

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.2; 536.77; 544.27

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.02.002

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ РЕАКЦИИ ПЕРЕИМИНИРОВАНИЯ 1,2-ДИТРЕТ-БУТИЛЭТАНДИИМИНА АМИНОУКСУСНОЙ КИСЛОТОЙ

Андрей Валерьевич Рябых¹, Ольга Андреевна Маслова², Сергей Александрович Безносюк^{3†},
Майя Викторовна Чикина⁴

^{1, 2, 3} Алтайский государственный университет, пр. Ленина, 61, 656049, Барнаул, Россия

⁴ Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН, ул. Социалистическая, 1, 659322, Бийск, Россия

¹ ryabykh.642@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3699-3932>

² maslova_o.a@mail.ru

³ bsa1953@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-4945-7197>

⁴ chikina_maya@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1783-7718>

Аннотация. В данной работе представлены результаты компьютерного моделирования реакции переиминирования 1,2-дитрет-бутилэтанндиимина в среде водного ацетонитрила с образованием 2,4,6,8,10,12-гексаацетил-2,4,6,8,10,12-гексаазатетрацикло-[5,5,0,0^{3,11},0^{5,9}]додекана. На уровне теории функционала плотности с использованием функционала BP86 и базисного набора def2-SVP был смоделирован предположительный механизм реакции переиминирования в континуальной модели растворителя СРСМ при 298,15 К. Проведено сравнение изменения функций Гиббса G при 298,15 К и внутренней энергии U при 0 К для всех стадий предположительного механизма. Установлено, что способом переиминирования 1,2-дитрет-бутилэтанндиимина в среде водного ацетонитрила аминокислотой возможно образование целевого циклического продукта. Из-за значительного влияния энтропийного фактора промежуточных стадий снижение температуры должно способствовать проведению синтеза.

Ключевые слова: N,N'-дитрет-бутил-1,2-этанндиимин, аминокислота, 2,4,6,8,10,12-гексакарбоксиметил-2,4,6,8,10,12-гексаазатетрацикло-[5,5,0,0^{3,11},0^{5,9}]додекан, теория функционала плотности, компьютерное моделирование.

Благодарности: Работы по определению влияния состава амина на способность образования производных гексаазаизовюрцитана были выполнены по базовой тематике № FUFЕ – 2021 – 0004 при использовании приборной базы Бийского регионального центра коллективного пользования СО РАН (ИПХЭТ СО РАН, г. Бийск). Компьютерное моделирование систем сделано в сетевой лаборатории квантовых технологий материалов АлтГУ.

Для цитирования: Рябых А.В., Маслова О.А., Безносюк С.А., Чикина М.В. Квантово-химический расчет реакции переиминирования 1,2-дитрет-бутилэтанндиимина аминокислотой // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2022. Т. 19, № 2. С. 157–164. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.02.002.

Original article

QUANTUM-CHEMICAL CALCULATION OF THE REIMINATION OF 1,2-DITERT-BUTYLETHANEDIIMINE WITH AMINOACETIC ACID

Andrey V. Ryabykh¹, Olga A. Maslova², Sergey A. Beznosyuk^{3†}, Maya V. Chikina⁴

^{1,2,3} Altai State University, Lenin Pr., 61, Barnaul, 656049, Russia

⁴ Institution of Science Institute for Problems of Chemical and Energy Technologies SB RAS, Sotsialisticheskaja Str., 1, 659322, Biysk, Russia

¹ ryabykh.642@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3699-3932>

² maslova_o.a@mail.ru

³ bsa1953@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-4945-7197>

⁴ chikina_maya@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1783-7718>

Abstract. This paper presents the results of computer simulation of the reamination reaction of 1,2-ditert-butylethanediiimine in aqueous acetonitrile to form 2,4,6,8,10,12-hexaacetyl-2,4,6,8,10,12-hexaazatetracyclo-[5,5,0,0^{3,11},0^{5,9}]dodecane. At the level of density functional theory, using the BP86 functional and the def2-SVP basis set, a hypothetical mechanism of the reamination reaction was modeled in the continual solvent model CPCM at 298.15 K. The change in the Gibbs functions G at 298.15 K and the internal energy U at 0 K were compared for all stages of the putative mechanism. It has been established that the formation of the target cyclic product is possible by the method of reamination of 1,2-ditert-butylethanediiimine in an aqueous acetonitrile medium with aminoacetic acid. Due to the significant influence of the entropy factor of intermediate stages, a decrease in temperature should facilitate the synthesis.

