

УДК 544.31:544.169:547.022.1
DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2021.3.14

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОСВЯЗИ ЭНЕРГИИ НАПРЯЖЕНИЯ И СТРОЕНИЯ МОНО- И ДИЗАМЕЩЕННЫХ ЦИКЛОПРОПАНОВ С ПОМОЩЬЮ QTAIM ТОПОЛОГИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ

© Е. С. Ахметшина, С. Л. Хурсан*

Уфимский институт химии УФИЦ РАН
Россия, Республика Башкортостан, 450054 г. Уфа, пр. Октября, 69.

Тел.: +7 (347) 235 61 11.

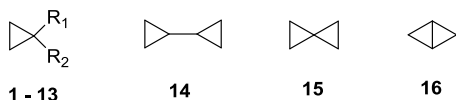
*Email: khursansl@anrb.ru

Композитным методом G4 проведен расчет энергий напряжения (SE) моно- и дизамещенных фтор-, хлор-, метил-, метоксициклопропанов с использованием авторской методологии полного набора гомодесмотических реакций. Выполнен QTAIM топологический анализ распределения электронной плотности в циклопропанах тестового набора (с учетом изученных ранее – всего 16 соединений) с целью выявления зависимости SE от строения циклопропана и природы заместителей. В изученном наборе соединений величина SE в расчете на один C₃-цикл изменяется в широких пределах, от 103.9 кДж/моль – для ацетилциклопропана до 164.9 кДж/моль – для 1,1-дифторциклопропана. Прослежена зависимость найденных величин SE от трех структурных индексов циклопропанов: отклонения связевой критической точки от линии связи, разности длины связевого пути и линии связи и величины лапласиана электронной плотности в критической точке цикла. За исключением бициклобутана (SE на 1 цикл = 141.5 кДж/моль) установлена прекрасная линейная корреляция SE со всеми индексами во всем диапазоне изменения энергий напряжения, что позволяет предложить установленные корреляционные зависимости для экспресс-оценки энергий напряжения в соединениях, содержащих циклопропановые фрагменты.

Ключевые слова: гомодесмотический метод, энергия напряжения, QTAIM анализ, связь «структура-свойство».

Введение

Анализ молекулярной энергетики органических веществ является фундаментальной задачей современной физической органической химии. Определение влияния структурных особенностей на изменение энергетических характеристик вещества представляет интерес для исследователей уже многие годы. Структурные эффекты могут иметь разнообразную природу – как дестабилизировать структуру, так и делать ее более устойчивой, что напрямую влияет на реакционные индексы соединений и их физико-химические свойства. Однако зачастую структура соединения описывается широким рядом эффектов, каждый из которых может иметь различную природу и соответственно оказывать разнообразное влияние на энергетические характеристики вещества. В настоящей работе представлен авторский метод разделения энергетических вкладов различных структурных эффектов на примере репрезентативного набора замещенных циклопропанов:



R₁ = H, R₂ = H (1), Me (2), F (3), Cl (4), MeO (5), NH₂ (6), CN (7), CH₂=CH (8), MeCO (9);
R₁ = R₂ = Me (10), F (11), Cl (12), MeO (13).

В основе метода лежит гомодесмотическая методология – одна из сравнительных схем расчета

термодинамических характеристик веществ, основанная на конструировании формальных термохимических уравнений – гомодесмотических реакций (ГДР) [1]. При конструировании ГДР необходим учет ряда балансов: материального, связевого, группового, изогирического и баланса по невалентным взаимодействиям. Выполнение всех балансов приводит к термонеutralности формального превращения. Отклонение теплового эффекта ГДР от нуля в результате дисбаланса по какому-либо энергетическому вкладу становится количественной мерой этого невалентного взаимодействия. Данное обстоятельство, а также генерация полного набора независимых ГДР для исследуемого соединения с помощью теоретико-графового подхода [2–3] позволяют количественно разделить невалентные эффекты различной природы. Это, в свою очередь, дает возможность более корректного и достоверного анализа взаимосвязи типа «структура-свойство», в частности, для такой важной энергетической величины, как энергия напряжения циклического соединения. В настоящей работе для тестового набора циклопропанов рассчитаны энергии напряжения, свободные от «мешающих» невалентных эффектов, и прослежена взаимосвязь SE со строением циклического соединения с помощью топологического анализа распределения электронной плотности методом Р. Бейдера – «Атом в молекуле» – AIM [4].

