Химия твердого топлива*. 1989. № 6. С. 83–86.

20. Petrov A.M., Dolomatov M.Yu., Bakhizin R.Z., Ryzhikov O.L., Khayrudinov I.R. Features of Temperature Dependence of Electrical Conductivity in Multicomponent Organic Spin Glasses // *Inorganic Materials: Applied Research*. 2016. Vol.7. Issue 4. P. 453–457.

References

1. Elbing M., Ochs R., Koentopp M., Fischer M., Hanisch C., Weigend F., Evers F., Weber H.B., Mayor M. A Single-Molecule Diode. *Proceedings of the National Academy of Sciences Natl. Acad. Sci. USA*, 2005, No. 102, pp. 8815.

2. Bracciale M., Sennato S., Marrocchi A. On Evaluating Organic Electronic Materials of Asphaltene Components. *Sixth International*

Meeting on Molecular Electronics, 03-07 December 2012, Grenoble, France, pp. 285.

3. Speight J.G. *Handbook of Petroleum Analysis*. JohnWiley & Sons, 2001. 480 p.

4. Sharma C.D., Bhagat S.D., Erhan S.Z. *Maltenes and Asphaltenes of Petroleum Vacuum Residues: Physico-Chemical Characterization*. *Petroleum Science and Technology*, 2007, No. 25, pp. 93-104.

5. Unger F.G., Andreeva L.N. *Fundamental'nye aspekty khimii nefti. Priroda smol i asfal'tenov* [Fundamental Aspects of Petroleum Chemistry. The Nature of Resins and Asphaltenes]. Novosibirsk, Nauka Publ., 1995. 192 p. [in Russian].

6. Hortal A.R., Martinez-Haya V., Lobato M.D., Pedrosa J.M., Lago S. On the Determination of Molecular Weight Distributions of Asphaltenes and Their Aggregates in Laser Desorption Ionization Experiments. *J. Mass Spectrom*, 2006, Vol. 41, No. 7, pp. 960–968.

7. Groenzin H., Mullins O.C. Molecular Size and Structure of Asphaltenes from Various Sources. *Energy Fuels*, 2000, Vol. 14, No 3, pp. 677.

8. Andrews A.B., Edwards J.C., Pomerantz A.E., Mullins O.C., Dennis Nordlund D.K. Comparison of Coal-Derived and Petroleum Asphaltenes by ¹³C Nuclear Magnetic Resonance. DEPT, and XRS *Energy Fuels*, 2011, Vol. 25, No. 7, pp. 3068.

9. Mullins O.C., Sheu E.Y. *Structures and Dynamics of Asphaltenes*. Springer Science+Business Media, LLC, 1998. 293 p.

10. Mitra-Kirtley S., Mullins O.C., Van Elp J., George S.J., Chen J., Cramer S.P. Determination of the Nitrogen Chemical Structures in Petroleum Asphaltenes Using XANES Spectroscopy. *J. Am. Chem. Soc.*, 1993, Vol. 115, No. 1, pp. 252-258.

11. Sabbah H., Morrow A.L., Pomerantz A.E., Zare R.N. Evidence for Island Structures as the Dominant Architecture of Asphaltenes. *Energy Fuels*, 2011, Vol. 25, No. 4, pp. 1597–1604.

12. Varfolomeev D.F., Dolomatov M.Yu., Khairutdinov I.R., Unger F.G. K voprosu o donorno-aktseptornykh vzaimodeistviyakh pri rastvorenii asfal'tenov [To the Issue of Donor-acceptor Interactions in the Dissolution of Asphaltenes]. *Dostizheniya v issledovanii*

vyssokomolekulyarnykh soedinenii nefiti [Achievements in the Study of High Molecular Weight Oil Compounds]. Tomsk, 1985. pp. 11.

13. Dezortsev S.V., Dolomatov M.Yu., Shutkova S.A. Tekhnologiya polucheniya poluprovodnikovykh materialov na osnove neftyanykh asfal'tenov [The Technology of Obtaining Semiconductor Materials Based on Petroleum Asphaltenes]. *Khimicheskaya tekhnologiya — Chemical Technology*, 2012, Vol. 13, No. 2, pp. 88–92. [in Russian].

14. Dolomatov M.Yu., Dezortsev S.V., Shutkova S.A., Shulyakovskaya D.O. Asfal'tosmolistye veshchestva i produkty na ikh osnove kak vozmozhnye materialy dlya nanoelektroniki [Asphaltene-Pitch Substances and Wares on Their Base as Possible Materials for Nano-Electronics]. *Naukoemkie Tekhnologii — Science Intensive Technologies*, 2012, Vol. 13, No. 6, pp. 18–22. [in Russian].

15. Dolomatov M.Yu., Desortsev S.V., Shutkova S.A. Ashaltenes of Oil and Hydrocarbon Distillates as Nanoscale Semiconductors. *Journal of Materials Science and Engineering*, 2012, Vol. 2, No. 2, pp. 151–157.

16. Khairudinov I.R., Sultanov F.M., Telyashev E.G. *Sovremennye protsessy sol'ventnoi deasfal'tizatsii neftyanykh ostatkov* [Modern Processes of Solvent Deasphalting of Oil Residues]. Ufa, Izd-vo GUP INKhP RB. Seriya «Biblioteka neftepererabotchika», 2011. 208 p. [in Russian].

17. Dolomatov M.Yu., Shulyakovskaya D.O. Otsenka fiziko-khimicheskikh svoystv mnogokomponentnykh uglevodородnykh sistem po integral'nym kharakteristikam elektronnykh spektrov pogloshcheniya [Determination of Physicochemical Properties of Multicomponent Hydrocarbon Systems Based on Integral Characteristics of Electronic Absorption Spectra]. *Khimiya i Tekhnologiya Topliv i Masel — Chemistry and Technology of Fuels and Oils*, 2013, No. 2, pp. 49–52. [in Russian].

18. Dolomatov M.Yu., Shulyakovskaya D.O., Mukaeva G.R., Yarmukhametova G.U., Latypov K.F. Simple Characteristics Estimation Methods of Material and Molecule Electronic Structure. *Journal of Materials Science and Engineering*, 2012, Vol. 2, No. 4, pp. 261–268.

19. Dolomatov M.Yu., Marushkin A.B., Gimaev R.N., Selivestrov M.M. Termodinamika formirovaniya nadmolekulyarnoi struktury asfal'tenov [Asphaltene Supramolecular Structure Formation Thermodynamics]. *Khimiya tverdogo topliva — Chemistry of Solid Fuel*, 1989, No. 6, pp. 83–86. [in Russian].

20. Petrov A.M., Dolomatov M.Yu., Bakh-tizin R.Z., Ryzhikov O.L., Khayrudinov I.R. Features of Temperature Dependence of Electrical Conductivity in Multicomponent Organic Spin Glasses. *Inorganic Materials: Applied Research*, 2016, Vol. 7, Issue 4, pp. 453–457.