Keywords: N,N'-ditert-butyl-1,2-ethanediiimine, aminoacetic acid, 2,4,6,8,10,12-hexacarboxymethyl-2,4,6,8,10,12-hexaazatetracyclo-[5,5,0,0^{3,11},0^{5,9}]dodecane, density functional theory, computer simulation.

Acknowledgements: Work to determine the effect of the amine composition on the ability to form derivatives of hexaazaisowurtzitane was carried out according to the basic topic No. FUFЕ – 2021 –0004 and using the instrument base of the Biysk Regional Center for Collective Use of the SB RAS (IPCET SB RAS, Biysk). Computer modeling of systems was made in the network laboratory of quantum technologies of materials of Altai State University.

For citation: Ryabykh, A. V., Maslova, O. A., Beznosyuk, S. A. & Chikina, M. V. (2022). Quantum-chemical calculation of the reamination of 1,2-ditert-butylethanediiimine with aminoacetic acid. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 2(19), 157–164. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.02.002.

Введение

Производные гексаазаизовюрцитана – перспективные биологически активные вещества [1-3], которые получают двумя путями:

- конденсацией различных аминов с глиоксалем;
- реакцией переиминирования производных 1,2-этанндииминов аминами [4, 5].

В литературе отсутствуют сведения о производных гексаазаизовюрцитана, полученных реакцией конденсации глиоксала с аминокислотами, либо реакцией переиминирования производных 1,2-этанндииминов аминокислотами.

Аминокислотная кислота является биологически активным соединением, поэтому в данном исследовании она была выбрана в качестве модельного соединения. Полученный на ее основе 2,4,6,8,10,12-гексакарбоксиметил-2,4,6,8,10,12-гексаазатетрацикло-

[5,5,0,0^{3,11},0^{5,9}]додекан по расчетным данным программы PASS обладал бы рядом биологически активных свойств. Ниже приведены наиболее значимые [6]:

- p_a 0,923 ингибитор АДФ-тимидинкиназы (для предотвращения повторных инсультов и приступов ишемии, связанных с тромбозом);
- p_a 0,904 лечение фобических расстройств;
- p_a 0,850 ингибитор протеиназы (лечение бактериального пародонтоза);
- p_a 0,839 антигипоксические свойства (снимают кислородное голодание мозга).

Целью данного исследования является выявление возможности образования N, N'-дикарбоксиметил-1,2-этанндиимина реакцией переиминирования N,N'-дитерт-бутил-1,2-этанндиимина аминокислотной кислотой и его дальнейшей циклотримеризации до 2,4,6,8,10,12-гексакарбоксиметил-2,4,6,8,10,12-гексаазатетрацикло-[5,5,0,0^{3,11},0^{5,9}]додекана.

Методика компьютерного моделирования

1. Моделирование механизма реакции. Предположительный механизм образования производных гексаазаизовюрцитана был предложен А.Т. Нильсоном в работе [7]. Данные реакции (рис.1) моделировали при изучении способности N,N'-диарбоксиметил-1,2-этандинимина к способности образовывать каркас гексаазаизовюрцитана. Изначальными реагентами являются N,N'-дитретбутил-1,2-этандинимин и аминоксусная кислота. На первой стадии механизма происходит замещение *трет*-бутилиминных группировок на ацетилиминные. Дальнейшие взаимодействия аналогичны рассмотренному нами ранее механизму в работе [8].

2. Параметры расчета. Компьютерное моделирование проводили в программном пакете Orca версии 5.0.3 [9]. Расчет термодинамических функций состояния для приведенного выше механизма проводили на уровне теории функционала плотности с использованием GGA-функционала BP86 и базисного набора def2-SVP [10]. Так как чистая теория функционала плотности недостаточно точно учитывает тонкие дисперсионные взаимодействия, использовали алгоритм поправки атомной парной дисперсии на основе жестко связанных частичных зарядов D4 [11].

