

УДК 547.874

**КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ НЕКОТОРЫХ
ТРИНИТРОМЕТИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 1,3,5-ТРИАЗИНА****З.Г. Алиев, А.В. Шастин, С.М. Алдошин**

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Московская обл., Россия
E-mail: aliev@icp.ac.ru

Статья поступила 20 марта 2014 г.

Методом РСА исследованы кристаллические структуры тринитрометильных производных 1,3,5-триазина — 2,4-диазидо-6-тринитрометил-1,3,5-триазин (**1**), 2,4-диметокси-6-тринитрометил-1,3,5-триазин (**2**), 2,4-бис(N,N-диметиламино)-6-тринитрометил-1,3,5-триазин (**3**). Обнаружены некоторые особенности строения (геометрии) тринитрометильной группы и ее расположения относительно 1,3,5-триазинового цикла.

DOI: 10.15372/JSC20150621

Ключевые слова: кристаллическая и молекулярная структура, тринитрометильные производные, 2,4-диазидо-6-тринитрометил-1,3,5-триазин, 2,4-диметокси-6-тринитрометил-1,3,5-триазин, 2,4-бис(N,N-диметиламино)-6-тринитрометил-1,3,5-триазин.

Полиазотистые гетероциклические соединения с тринитрометильными группами в последнее время становятся объектами интенсивных исследований [1–6]. Одна из причин такого внимания состоит в возможности создания на их основе новых мощных энергоемких композиций [7]. Однако данных о структуре полиазотистых гетероциклических соединений с тринитрометильными группами в литературе сравнительно немного [8–19]. Сведения о структуре молекул необходимы для уточнения свойств известных и прогнозирования (плотность, чувствительность, термическая стабильность, другие свойства) еще не полученных энергоемких соединений [20]. Настоящая работа посвящена исследованию строения тринитрометильных производных 1,3,5-триазина и сравнению полученных данных с уже имеющимися для этого класса соединений. Методом РСА исследовано строение кристаллов трех соединений — 2,4-диазидо-6-тринитрометил-1,3,5-триазина (**1**), 2,4-диметокси-6-тринитрометил-1,3,5-триазина (**2**) и 2,4-бис(диметиламино)-6-тринитрометил-1,3,5-триазина (**3**).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Монокристалльное исследование проведено на CCD дифрактометре Agilent XCalibur с EOS детектором (Agilent Technologies UK Ltd, Yarton, Oxfordshire, England). Сбор данных, определение и уточнение параметров элементарных ячеек проведено с использованием комплекса программ CrysAlis PRO [21]. Кристаллографические параметры и условия эксперимента для соединений **1–3** приведены в табл. 1.

Соединения **1** и **2** получены по описанным методикам [5, 22]. Соединение **3** получено из 2-(N,N-диметиламино)-4,6-бис(тринитрометил)-1,3,5-триазина и диметиламина по методике, аналогичной способу получения 2,4-диамино-6-тринитрометил-1,3,5-триазина [23]. Кристаллы соединений **1–3**, пригодные для рентгеноструктурного исследования, получены при медленном упаривании разбавленных растворов этих соединений в *n*-гептане.

Т а б л и ц а 1

Кристаллографические параметры и условия эксперимента для кристаллов соединений 1—3

