

КВАНТОВО – ХИМИЧНО ИЗСЛЕДВАНЕ НА 3-(4-ТОЛУЕНСУЛФОНИЛ)-2-ПРОПЕННИТРИЛ И 1-ТОЛУЕНСУЛФОНИЛ-2-НИТРОЕТЕН

Д. Звездова, Д. Алексиев, Ст. Манолов

QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF 3-(4-TOLUENESULFONYL)-2-PROPENENITRIL AND 1-TOLUENESULFONYL-2-NITROETHENE

D. Zvezdova, D. Aleksiev and St. Manolov

E-mail: dzvezdova@yahoo.com

ABSTRACT

The geometric parameters of 3-(4-toluenesulfonyl)-2-propenenitril and 1-toluenesulfonyl-2-nitroethene are established by means of semiempirical quant-chemical methods AM1, PM3, ZINDO/1 and ab initio STO-3G. By AM 1 and PM3 some important indexes of a compounds reactivity, vibration spectra are calculated, but the electronic spectra are calculated by ZINDO / S.

Key words: 3-(4- toluenesulfonyl)-2- propenenitril, 1-toluenesulfonyl-2-nitroethene, quantum-chemical calculations, geometry optimization

ВЪВЕДЕНИЕ

3-(4-толуенсулфонил)-2-пропеннитрил и 1-толуенсулфонил-2-нитроетен, принадлежат към ненаситени системи от етеновия ред, в които двойната връзка е спрегната с различни електроноакцепторни групи. Наличието на няколко реакционни центъра в тези съединения определя възможността за участието им в различни по характер реакции. Поради тяхната висока реактивоспособност ненаситените сулфони могат да инициират стерео-, регио- и енантиомерна селективност при образуването на нови химични връзки [1-5].

3-(4-толуенсулфонил)-2-пропеннитрил и 1-толуенсулфонил-2-нитроетен проявяват висока биологична активност съчетана с ниска токсичност и незначително въздействие върху околната среда [6-9].

Освен широкият диапазон от експериментални методи за характеризиране на този тип съединения все повече се използват и различни квантово-химични изследвания и изчисления. Скоростта и възможностите които предоставят квантово-химичните методи ги правят идеалните изчислителни средства за предварително сканиране на молекулите за определяне на химичните отнасяния на веществата. В литературата са известни редица публикации, свързани с изготвянето на прогнозни модели на сяросьдържащи органични съединения [11].

Определянето на геометричната и електронна структура на химичните съединения дава възможност за изучаване на взаимовръзката между структура и свойства, транспортирането на електронни ефекти с участието на различни хетероатоми, степента на реакционна способност, възможности за вътрешномолекулни прегрупировки, изомеризация и др. От нея зависят редица особености при протичането на химичните реакции, тя определя достъпът до потенциалните реакционни центрове, спрегнението, разпределението на електронните плътности, диполния момент и други характеристики на молекулите.

Квантово-химичното изследване на геометричната и електронна структура на многоатомни молекули обикновено се осъществява с полуемпирични методи. В работа [12], на основата на изследване на много голям брой съединения, подобни по състав и структура на изследваните от нас, е показано, че полуемпиричните AM1 и PM3 дават сравними резултати с тези от ab initio методи.

Цел на работата е квантово-химично изследване на 3-(4-толуенсулфонил)-2-пропеннитрил и 1-толуенсулфонил-2-нитроетен - определянето на геометричните и електронните им параметри,, теоретично изследване на електронните спектри и анализ на нормалните вибрации.

МЕТОДИ НА ИЗЧИСЛЕНИЯ

Геометричната оптимизация и определянето на геометричните и електронни параметри на изследваните съединения във вакуум беше извършена с *ab initio* STO-3G и полуемпиричните AM1, PM3 и ZINDO/1 квантово-химични методи, влизайки в програмния пакет HyperChem 5.0 [13].