Учет влияния диэлектрической среды учитывали с помощью Conductor-like Polarizable Continuum Model (CPCM). Тип поверхности – Gaussian VdW. При данном алгоритме создания полости в континууме размытие зарядов осуществляется с помощью распределения Гаусса, а поверхность создается на границе ван-дер-ваальсовых радиусов [12].

Для получения сведений о термодинамических потенциалах рассматриваемого механизма рассчитывали гармонические частоты колебаний оптимизированных структур, изображенных на рис.1. Изменения функций Гиббса ΔG^0 , энтальпии ΔH^0 и энтропии ΔS^0 при $T = 298,15$ К и $p = 1$ атм рассчитывали программным пакетом Orca через стандартные алгоритмы статистической термодинамики. Кроме того, чтобы учесть влияние температуры на проведение синтеза, провели сравнение изменения функций Гиббса ΔG^0_{298} с изменением внутренней энергии ΔU^0_0 при $T = 0$ К.

Результаты и их обсуждение

На рис.2 представлены изменения термодинамических потенциалов ΔU^0_0 и ΔG^0_{298} для каждой из пяти приведенных на рис.1 стадий синтеза 2,4,6,8,10,12-гексакарбоксиметил-2,4,6,8,10,12-гексаазатетрацикло-[5,5,0,0^{3,11},0^{5,9}]додекана.

Компьютерное моделирование показало, что термодинамически благоприятно протекание замещение *трет*-бутильных групп в исходном реагенте на карбоксиметильные. Анализируя численные значения изменения термодинамических потенциалов, можно указать две «запирающие» стадии механизма.

Во-первых, это стадия № 2, где два имина **II** объединяются в малоустойчивый комплекс с разделением зарядов **I2**. Разница $\Delta G^0_{298} - \Delta U^0_0$ для этой точки составляет 78,06 кДж/моль. При реальной температуре существенный вклад в функцию Гиббса вносит энтропийный фактор $T\Delta S^0$. Объединение двух иминов **II** происходит с большим уменьшением энтропии системы со значением $\Delta S^0_{298} = -216,9$ Дж/(моль·К). Учитывая зависимость функции Гиббса от температуры, можно сделать вывод о том, чтобы уменьшить величину «запирающего» термодинамического барьера стадии № 2, синтез нужно проводить при температуре ниже комнатной. Но при этом придется искать баланс между термодинамической возможностью протекания реакции и скоростью самого процесса.

Во-вторых, это стадия № 5, означающая образование каркаса гексаазаизовюрцитана **C3** – конечного продукта конденсации. Естественно, каркас гексаазаизовюрцитана **C3** является более упорядоченной структурой, чем цикл **C2**. Поэтому имеем отрицательное изменение энтропии $\Delta S^0_{298} = -20,0$ Дж/(моль·К). Малое значение энтропийного фактора показывает незначительное влияние температуры на способность **C2** образовывать **C3**. На рис.3 изображены изменения энтропии для каждой из пяти стадий синтеза.

В целом, вид зависимости изменения энтропии от номера стадии с участием аминоксусной кислоты аналогично таковым для других аминов при их взаимодействии с глиоксалем, которые мы рассматривали в статье [8]. Зависимость касемо функций Гиббса также имеет сходный вид, поэтому имеет смысл сравнить аминоксусную кислоту и различные

амины по способности образовывать каркас гексаазаизоворцитана.

Рассмотрим суммарное изменение термодинамических функций за все пять протекающих стадий механизма (Табл.1). Для удобства сравнения вместо непосредственно изменения энтропии при 298,15 К приведем энтропийный фактор функции Гиббса, полученный умножением $\Sigma \Delta S^0_{298}$ на 298,15 К.

Суммарное изменение функции Гиббса для полного механизма свидетельствует о том, что реакция термодинамически возможна в стандартных условиях. Но, существенное суммарное изменение энтропии может указывать на то, что синтезу благоприятствует низкая температура.