Методическая часть

В настоящей работе проведены термохимические расчеты для моно- и 1,1-дизамещенных хлор-,

фтор-, метокси- и метилциклопропанов, а также использованы опубликованные ранее данные для циклопропана, монозамещенных винил-, нитрил-, amino-, ацетилциклопропанов, а также для бициклических структур, содержащих циклопропановый фрагмент, – спиропентана, бициклопропила и бициклобутана [5–7]. Для всех соединений сконструированы полные наборы ГДР с применением авторского подхода, основанного на теоретико-графовом анализе исследуемой структуры. Согласно этому подходу, анализируемое соединение представляется в виде графа, узлами которого являются термохимические группы, а ребрами – связи между ними. Математическим представлением графа является матрица смежности, единицами в которой обозначаются связи между термохимическими группами, а нулями – их отсутствие. Последовательное обнуление такой матрицы приводит к получению матриц меньшего размера, которые отвечают структурам графа референсных соединений, а также позволяет получить конечный набор независимых ГДР, отвечающих полной декомпозиции анализируемой структуры. При подборе структур реперных соединений выбирали конформер с минимальным числом репульсивных невалентных взаимодействий, описанных в литературных источниках [8–9]. Для ряда сложных структур осуществляли конформационный поиск наиболее стабильных изомеров с помощью программы Chemosophia [10].

С использованием квантово-химического комбинированного метода G4 [11] оптимизированы структуры участников ГДР, вычислены значения их абсолютных энтальпий. Ранее [6] этот метод был отмечен как наиболее надежный для термодинамического описания циклических соединений. Расчеты выполнены с использованием программы Gaussian-09, Revision C1 [12]. Из абсолютных энтальпий исследуемого и реперных соединений найдены значения тепловых эффектов $\Delta_r H^\circ$ каждой ГДР.

Влияние структурных эффектов на величину SE изучено с помощью QTAIM топологического анализа распределения электронной плотности (EDD) в исследуемых циклопропанах и прослежены закономерности изменения EDD от природы заместителя. Волновые функции исследуемых соединений, полученные в приближении CCSD(T)/GTBas1, обрабатывали с помощью программного пакета AIMALL [13].

Результаты и их обсуждение

Определение энергии напряжения SE . Для хлор-, метил-, метокси- и фторзамещенных циклопропанов сконструированы полные наборы ГДР. На рис. 1 приведен полный набор ГДР для 1,1-дифторциклопропана. Композитным методом G4 вычислены абсолютные энтальпии всех участников ГДР, с помощью которых получены значения тепловых эффектов $\Delta_r H^\circ$ каждой реакции. Наблюдается удовлетворительная сходимость результатов расчета $\Delta_r H^\circ$ в каждом полном наборе (табл. 1), при этом тепловые эффекты отличны от нуля, что связано с нескомпенсированной в гомодесмическом уравнении величины SE . Кроме того, в реперных структурах реализуются различные невалентные взаимодействия, которые отсутствуют в анализируемом циклопропане. Таким образом, $\Delta_r H^\circ$ ГДР равен комбинации энергий всех нескомпенсированных эффектов. В частности, референсными структурами для хлор- и фторзамещенных циклопропанов являются ациклические галогеналканы (рис. 1), в которых реализуется слабая внутримолекулярная водородная связь $\text{Hal}\cdots\text{H}$ 1,5-типа. В метил- и метоксизамещенных референсных структурах имеет место 1,4-углерод-углеродное взаимодействие (*gauche*-эффект). Особенностью строения 1,1-диметоксициклопропана и некоторых реперных структур является $n(\text{O}) \rightarrow \sigma^*(\text{C}-\text{O})$ взаимодействие, известное как аномерный эффект.