Параметр	1	2	3
Формула	C ₄ N ₁₂ O ₆	C ₆ H ₆ N ₆ O ₈	C ₈ H ₁₂ N ₈ O ₆
<i>M</i>	312,16	290,15	316,26
<i>T</i> , К	150(1)	150(1)	200(1)
Пр. гр.	<i>P</i> 2(1)/ <i>m</i>	<i>Pnma</i>	<i>P</i> 2(1)/ <i>n</i>
<i>a</i> , <i>b</i> , <i>c</i> , Å; β, град.	6,3888(2), 14,1434(5), 12,5824(4); 92,901(3)	6,1840(3), 13,1706(3), 13,7043(4); 90	8,9024(6), 12,6341(7), 13,3369; 108,377(6)
<i>V</i> , Å ³	1135,48(6)	1116,17(5)	1423,5(1)
<i>Z</i>	4	4	4
<i>d</i> , г/см ³	1,826	1,727	1,476
μ, мм ⁻¹	0,168	0,161	0,127
<i>F</i> (000)	624	592	656
Размер, мм	0,4×0,3×0,3	0,45×0,4×0,43	0,45×0,35×0,3
Область съемки, град.	2,88—29,32	2,97—26,30	3,22—34,30
Отражения: общ. / независ.	6026 / 3222	3350 / 1178	11598 / 5941
<i>R</i> _{int}	0,0143	0,0107	0,0258
GOOF	1,052	1,079	1,025
<i>R</i> -фактор по <i>I</i> > 2σ(<i>I</i>)	<i>R</i> 1 0,0411, <i>wR</i> 2 0,0970	<i>R</i> 1 0,0334, <i>wR</i> 2 0,0805	<i>R</i> 1 0,0629, <i>wR</i> 2 0,1423
<i>R</i> -фактор по всем отражениям	<i>R</i> 1 0,0508, <i>wR</i> 2 0,1038	<i>R</i> 1 0,0359, <i>wR</i> 2 0,0822	<i>R</i> 1 0,1204, <i>wR</i> 2 0,1766
Макс. и мин. пики, е/Å ³	0,400 и -0,459	0,336 и -0,230	0,294 и -0,309
CCDC	960602	960588	960624

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

2,4-Диазидо-6-тринитрометил-1,3,5-триазин (1). Кристаллы построены из двух кристаллографически независимых молекул (рис. 1), расположенных в плоскости симметрии, проходящей через атомы углерода и азота в положениях 3 и 6 триазинового цикла и атома углерода тринитрометильного фрагмента. В первой молекуле все три атома одной нитрогруппы находятся в плоскости симметрии. Во второй молекуле тринитрометильная группа статистически разупорядочена с поворотом по связи С—С на 60° по двум позициям. Азидные группы расположены в плоскости триазинового цикла и развернуты в сторону тринитрометильной группы, образуя *Z,Z*-изомер. Такое расположение азидных групп в диазидотриазинах наблюдали лишь для одной из двух полиморфных модификаций 4,4',6,6'-тетразазидо-2,2'-азо-1,3,5-триазина [24]. Во втором полиморфе этого соединения две кристаллографически независимые молекулы находятся в виде *E,Z*- и *E,E*-изомеров. В виде *E,Z*-изомера обнаружена также молекула в кристал-

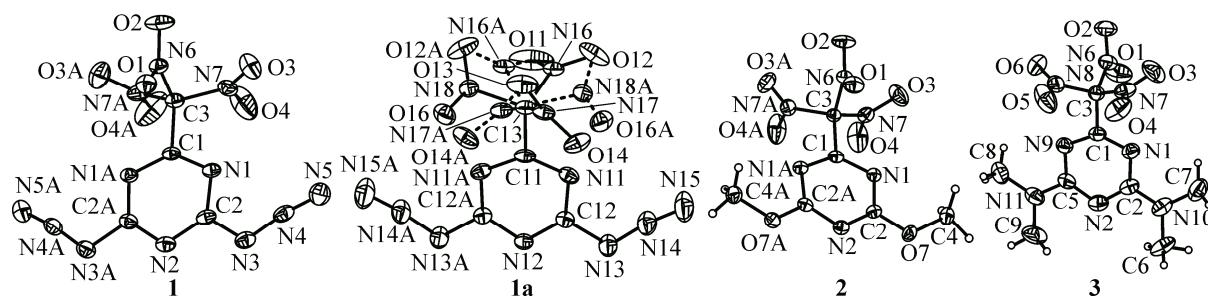


Рис. 1. Строение молекул 1, 2 и 3 (1а — молекула 1 с разупорядоченной тринитрометильной группой)

лах 4,4',6,6'-тетразидо-2,2'-гидразо-1,3,5-триазина [24], 4,6-диазидо-N-нитро-1,3,5-триазин-2-амин [25, 26], а в 2,6-диазидо-4-амино-1,3,5-триазине — в виде *E,E*-изомера [27]. Следует отметить, что во всех исследованных диазидотриазинах, независимо от типа изомера и заместителей в положении 2 и 4 триазинового цикла, внутрициклические длины связей C—N и валентный угол CNC в цепочке (1,332 Å и C2N2C2A 113,9°) практически одинаковы и близки к значениям в триазидотриазине [28].