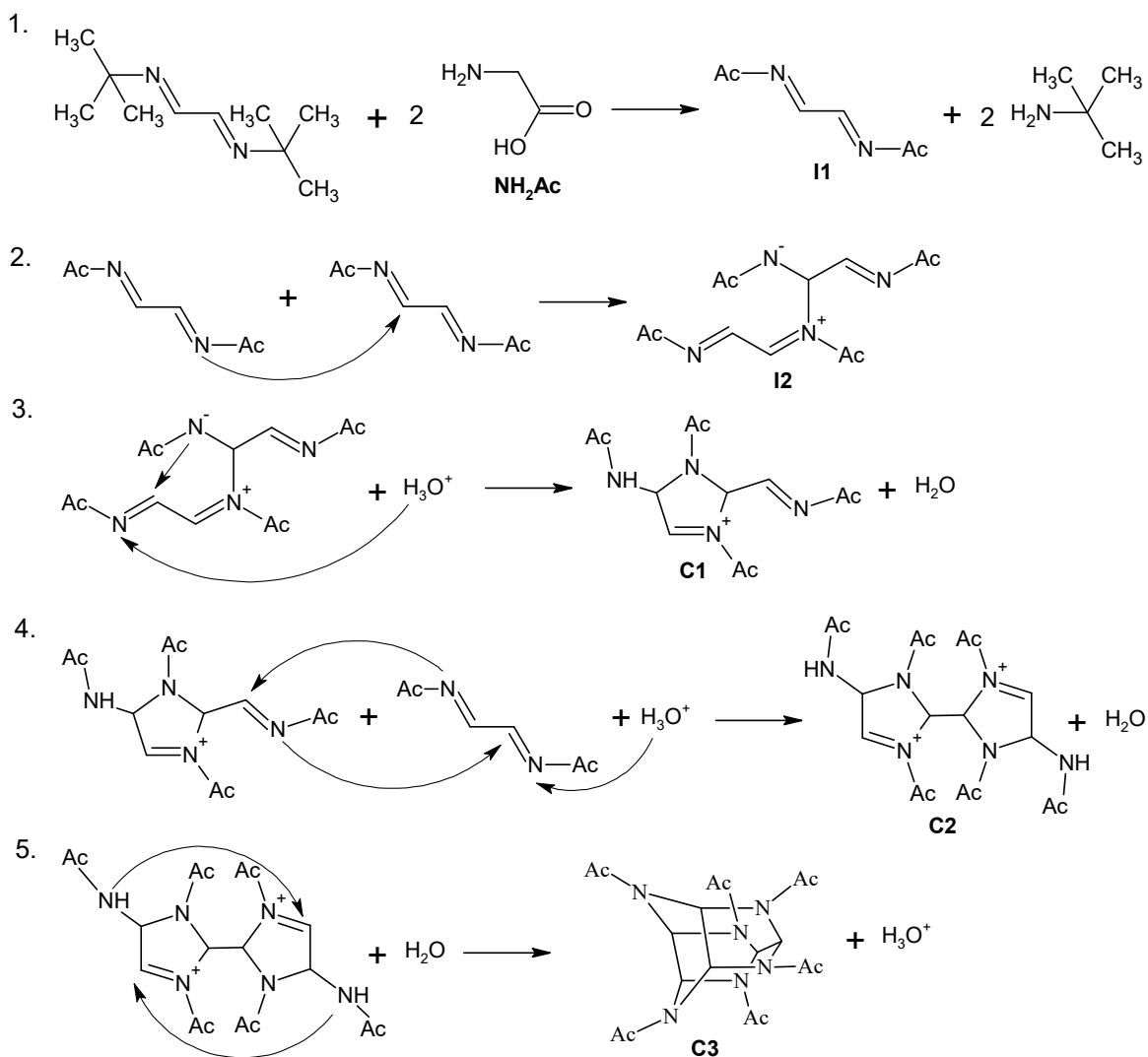


Рис.1. Предположительный механизм образования 2,4,6,8,10,12-гексакарбоксиметил-2,4,6,8,10,12-гексаазатетрацикло[5,5,0,0^{3,11},0^{5,9}]додекана [5]. Принятые сокращенные обозначения: Ac – карбоксиметильная группа –CH₂–COOH; I1 – диимин, первый продукт конденсации; I2 – промежуточный продукт присоединения одной молекулы I1 к другой; C1 – линейно-циклическая структура, образованная из I2; C2 – линейно-циклическая структура, образованная из реакции C1 с I1; C3 – циклический конечный продукт конденсации – 2,4,6,8,10,12-гексаацетил-2,4,6,8,10,12-гексааза-тетрацикло[5,5,0,0^{3,11},0^{5,9}]додекан