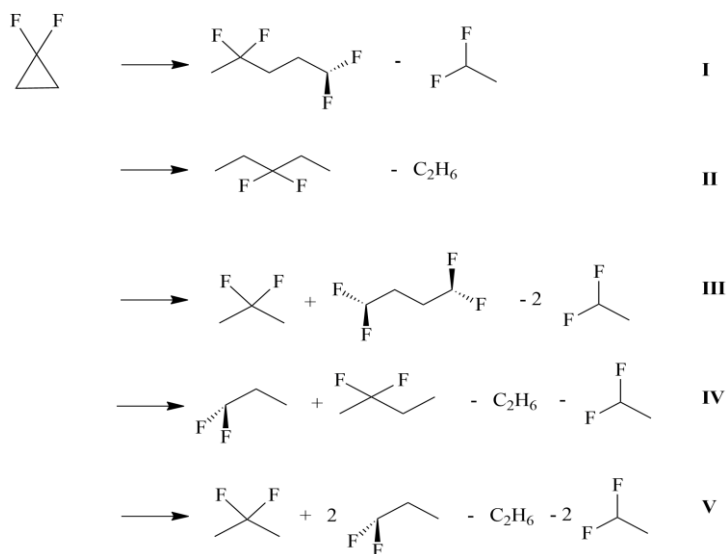


Рис. 1. Полный набор ГДР для 1,1-дифторциклопропана.

Усредненные значения энтальпий гомодесмотических реакций ($\Delta_r H^\circ$) и результаты определения энергий напряжения (SE) циклопропанов, свободных от посторонних невалентных взаимодействий (NVE)

Соединение	$\Delta_r H^\circ$, кДж/моль	Невалентное взаимодействие		SE , кДж/моль
		Тип эффекта	NVE , кДж/моль	
2	-114.8 ± 1.6	<i>gauche</i>	2.4	118.5 ± 0.3
3	-140.1 ± 0.7	1,5 – F-H	-1.1	137.9 ± 0.7
4	-134.4 ± 0.5	1,5 – Cl-H	-0.9	132.7 ± 0.5
5	-141.1 ± 1.1	<i>gauche</i>	2.4	145.3 ± 1.6
10	-111.4 ± 3.4	<i>gauche</i>	2.4	117.0 ± 0.8
11	-169.3 ± 1.2	1,5 – F-H	-1.1	164.9 ± 1.2
12	-134.4 ± 0.5	1,5 – Cl-H	-0.9	143.6 ± 0.9
13	-134.5 ± 2.3	<i>gauche</i> аномерный	2.4 -20.0	144.3 ± 1.3

Количественный учет энергетического вклада «посторонних» невалентных эффектов проведен гомодесмотическим методом либо с помощью множественного регрессионного анализа [6], либо по тепловым эффектам специальных ГДР для референсных соединений, при подборе которых руководствовались принципом несокращенности рассчитываемого эффекта. Тепловой эффект такой ГДР с обратным знаком равен энергии неучтенного взаимодействия. При вычислении SE , свободной от других невалентных взаимодействий, учитывали также энергетический вклад «эффекта малых молекул» (-1 кДж/моль) [6]. Предположительно, этот эффект связан с остаточной размерной несогласованностью композитного метода G4. Таким образом, вычитанием суммарной энергии невалентных взаимодействий (NVE) из величины $\Delta_r H^\circ$ ГДР мы получаем энергию напряжения SE циклопропана с обратным знаком. Результаты расчетов SE и величины NVE представлены в табл. 1. Энергии напряжения соединений **1**, **6–9**, **14–16** взяты из [6], где они были получены с использованием аналогичного подхода.

QTAIM анализ зависимости SE от строения циклопропана. Результаты расчетов SE , свободной от NVE , существенно различаются ($104 \div 283$ кДж/моль) в зависимости от заместителя в циклопропановом кольце, что свидетельствует о сильном влиянии природы заместителя на напряженность трехчленного цикла. Причем возрастание энергии напряжения наблюдается для заместителей

с сильно различающимися электронными свойствами (от сильных электроно-доноров – метокси-заместитель до сильных акцепторов – $-CN$) и способностью к сопряжению. Зависимость SE от природы заместителя сложна, но, безусловно, связана с его влиянием на распределение электронной плотности EDD в цикле. Для получения количественной информации о характере EDD и особенностях электронного строения циклопропанов проведен QTAIM топологический анализ электронной плотности исследуемых соединений **1–16**. На рис. 2 показаны результаты QTAIM анализа для простейшего циклопропана **1** и 1,1-дифторциклопропана **11**.