2,4-Диметокси-6-тринитрометил-1,3,5-триазин (2). Строение молекулы **2** (см. рис. 1) аналогично строению **1**. Как и в кристалле **1**, молекула расположена в частной кристаллографической позиции на плоскости симметрии и метокси-группы находятся в плоскости триазинового цикла. Сравнение длин связей C—N (1,329 Å) и валентного угла N—C—N (114,2°) молекулы **2** с литературными данными по строению диметоксипроизводных 1,3,5-триазина [29, 30] демонстрирует консерватизм геометрических параметров в цепи MeO—C—N—C—OMe вне зависимости от заместителя в положении 6 триазинового цикла, и эти величины близки к аналогичным значениям в соединении **1**.

2,4-Бис(диметиламино)-6-тринитрометил-1,3,5-триазин (3). Молекула в кристалле **3** расположена в общей кристаллографической позиции. Однако по строению аналогична двум предыдущим — молекула обладает псевдоплоскостью симметрии, в которой находится нитрогруппа N6. Все длины связей и валентные углы, связанные этой псевдоплоскостью, в пределах погрешностей определения одинаковы. Параметры диметиламиногруппы сравнимы с известными в литературе для диметиламино-производных 1,3,5-триазина [31, 32].

Во всех трех молекулах длины связей в ТНМ-группах и связь C(ТНМ)—C(триазин) имеют практически одни и те же значения (табл. 2) и находятся в пределах величин полученных в других ТНМ-производных 1,3,5-триазина [8—10], обращает лишь внимание значительное удлинение связи N7—C3 1,535(2) Å по сравнению с двумя другими связями C—N — 1,524(2) и 1,528(2) Å в молекуле **3**. Кроме того, связи атомов углерода при ТНМ-группах с атомами азота триазина находятся в узком интервале значений 1,313÷1,318 Å; среднее значение 1,316±0,002 Å. Характерной чертой всех трех исследованных соединений является заметное удлинение связей C2—N1 по сравнению с другими связями C—N в цикле. Наиболее резко выражено это удлинение в молекуле **3**. Так, если в молекуле **1** связь C2—N1 равна 1,351(2) Å, а в молекуле **2** — 1,347(2) Å, то в молекуле **3** уже 1,370(2) Å (C5—N9 — 1,375(2) Å). Вместе с тем в молекуле **3** несколько удлиненны и эндоциклические связи C—N в цепи Me₂N—C—N—C—NMe₂ (1,338(2) Å) в сравнении с аналогичными связями в молекуле **1** 1,331(2) Å и 1,329(2) Å в молекуле **2**. Длины углерод-углеродных связей C—C(NO₂)₃ в триазинах **1—3** лежат в пределах 1,517—1,539 Å, а среднее значение равно 1,527 Å. Длина связи 1,522—1,524 Å соответствует одинарной связи C(sp)³—C(sp)², где sp³-гибридизованный атом связан дополнительно с тремя углеродными атомами [31]. Близки к этим значениям и длины связей C(ТНМ)—C(триазин) в других тринитрометильных производных 1,3,5-триазина. Так, связь C(ТНМ)—C(триазин) в 2-метокси-4-

Т а б л и ц а 2

Длины связей (Å) в соединениях **1—3**

Связь	1	2	3	Связь	1	2	3
C1—C3	1,522(2)	1,522(2)	1,524(2)	N7—O3	1,207(2)	1,209(2)	1,203(2)
C1—N1	1,318(1)	1,316(1)	1,313(2)	N7—O4	1,197(2)	1,195(2)	1,205(2)
C1—N9(N1a)			1,315(2)	N8(N7a)—O5(O3a)			1,205(2)
C3—N6	1,527(2)	1,530(2)	1,524(2)	N8(N7a)—O5(O4a)			1,204(2)
C3—N7	1,535(2)	1,536(2)	1,535(2)	N1—C2	1,351(2)	1,348(2)	1,375(2)
C3—N8(N7a)			1,528(2)	N9(N1a)—C5(C2a)			1,370(2)
N6—O1	1,217(2)	1,213(2)	1,209(2)	C2—N2	1,331(2)	1,329(2)	1,337(2)
N6—O2	1,213(2)	1,215(2)	1,219(2)	C5(C2a)—N2(N2a)			1,338(2)