Fig.1. Proposed mechanism of formation of 2,4,6,8,10,12-hexacarboxymethyl-2,4,6,8,10,12-hexaazatetracyclo[5,5,0,0^{3,11},0^{5,9}]dodecane [5]. Accepted abbreviations: Ac is the carboxymethyl group –CH₂–COOH; I1 is diimine, the first condensation product; I2 is an intermediate product of the addition of one I1 molecule to another; C1 is a linear-cyclic structure formed from I2; C2 is a linear-cyclic structure formed from the reaction of C1 with I1; C3 is a cyclic end product of condensation - 2,4,6,8,10,12-hexaacetyl-2,4,6,8,10,12-hexaaza-tetracyclo[5,5,0,0^{3,11},0^{5,9}]dodecane

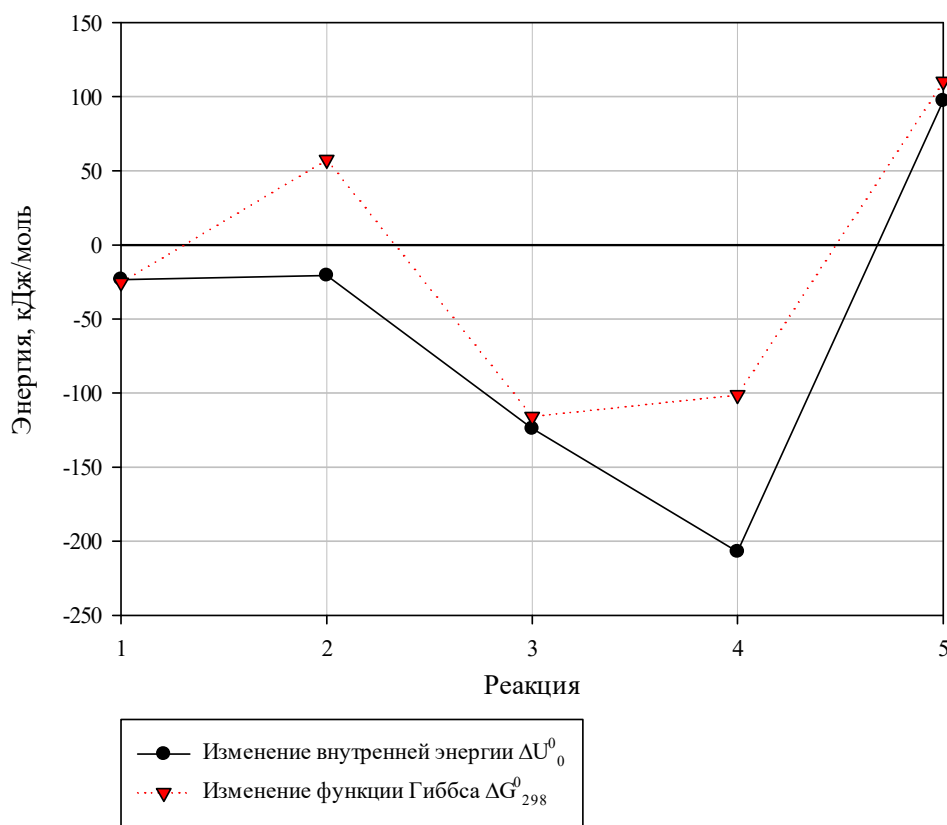


Рис.2. Изменение функций Гиббса и внутренней энергии для стадий 1-5 предположительного механизма, который изображен на рис.1

Fig.2. Changes in the Gibbs functions and internal energy for stages 1-5 of the hypothetical mechanism, which is shown in Fig.1