По сравнению с незамещенным циклом, атомы фтора оттягивают на себя электронную плотность, уменьшая ее в бассейне атомов углерода, что иллюстрируется смещением критической точки цикла от полярной части молекулы. В качестве структурных индексов для описания изменения SE в тестовом наборе **1–16** были использованы различные геометрические, электронные и топологические характеристики. Наилучшие корреляционные зависимости « SE – строение» получены для суммарного отклонения связевой критической точки от линии связи ($DBCP$), которое является характеристикой кривизны «банановой» C-C связи в цикле, аналогичного по физическому смыслу параметра – разности длины связевого пути и линии связи ($BPL - GBL$), а также величины лапласиана электронной плотности $\nabla^2 \rho$ в критической точке цикла (табл. 2).

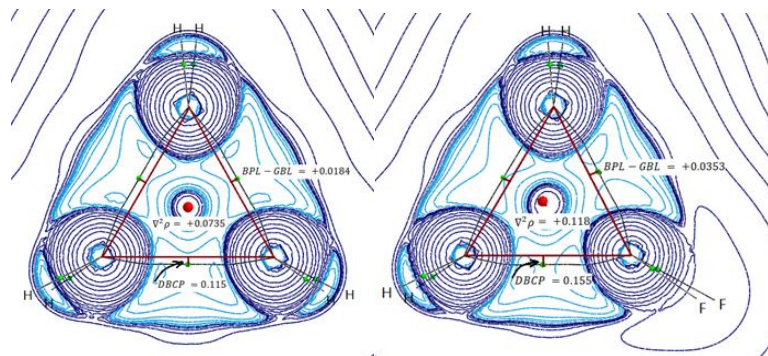


Рис. 2. Контурные AIM-карты лапласиана электронной плотности циклопропана и 1,1-дифторциклопропана с указанием трех индексов энергии напряжения – $DBCP$, $BPL - GBL$ и $\nabla^2 \rho$. Расчет в приближении CCSD(T)/GTBas1.

Таблица 2

Структурные индексы (отклонение от линии связи *DBCP*; разность расстояния между атомными аттракторами *GBL* и длиной связевого пути *BPL*; лапласиан электронной плотности $\nabla^2\rho$) по результатам QTAIM анализа электронной плотности исследуемых соединений

Структура	SE^a	$DBCP^b$	$BPL - GBL^b$	$\nabla^2\rho$
1	117.4 [6]	0.346	0.0553	0.0735
2	118.5	0.356	0.0588	0.0788
3	137.9	0.382	0.0688	0.0929
4	132.7	0.373	0.0670	0.0905
5	145.3	0.391	0.0691	0.1030
6	116.7 [6]	0.354	0.0606	0.0694
7	117.3 [6]	0.333	0.0536	0.0740
8	113.0 [6]	0.341	0.0544	0.0745
9	103.9 [6]	0.303	0.0469	0.0551
10	117.0	0.362	0.0612	0.0833
11	164.9	0.419	0.0846	0.1181
12	143.6	0.389	0.0776	0.1057
13	144.3	0.400	0.0771	0.0991
14	233.6 [6]	0.716	0.1182	0.1647
15	266.8 [6]	0.767	0.1335	0.1955
16^c	282.9 [6]	0.699	0.1185	0.1397
$tg\alpha$	–	334 ± 17	1900 ± 70	1230 ± 50
Отсечение ^a	–	6 ± 7	8 ± 5	24 ± 5
R	–	0.984	0.991	0.991
MAX ^{a, d}	–	19	11	12
MAD ^{a, e}	–	7	5	5

^a кДж/моль; ^b Атомные единицы длины (боровские радиусы).

^c Исключено из корреляционного анализа.

^d Максимальное абсолютное отклонение.

^e Среднее абсолютное отклонение.

Зависимости, полученные с этими индексами, характеризуются высокими коэффициентами линейной корреляции ($R = 0.98 - 0.99$), корреляционные параметры приведены в *табл. 2*. В качестве примера на *рис. 3* приведена зависимость SE от $BPL - GBL$. Видно, что внутреннее напряжение буквально распирает молекулу изнутри, увеличивая изогнутость С-С связей трехчленного цикла. Из соединений тестового набора только SE бициклобутана **16** не удовлетворяет установленным корреляциям. Этот результат выглядит вполне логичным, поскольку в аннелированных напряженных циклах внутренняя С-С связь не имеет возможность принять банано-подобный вид по понятным причинам.