Рис. 2. Скрещенная и заслоненная конформация ТНМ-группы в 1,3,5-триазине

пирролидинил-6-тринитрометил-1,3,5-триазине [10] равна 1,523 Å, в 2-гидрокси-4,6-бис(тринитрометил)-1,3,5-триазине [9] — 1,519 и 1,527 Å соответственно, а в 2-(*трет*-бутиламино)-4,6-бис(тринитрометил)-1,3,5-триазине [8] 1,514 и 1,539 Å соответственно. Резким диссонансом выглядит в этой группе соединений аналогичная длина связи в одной из кристаллографически независимых молекул 3-метил-5(тринитрометил)тетразоло(1,5-*a*)-1,3,5-триазин-7-оне [11] — 1,553 Å (во второй независимой молекуле эта связь — 1,525 Å).

Во всех трех исследованных нами соединениях ориентация ТНМ-группы относительно триазинового цикла скрещенная — одна нитрогруппа расположена по одну сторону плоскости триазинового цикла, и плоскость этой нитрогруппы ортогональна плоскости гетероцикла, а две другие — по другую (рис. 2).

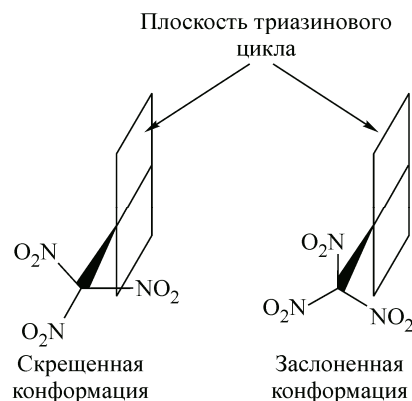
В кристаллах описанных в литературе тринитрометил-1,3,5-триазинов [8—11] наблюдаются как скрещенные, так и заслоненные (атом азота одной из нитрогрупп расположен в плоскости триазина) конформации. При этом длины связей С—С такого же порядка ~1,525 Å. Таким образом, длина связи С—С от конформации не зависит. Не влияет на длину связи и природа заместителей (донорные или акцепторные) [33].

В молекулах **1—3** все связи N—O находятся в узком интервале значений 1,195—1,217 Å и в пределах обычно наблюдаемых в нитрогруппах [34]. Тем не менее можно отметить тенденцию к укорочению связей N—O в нитрогруппах с удлинением связи С—N. Так, в молекуле **1** при связи С3—N6, равной 1,527(2) Å, связи N6—O1 и N6—O2 равны 1,217(2) и 1,213(2) Å соответственно, а при связи С3—N7 1,535(2) Å связи N7—O3 и N7—O4 равны 1,207(2) и 1,197(2) Å.

Важной характеристикой, при прочих равных условиях (например, в ряду однотипных соединений с монотонным изменением свойств), позволяющей прогнозировать стабильность нитросоединений, является прочность связи С—NO₂ (в общем случае R—NO₂, где R = C, N, O и т.д.). Известны данные о корреляции между длиной связи и ее прочностью к гомолитическому разрыву в ряду N-нитрамино [20]. Интуитивно представляется, что близкие корреляции должны быть справедливы и для других типов соединений, распадающихся по гомолитическому механизму (именно по такому типу распадаются ТНМ-соединения [35]). Поэтому сравнение длин связей может дать качественное представление о стабильности изученных соединений в сравнении с уже известными веществами, содержащими тринитрометильные группы.