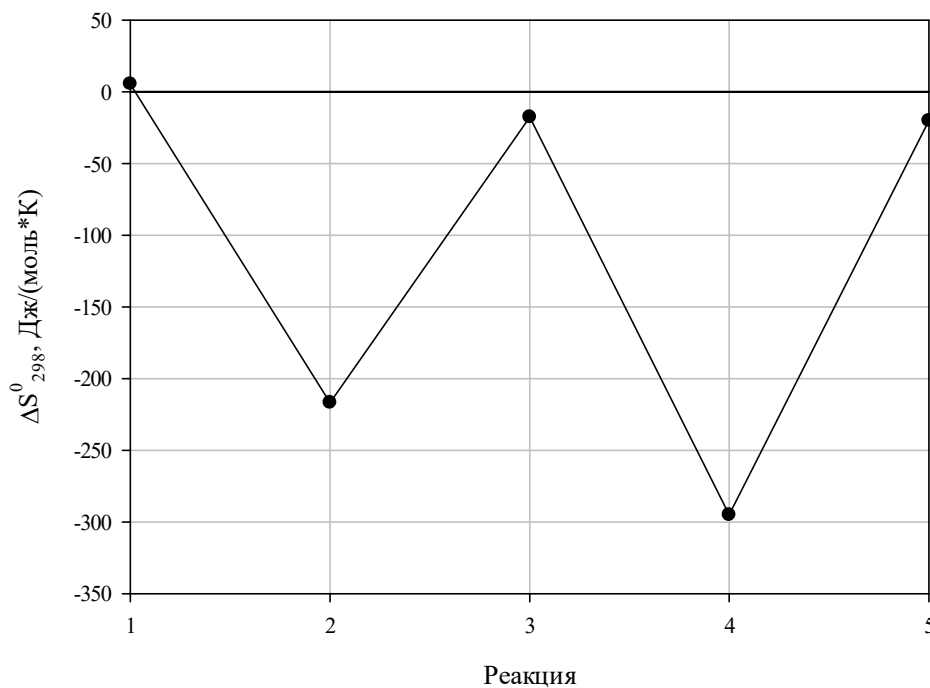


Рис.3. Изменение энтропии для стадий 1 – 5 предположительного механизма, который изображен на рис.1

Fig.3. The change in entropy for stages 1 - 5 of the proposed mechanism, which is shown in Fig.1

Таблица 1. Суммарное изменение термодинамических функций механизма

Table 1. The total change in the thermodynamic functions of the mechanism

Функция	$\Sigma\Delta U_0^0$	$\Sigma\Delta G_{298}^0$	$T \cdot \Sigma\Delta S_{298}^0$
Суммарное изменение, кДж/моль	-277,98	-74,84	-162,16

Опираясь на данные [8], сравним аминокислоту, аллиламин, фурфуриламмин и бензиламин по способности к созданию ГАВ. По значениям $\Sigma\Delta G_{298}^0$ данные вещества образуют ряд: **фурфуриламмин < аллиламин < бензиламин < аминокислотная кислота**. Значение для аминокислотной кислоты сходно со значением для *трет*-бутиламина, который не приводит к образованию гексаазаизоворцитана. Отличительной чертой аминокислотной кислоты в данном механизме является наличие «запирающей» стадии № 2, которой нет для остальных рассмотренных выше веществ. По значениям ΔG_{298}^0 (2) данные вещества образуют ряд: **фурфуриламмин < аллиламин \approx бензиламин < аминокислотная кислота**. Ряд по значениям ΔG_{298}^0 (5) – «запирающей» стадии для всех реагентов – наблюдается иная картина: **аллиламин < аминокислотная кислота < фурфуриламмин < бензиламин**. Имеем, что аминокислотная кислота способна из структуры **C2** образовывать **C3** с одинаковой эффективностью, как фурфуриламмин и бензиламин. Таким образом, имеется двойственность в физико-химическом характере аминокислотной кислоты при данных взаимодействиях.

Наличие термодинамических трудностей на стадии № 2 в случае с аминокислотной кислотой можно объяснить с привлечением внутримолекулярных водородных связей. Ключевым моментом является присоединение атома углерода к атому азота с последующим перераспределением заряда между двумя соседними атомами азота от разных молекул **II**. У аминокислотной кислоты имеется карбоксильная группа –COOH, водород которой посредством сильных внутримолекулярных водородных связей взаимодействует с ближайшим азотом, экранируя его от возможных взаимодействий. Азот с формальным насыщенным координационным числом 4 (с учетом водорода от –COOH) уже крайне трудно взаимодействует с атомом углерода соседней молекулы **II**, что и выражает большое численное значение изменения функции Гиббса. Для других рассмотренных аминов такого внутримолекулярного водородного взаимодей-

ствия практически нет, и реакция образования интермедиата **I2** идет легче. С другой стороны, такие же водородные связи стабилизируют структуру **C2** и, что важнее, конечную структуру **C3**. Это указывает на легкость образования гексаазаизоворцитана на последней стадии с использованием аминокислотной кислоты.