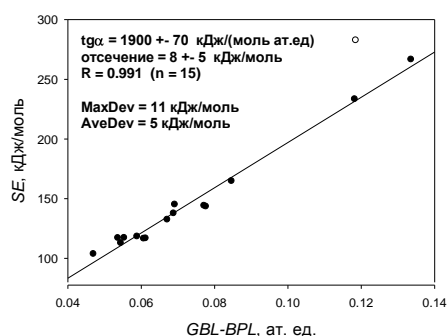


Рис. 3. Зависимость энергии напряжения циклопропанов (кДж/моль) от разности расстояния между атомными аттракторами *GBL* и длиной связевого пути *BPL* (выражено в боровских радиусах). Точка, сильно отклоняющаяся от корреляционной зависимости, соответствует бициклобутану.

В расчете на один цикл наибольшей величиной SE характеризуется 1,1-дифторциклопропан **11**. Высокая электроотрицательность атомов фтора обуславливает существенную поляризацию С-С связей цикла: АИМ заряд на атоме углерода CF_2 группы равен +1.281, на атомах CH_2 фрагментов -0.006 а.е. соответственно. Поляризованная связь несколько утрачивает свою эллиптичность, т.е. частично кратный характер (0.329 для F_2C-CH_2 и 0.555 для H_2C-CH_2 связей соответственно) и, следовательно, легче изгибается. Интересно отметить, что заместители, способные к π -сопряжению, должны усиливать эллиптичность С-С связей и, таким образом, уменьшать величину параметров $DBCP$ и $BPL - GBL$. Как видно из *табл. 2*, циклопропаны **7–9** характеризуются наименьшей энергией напряжения в изученном тестовом наборе, что согласуется с нашими представлениями о природе влияния заместителя на величину SE в циклопропанах.

Очевидно, что поляризация С-С связей циклопропанового цикла как внутренняя причина роста SE может быть осуществлена и электронодонорными заместителями. Действительно, метоксициклопропан **5** имеет даже несколько большую энергию напряжения, чем фтор-**3** или хлорциклопропан **4**, и более выраженную банановость углерод-углеродных связей (*табл. 2*).

Выводы

Разработанная методика описывает широкий диапазон энергий напряжения циклопропановых структур (более 160 кДж/моль) и характеризуется разнообразием заместителей в тестовом наборе