Если сравнивать характеристики тринитрометильных групп в тринитрометильных производных 1,3,5-триазина и в тринитрометильных ароматических соединениях (производные бензола, нафталина, бензофурана и др.), то можно отметить, что во всех этих соединениях длины связей (ТНМ)—С(арил) значительно короче и находятся в пределах 1,478—1,490 Å [36—42]. Известна только одна структура — 5-метил-2-тринитрометилпиридин [43], где эта связь удлинена до 1,511 Å. В тринитрометильных производных 1,2,3-, 1,2,4-триазола и тетразола средняя длина связи колеблется в пределах 1,480—1,497 Å, а в среднем такая же, как и в производных бензола — 1,486 Å [13—19]. Для соединений **1—3** среднее значение (ТНМ)—С(триазин) равно 1,527 Å.

Структура **1** построена из чередующихся слоев, в которых расположены молекулы с упорядоченными и разупорядоченными молекулами. Внутри слоя молекулы имеют укороченные межмолекулярные контакты между атомами кислорода нитрогрупп и атомами углерода триазинового цикла, связанного с азидной группой, соседней молекулы длиной 2,983 Å. Линия контакта O4...C2 практически ортогональна плоскости гетероцикла. Укороченные контакты между



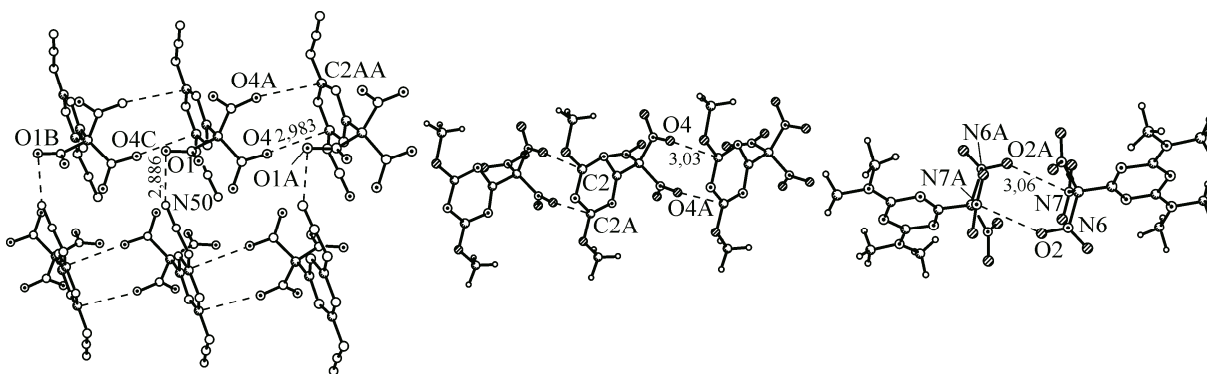


Рис. 3. Фрагменты упаковок в кристаллах **1**, **2** и **3**

атомами кислорода нитрогрупп с π -системой соседней молекулы характерны для кристаллов высокоплотных энергетических соединений [44–46]. Связанные трансляционно молекулы имеют по два таких контакта и образуют бесконечную стопку вдоль направления *a* ячейки. Стопки имеют контакты между атомом кислорода нитрогруппы O1 и концевым атомом азота азидной группы N5 длиной 2,886 Å, образуя бесконечную плоскость ортогональную оси *c* ячейки (рис. 3).

Структура **2** практически повторяет структуру **1**. Отличие лишь в отсутствии межстопочных контактов, а контакты атома кислорода нитрогруппы O4 с атомом углерода C2, связанного с метокси-группой, несколько удлинены — 3,031 Å (см. рис. 3).

Наличие в молекуле **3** дополнительно по сравнению с молекулой **2** двух метильных групп делает структуру более рыхлой. Структура **3** молекулярная, без водородных связей. Минимальные межмолекулярные расстояния между атомами углерода метильных групп и атомами кислорода находятся в пределах 3,4–3,5 Å. Отсутствуют и вышеназванные укороченные контакты типа O...C. Соответственно и плотность ее значительно ниже плотностей соединений **1** и **2**. Вместе с тем в кристалле **3** имеются межмолекулярные контакты между атомами кислорода O2 нитрогруппы и атомами азота N7 нитрогруппы соседней молекулы длиной 3,06 Å с образованием димерных ассоциатов (см. рис. 3).