Выводы

На основе результатов компьютерного моделирования можно сделать следующие выводы.

1. Реакция переиминирования N,N'-дитрет-бутил-1,2-этандиимина аминокислотной кислотой пройдет с образованием N,N'-дикарбоксиметил-1,2-этандиимина;

2. N,N'-диарбоксиметил-1,2-этандиимин при дальнейшей реакции циклотримеризации образует 2,4,6,8,10,12-гексакарбоксиметил-2,4,6,8,10,12-гексаазатетрацикло-[5,5,0,0^{3,11},0^{5,9}]додекан, но реакцию нужно проводить при пониженных температурах.

3. В отличие от аминов, аминокислотная кислота играет специфическую роль в механизме образования 2,4,6,8,10,12-гексакарбоксиметил-2,4,6,8,10,12-гексаазатетрацикло-[5,5,0,0^{3,11},0^{5,9}]додекана ввиду наличия сильных внутримолекулярных водородных связей между атомами азота и карбоксильными группами.

Список литературы

1. Пат. 2736936 Российская Федерация. 4,10-ди(этоксиацетил)-2,6,8,12-тетраацетил-2,4,6,8,10,12-гексаазатетрацикло[5,5,0,0^{3,11},0^{5,9}] додекан в качестве анальгетического средства и способ его получения. № 2020121641, заявл. 25.06.2020. опубл. 23.11.2020.
2. Лопатина К.А., Крылова С.Г., Сафонова Е.А. Новый анальгетик на основе гексаазаизоворцитана: возможность использования в онкологической практике // Сибирский онкологический журнал. 2020. Т. 19, № 2. С. 76–81.
3. Aguero S., Megy S., Eremina V., Kalashnikov A., et al. Discovery of a Novel Non-Narcotic Analgesic Derived from the CL-20 Ex-

plosive: Synthesis, Pharmacology, and Target Identification of Thiowurtzine, a Potent Inhibitor of the Opioid Receptors and the Ion Channels // *ACS Omega*. 2021. V. 23, N 6. P. 15400–15411.

4. Il'yasov S.G., Chikina M.V. A novel approach to synthesis of hexaazaisowurtzitane derivatives // *Tetrahedron Letters*. 2013. V. 54, N 15. P. 1931–1932.

5. Nielsen A.T., Nissan R.A., Vanderah D.J., et al. Polyazapolycyclics by Condensation of Aldehydes with Amines. Formation of 2,4,6,8,10,12-Hexabenzyl-2,4,6,8,10,12-hexaazatetracyclo[5,5,0,0^{5,9},0^{3,11}]dodecanes from Glyoxal and Benzylamines // *The Journal of Organic Chemistry*. 1990. V. 55, N 5. P. 1459–1466.

6. <http://way2drug.com/passonline/predict.php> [Электронный ресурс]. Дата обращения 13.04.2022.

7. Рябых А.В., Маслова О.А., Безносюк С.А., Чикина М.В., Глухачева В.С. Влияние состава амина на способность образования производных гексаазоизоворцитана // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2021. Т. 18, № 4. С. 478–484.

8. Neese F. Software update: the ORCA program system, version 4.0 // *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*. 2017. V. 8. P. e1327.

9. Weigend F., Ahlrichs R. Balanced basis sets of split valence, triple zeta valence and quadruple zeta valence quality for H to Rn: Design and assessment of accuracy // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2005. V. 7. P. 3297.

10. Grimme S., Antony J., Ehrlich S., Krieg H. A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu // *J. Chem. Phys.* 2010. V. 132. P. 154104.

11. Caldeweyher E., Bannwarth C., Grimme S. Extension of the D3 dispersion coefficient model // *J. Chem. Phys.* 2017. Vol. 147. P. 034112.

12. Cossi M., Rega N., Scalmani G., et al. Energies, structures, and electronic properties of molecules in solution with the CPCM solvation model // *Chem. Phys.* 2003. V. 24, N 6. P. 669–681.