циклопропанов, поэтому ее можно рекомендовать для экспресс-оценки энергий напряжения соединений циклопропанового ряда, химия и практическая применимость которых многообразна. Средняя абсолютная погрешность оценки SE составляет всего 5 кДж/моль (табл. 2) при использовании в качестве структурного индекса параметр $BPL - GBL$ или лапласиан электронной плотности в критической точке цикла.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант №20-33-90194. Все квантово-химические вычисления проводили на оборудовании центра коллективного пользования «Химия» Уфимского института химии УФИЦ РАН и РЦКП «Агидель» УФИЦ РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. Хурсан С. Л., Исмагилова А. С., Ахмеров А. А., Спивак С. И. Конструирование гомодесмических реакций для расчета энтальпий образования органических соединений // Журнал физической химии. 2016. Т. 90. №4. С. 569–575.
2. Хурсан С. Л., Исмагилова А. С., Спивак С. И. Теоретико-графовый метод определения базиса гомодесмических реакций для ациклических химических соединений // Доклады Академии наук. 2017. Т. 474. №4. С. 454–457.
3. Хурсан С. Л., Исмагилова А. С., Зиганшина Ф. Т., Ахметьянова А. И. Конструирование полного набора гомодесмических реакций с использованием метода Depth-First Search // Журнал физической химии. 2021. Т. 95. №7. С. 1–9. DOI: 10.31857/S0044453721070141.
4. Bader R. Atoms in molecules: a quantum theory. USA: Oxford University press, 1994. ISBN 978-0-19-855865-1.
5. Бурцева Е. С., Ахметьянова А. И., Исмагилова А. С., Хурсан С. Л. Гомодесмический метод определения невалентных эффектов в ряду производных циклопропана // Вестник Башкирского университета. 2017. Т. 22. №4. С. 946–952.
6. Akhmetshina E. S., Khursan S. L. Complete set of homodesmotic reactions for the analysis of non-valence effects in the three-to-six-membered cyclic organic compounds // *Thermochemica Acta*. 2020. Vol. 685. Pp. 178541.
7. Ахметшина Е. С., Хурсан С. Л. Использование формализма реакций разделения групп для анализа невалентных эффектов органических соединений: трехчленные углеродные циклы // Известия Академии наук. Серия химическая. 2020. №1. С. 76–83.
8. Khursan S. L., The standard enthalpies of formation of fluorinated alkanes: Nonempirical quantum-chemical calculations // *Russian Journal of Physical Chemistry*. 2004. Vol. 78. Pp. 34–42.
9. Smith M. B. *March's advanced organic chemistry: reactions, mechanisms, and structure*. Wiley, 2013.
10. Potemkin V. A., Pogrebnoy A. A., Grishina M. A. Technique for energy decomposition in the study of "receptor-ligand" complexes // *Journal of Chemical Information and Modeling*. 2009. Vol. 49. Pp. 1389–406.
11. Curtiss L. A., Redfern P. C., Raghavachari K. Gaussian-4 theory // *The Journal of Chemical Physics*. 2007. Vol. 126. P. 084108.
12. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., Scuseria G. E., Robb M. A., Cheeseman J. R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G. A., Nakatsuji H., Caricato M., Li X., Hratchian H. P., Izmaylov A. F., Bloino J., Zheng G., Sonnenberg J. L., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven Jr. T., Montgomery J. E., Peralta F., Ogliaro M., Bearpark J. J., Heyd E., Brothers K. N., Kudin V. N., Staroverov R., Kobayashi J., Normand K., Raghavachari A., Rendell J. C., Burant S. S., Iyengar J., Tomasi M., Cossi N., Rega J. M., Millam M., Klene J. E., Knox J. B., Cross V., Bakken C., Adamo J., Jaramillo R., Gomperts R. E., Stratmann O., Yazyev A. J., Austin R., Cammi C., Pomelli J. W., Ochterski R. L., Martin K., Morokuma V. G., Zakrzewski G. A., Voth P., Salvador J. J., Dannenberg S., Dapprich A. D., Daniels, Farkas Ö., Foresman J. B., Ortiz J. V., Cioslowski J., Fox D. J., Gaussian 09, Revision C. 1, Gaussian Inc., Wallingford CT, 2009.
13. AIMAll (Version 19.10.12), Todd A. Keith, TK Gristmill Software, Overland Park KS, USA, 2019. (aim.tkgristmill.com).

Поступила в редакцию 12.05.2021 г.

DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2021.3.14

**STUDY OF THE “STRUCTURE – STRAIN ENERGY” RELATIONSHIP
IN A SERIES OF MONO- AND DISUBSTITUTED CYCLOPROPANES
BY QTAIM TOPOLOGICAL ANALYSIS OF ELECTRON DENSITY**

© E. S. Akhmetshina, S. L. Khursan*

*Ufa Institute of Chemistry, Ufa Federal Research Center of RAS
69 Oktyabrya Avenue, 450054 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.*

Phone: +7 (347) 235 61 11.

**Email: khursansl@anrb.ru*

Composite method G4 was used to calculate strain energies (SE) of mono- and disubstituted fluoro-, chloro-, methyl-, methoxycyclopropanes using the authors' methodology of a complete set of homodesmotic reactions. A QTAIM topological analysis of the electron density distribution (16 compounds with the previously studied ones) was carried out in order to reveal the quantitative “structure-activity” relationship of SE in the test set of cyclopropanes with substituents of various nature. The SE values (per one C₃-cycle) vary within wide limits, from 103.9 kJ/mol for acetylcyclopropane to 164.9 kJ/mol for 1,1-difluorocyclopropane. The QSAR for the SE values was examined using three structural indices of cyclopropane compounds, namely: the deviation of the bond critical point from the bond line (DBCP), the difference in the bond path length and the distance between atomic attractors (BPL – GBL), and the Laplacian of the electron density at the critical point of the cycle ($\nabla^2\rho$). With the exception of bicyclobutane (SE per cycle = 141.5 kJ/mol), an excellent linear correlation of SE versus all indices in the entire range of strain energies was established: $SE = (8 \pm 5) + (1900 \pm 70) \times (BPL - GBL)$ kJ/mol, $R = 0.991$, maximal deviation $MAX = 11$, mean absolute deviation $MAD = 5$ kJ/mol. The same quality was observed in the case of the $\nabla^2\rho$ index. The brief discussion on the nature of the observed dependencies was given. The main factor of the SE increasing was suggested to be enhanced polarization of the cyclopropane C-C bonds due to effect of both electron donor and acceptor substituents. The found fair correlations make it possible to propose the established correlations for the express estimation of strain energies in the compounds containing cyclopropane fragments.