Аналогичные межмолекулярные контакты O—N—O...NO₂ характерны для энергоемких нитраминных соединений [45, 46] и находятся в пределах 2,8–2,9 Å.

ВЫВОДЫ

Строение тринитрометильной группы в исследованных 1,3,5-триазилах (длины связей, углы, расположение в пространстве) практически не отличается от строения ТНМ-группы в известных тринитрометильных производных 1,3,5-триазина. В то же время параметры ТНМ-группы как в описанных ранее, так и исследованных в настоящей статье соединениях имеют заметные отличия от ТНМ-производных ароматического ряда (тринитрометильные производные бензола, нафталина, бензофурана и др.) и гетероароматического ряда (тринитрометильные производные пиридина, триазола и тетразола). Наблюдается увеличение длины связи ТНМ—ароматический заместитель в ряду 5-членные гетероциклы \approx производные бензола < производные пиридина < производные 1,3,5-триазина. Природа такого удлинения пока не ясна. Соответственно, будут проведены дальнейшие исследования в этом направлении.

Работа выполнена при частичной поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН "Фундаментальные основы прорывных технологий", тема "Исследование новых подходов к созданию высокоэнергетических соединений повышенной эффективности".

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хисамутдинов Г.Х., Королев В.Л., Пархоменко Т.Н. и др. // Изв. АН СССР. Сер. хим. – 1993. – **42**. – С. 1776.
2. Годовикова Т.И., Возчикова С.А., Игнатъева Е.Л. и др. // Химия гетероцикл. соед. – 2003. – С. 548.
3. Кофман Т.П., Карцева Г.Ю., Глазкова Е.Ю. и др. // Журн. орган. химии. – 2005. – **41**, № 5. – С. 767.
4. Кофман Т.П., Карцева Г.Ю., Глазкова Е.Ю. // Журн. орган. химии. – 2008. – **44**, № 6. – С. 879.
5. Шастин А.В., Годовикова Т.И., Корсунский Б.Л. // Изв. АН. Сер. хим. – 2011. – **60** – С. 1194.
6. Thottempudi V., Shreeve J.M. // Synthesis. – 2012. – **44**. – P. 1253.
7. Смирнов С.П., Колганов Е.В., Смирнов А.С. // Материалы III Всерос. конф. "Энергетические конденсированные системы", 2006.
8. Шастин А.В., Годовикова Т.И., Голова С.П. и др. // Химия гетероцикл. соед. – 1995. – С. 679.
9. Shastin A.V., Godovikova T.I., Golova S.P. et al. // Mendeleev Commun. – 1995. – P. 17.
10. Бахарев В.В., Гидаснов А.А., Литвинов И.А., Миронова Е.В. // Журн. структур. химии. – 2008. – **49**. – С. 187.
11. Федоров Б.С., Утенышев А.Н., Гидаснов А.А. и др. // Химия гетероцикл. соед. – 2005. – С. 582.
12. Katritzky A.R., Scriven E.F.V., Majumder S. et al. // Abboud. Organic Biomol. Chem. – 2005. – **3**. – P. 538.
13. Thottempudi V., Shreeve J.M., Gao H. // J. Am. Chem. Soc. – 2011. – **133**. – P. 6464.
14. Ладьяжникова Т.Д., Алтухов К.В., Мануэль Д.В. // Журн. орган. химии. – 1993. – **29**. – С. 1231.
15. Haiges R., Bigler Jones C., Christe K.O. // Inorg. Chem. – 2013. – **52**. – P. 5551.
16. Haiges R., Christe K.O. // Inorg. Chem. – 2013. – **52**. – P. 7249.
17. Wu M., Chen S., Shu Q., et al. // Propellants Explos. Pyrotech. – 2013. – **35**. – P. 1.