Информация об авторах

А. В. Рябых – аспирант и инженер кафедры физической и неорганической химии Алтайского государственного университета.

О. А. Маслова – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической и неорганической химии Алтайского государственного университета.

С. А. Безносюк – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физической и неорганической химии Алтайского государственного университета.

М. В. Чикина – кандидат химических наук, научный сотрудник лаборатории синтеза высокоэнергетических соединений Института проблем химико-энергетических технологий СО РАН.

References

1. Pat. 2736936 Russian Federation. 4,10-di(ethoxyacetyl)-2,6,8,12-tetraacetyl-2,4,6,8,10,12-hexaazatetracyclo[5,5,0,0^{3,11},0^{5,9}] dodecane as analgesic agent and method of its production. No. 2020121641, claim. 06/25/2020. Publ. 11/23/2020 (In Russ.).

2. Lopatina, K. A., Krylova, S. G. & Safonova, E. A. et al. (2020). A new analgesic based on hexaazaisowurtzitane: the possibility of using it in oncological practice. *Siberian journal of oncology*, 2(19), 76–81. (In Russ.).

3. Aguero, S., Megy, S., Eremina, V. & Kalashnikov, A. et al. (2021). Discovery of a Novel Non-Narcotic Analgesic Derived from the CL-20 Explosive: Synthesis, Pharmacology, and Target Identification of Thiowurtzine, a Potent Inhibitor of the Opioid Receptors and the Ion Channels. *ACS Omega*, 6(23), 15400–15411.

4. Il'yasov, S. G. & Chikina, M. V. (2013). A novel approach to synthesis of hexaazaisowurtzitane derivatives. *Tetrahedron Letters*, 15(54), 1931–1932.

5. Nielsen, A. T., Nissan, R. A. & Vanderah, D. J. et al. (1990). Polyazapolycyclics by Condensation of Aldehydes with Amines. Formation of 2,4,6,8,10,12-Hexabenzyl-2,4,6,8,10,12-hexaazatetracyclo[5,5,0,0^{5,9},0^{3,11}]dodecanes from Glyoxal and Benzylamines. *The Journal of Organic Chemistry*, 5(55), 1459–1466.

6. <http://way2drug.com/passonline/predict.php> [Electronic resource]. Retrieved 13.04.2022.

7. Ryabykh, A. V., Maslova, O. A., Beznoisyuk, S. A., Chikina, M. V. & Glukhacheva, V. S. (2021). Influence of the Amine Composition on the Ability of Formation of Hexaazoisowurtzitane Derivatives. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems*

of *Material Science (BPMS)*), 4(18), 478–484. (In Russ.).

8. Neese, F. (2017). Software update: the ORCA program system, version 4.0. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 8, e1327.

9. Weigend, F. & Ahlrichs, R. (2005). Balanced basis sets of split valence, triple zeta valence and quadruple zeta valence quality for H to Rn: Design and assessment of accuracy. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 7, 3297.

10. Grimme, S., Antony, J., Ehrlich, S. & Krieg, H. (2010). A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. *J. Chem. Phys.*, 132, 154104.

11. Caldeweyher, E., Bannwarth, C. & Grimme, S. (2017). Extension of the D3 dispersion coefficient model. *J. Chem. Phys.*, 147, 034112.

12. Cossi, M., Rega, N. & Scalmani, G., et al. (2003). Energies, structures, and electronic proper-

ties of molecules in solution with the CPCM solvation model. *Chem. Phys.*, 6(24), 669–681.

Information about the authors

A. V. Ryabykh – Graduate Student and Engineer of the Department of Physical and Inorganic Chemistry, Altai State University.

O. A. Maslova – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of Physical and Inorganic Chemistry, Altai State University.

S. A. Beznosyuk – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Department of Physical and Inorganic Chemistry, Altai State University.

M. V. Chikina – Candidate of Chemical Sciences, Research Scientist at the Laboratory of High-Energy Compounds Synthesis, Institute for Problems of Chemical and Energetic Technologies SB RAS.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 16.04.2022; одобрена после рецензирования 22.04.2022; принята к публикации 27.04.2022.

The article was received by the editorial board on 16 Apr. 22; approved after reviewing on 22 Apr. 22; accepted for publication on 27 Apr. 22.