Keywords: homodesmotic method, strain energy, QTAIM analysis, QSAR.

Published in Russian. Do not hesitate to contact us at bulletin_bsu@mail.ru if you need translation of the article.

REFERENCES

1. Khursan S. L., Ismagilova A. S., Akhmerov A. A., Spi-vak S. I. *Zhurnal fizicheskoi khimii*. 2016. Vol. 90. No. 4. Pp. 569–575.
2. Khursan S. L., Ismagilova A. S., Spivak S. I. *Doklady Akademii nauk*. 2017. Vol. 474. No. 4. Pp. 454–457.
3. Khursan S. L., Ismagilova A. S., Ziganshina F. T., Akhmet'yanova A. I. *Zhurnal fizicheskoi khimii*. 2021. Vol. 95. No. 7. Pp. 1–9. DOI: 10.31857/S0044453721070141.
4. Bader R. *Atoms in molecules: a quantum theory*. USA: Oxford University press, 1994. ISBN 978-0-19-855865-1.
5. Burtseva E. S., Akhmet'yanova A. I., Ismagilova A. S., Khursan S. L. *Vestnik Bashkirskogo universiteta*. 2017. Vol. 22. No. 4. Pp. 946–952.
6. Akhmetshina E. S., Khursan S. L. *Thermochimica Acta*. 2020. Vol. 685. Pp. 178541.
7. Akhmetshina E. S., Khursan S. L. *Izvestiya Akademii nauk. Seriya khimicheskaya*. 2020. No. 1. Pp. 76–83.
8. Khursan S. L. *Russian Journal of Physical Chemistry*. 2004. Vol. 78. Pp. 34–42.
9. Smith M. B. *March's advanced organic chemistry: reactions, mechanisms, and structure*. Wiley. 2013.
10. Potemkin V. A., Pogrebnoy A. A., Grishina M. A. *Journal of Chemical Information and Modeling*. 2009. Vol. 49. Pp. 1389–406.
11. Curtiss L. A., Redfern P. C., Raghavachari K. *Gaussian-4 theory. The Journal of Chemical Physics*. 2007. Vol. 126. Pp. 084108.
12. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., Scuseria G. E., Robb M. A., Cheeseman J. R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G. A., Nakatsuji H., Caricato M., Li X., Hratchian H. P., Izmaylov A. F., Bloino J., Zheng G., Sonnenberg J. L., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven Jr. T., Montgomery J. E., Peralta F., Ogliaro M., Bearpark J. J., Heyd E., Brothers K. N., Kudin V. N., Staroverov R., Kobayashi J., Normand K., Raghavachari A., Rendell J. C., Burant S. S., Iyengar J., Tomasi M., Cossi N., Rega J. M., Millam M., Klene J. E., Knox J. B., Cross V., Bakken C., Adamo J., Jaramillo R., Gomperts R. E., Stratmann O., Yazyev A. J., Austin R., Cammi C., Pomelli J. W., Ochterski R. L., Martin K., Morokuma V. G., Zakrzewski G. A., Voth P., Salvador J. J., Dannenberg S., Dapprich A. D., Daniels, Farkas Ö., Foresman J. B., Ortiz J. V., Cioslowski J., Fox D. J., *Gaussian 09, Revision Pp. 1*, Gaussian Inc., Wallingford CT, 2009.
13. AIMAll (Version 19.10.12), Todd A. Keith, TK Gristmill Software, Overland Park KS, USA, 2019. (aim.tkgristmill.com).

Received 12.05.2021.