18. Kettner M.A., Klapötke T.M. // Chem. Commun. – 2014. – **50**. – P. 2268.
19. Kettner M.A., Karaghiosoff K., Klapötke T.M. // Chem. Eur. J. – 2014. – **20**. – P. 1.
20. Назин Г.М., Прокудин В.Г., Дубихин В.В. и др. // Материалы VI Всерос. конф. "Энергетические конденсированные системы", 2012.
21. Agilent (2011). CrysAlis PRO version 171.35.19, Agilent Technologies UK Ltd, Yarton, Oxfordshire, England.
22. Шастин А.В., Годовикова Т.И., Голова С.П. и др. // Химия гетероцикл. соед. – 1995. – **5**. – С. 674.
23. Шастин А.В., Годовикова Т.И., Голова С.П. и др. // Химия гетероцикл. соед. – 1995. – **5**. – С. 679.
24. Musil T., Matyáš R., Lyčka A., Růžička A. // Propellants Explos. Pyrotech. – 2012. – **37**. – P. 275.
25. Huang Y., Zhang Y., Shreeve J.M. // Chem.-Eur. J. – 2011. – **17**. – P. 1538.
26. Huynh M.-H.V., Hiskey M.A., Hartline E.L. et al. // Angew. Chem., Int. Ed. – 2004. – **43**. – P. 4924.
27. Чаптышев С.В., Лавицкий В.Ф., Акимов А.В. и др. // Изв. АН. Сер. хим. – 2008. – **57**. – С. 513.
28. Kessenich E., Klapötke T.M., Polborn K., Schulz A. // Eur. J. Inorg. Chem. – 1998. – P. 2013.
29. Glowka M.L., Blaszczyk M., Olczak A. et al. // Pol. J. Chem. – 2009. – **83**. – P. 2163.
30. Riobé F., Grosshans P., Sidorenkova H., Geoffroy M., Avarvari N. // Chem. Eur. J. – 2009. – **15**. – P. 380.
31. Гидаснов А.А., Бахарев В.В., Качановская Е.В. и др. // Хим.-фарм. журн. – 2002. – **36**. – С. 26.
32. Guo Q.-S., Liu B., Lu Y.-N. et al. // Tetrahedron: Asymm. – 2005. – **16**. – P. 3667.
33. Верецагин А.Н. Индуктивный эффект. Константы заместителей для корреляционного анализа. – М.: Наука, 1988.
34. Allen F.H., Kennard O., Watson D.G. // J. Chem. Soc. Perkin Trans. II. – 1987. – P. 1.
35. Назин Г.М., Манелис Г.Б. // Успехи химии. – 1994. – **63**. – С. 327.
36. Butts C.P., Ebersson L., Hartshorn M.P., Robinson W.T. // J. Chem. Soc., Perkin Trans. II. – 1996. – P. 1877.
37. Butts C.P., Ebersson L., Hartshorn M.P. et al. // Acta Chem. Scand. – 1995. – **49**. – P. 253.
38. Butts C.P., Ebersson L., Hartshorn M.P. et al. // Acta Chem. Scand. – 1996. – **50**. – P. 29.
39. Butts C.P., Ebersson L., Fulton K.L. et al. // Acta Chem. Scand. – 1996. – **50**. – P. 735.
40. Butts C.P., Ebersson L., Hartshorn M.P. et al. // Acta Chem. Scand. – 1996. – **50**. – P. 587.
41. Butts C.P., Ebersson L., Hartshorn M.P. et al. // Acta Chem. Scand. – 1997. – **51**. – P. 1066.
42. Butts C.P., Ebersson L., Gonzales-Luque R. et al. // Acta Chem. Scand. – 1997. – **51**. – P. 984.
43. Katritzky A.R., Akhmedov N.G., Gueven A. et al. // J. Mol. Struct. – 2006. – **787**. – P. 131.
44. Bolton O., Matzger A.J. // Angew. Chem. Int. Ed. – 2011. – **50**. – P. 8960.
45. Алдошин С.М., Алиев З.Г., Гончаров Т.К. и др. // Изв. АН. Сер. хим. – 2013. – № 6. – С. 1354.
46. Алдошин С.М., Алиев З.Г., Гончаров Т.К. и др. // Журн. структур. химии. – 2014. – **55**, № 2. – С. 348.