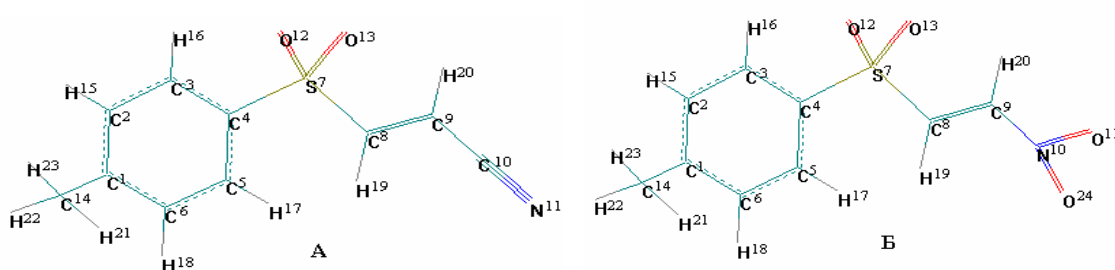
Квантово-химичните изчисления се извършваха при вариране на всички дължини на химичните връзки, валентни и торзионни ъгли, с използване на оптимизационния алгоритъм на Fletcher – Reeves, и критерий за край на итерационната процедура, когато градиентът е по-малък от 0,001 kcal/mol. Å.

В случаите, когато са възможни няколко конформера, беше изследван най-стабилния.

Теоретичното изследване на електронните преходи и определянето на електронните спектри беше извършено чрез полуемпиричния ZINDO/S метод, който е параметризиран за този вид изчисления. Определенията на електронните спектри чрез ZINDO/S бяха извършени върху предварително оптимизирани с AM1 метода структури на съединенията.

Изчисленията с посочените квантово-химични методи бяха направени върху модели на молекулите, предварително определени чрез молекулна механика (MM2).

На фиг.1 са показани стартовите модели и номерацията на атомите на изследваните съединения



Фиг.1. Стартов модел на: А) 3-(4-толуенсулфонил)-2-пропеннитрил (R-CN)
Б) 1-толуенсулфонил-2-нитроетен (R-NO₂)

РЕЗУЛТАТИ И ОБСЪЖДАНЕ

Резултатите от геометричната оптимизация на 3-(4-толуенсулфонил)-2-пропеннитрил и 1-толуенсулфонил-2-нитроетен са показани в табл. 1 и табл. 2. Резултатите от геометричната оптимизация на 3-(4-толуенсулфонил)-2-пропеннитрил (табл.1) показват, че полуемпиричните AM1, PM3 и *ab initio* STO-3G методи дават практически съвпадащи стойности за геометричните параметри на молекулата. Основният скелет на молекула лежи в една равнина, като извън нея излизат само кислородните атоми от сулфонилната група и водородните атоми от CH₃-групата. Връзките сяра – кислород се намират под ъгъл по отношение на основната равнина на молекулата. Стойността на торзионния ъгъл C3-C4-S7-O12 е -158.638 (средна стойност от трите метода). Молекулата на 1-толуенсул-

фонил-2-нитроетен има аналогичен строеж. Торзионният ъгъл C3-C4-S7-O12 е -159.887.

Резултатите от квантово – химичните изчисления, дават възможност да се оцени и зарядът, който е локализиран при съответния атом (табл. 3). Тази информация дава възможност да се прогнозира какво ще бъде поведението на съединенията при различни електрофилни и нуклеофилни реакции.

В табл.3 и табл.4 са показани резултатите от изследването на вибрационните и електронни спектри на съединенията. Наблюдено е съвпадение на изчислените и опитно (в областта 400-4000 cm⁻¹) наблюдаваните ивици в инфрачервените спектри В отделни случаи в спектрите не се наблюдават ивици, които според теорията са свързани с разрешени вибрационни преходи. Това най – вероятно се дължи на факта, че тези ивици не са свързани с вибрации, довеждащи до съществено изменение на диполния момент.

Таблица 1. Резултати от геометричната оптимизация на 3-(4-толуенсулфонил)-2-пропеннитрил

Дължина на връзките (Å)	Порядък на връзките			Валентни ъгли (deg)			Торзионни ъгли (deg)							
	AM1	PM3	СТО-3G	AM1	PM3	СТО-3G	AM1	PM3	СТО-3G	AM1	PM3	СТО-3G		
C1-C2	1.401	1.396	1.395	1.378	1.393	1.394	C1-C2-C3	120.229	120.259	120.881	C1-C2-C3-C4	-0.123	-0.224	-0.216
C2-C3	1.389	1.388	1.384	1.447	1.444	1.450	C2-C3-C4	121.098	120.932	119.219	C2-C3-C4-C5	0.447	0.356	0.442
C3-C4	1.402	1.398	1.387	1.363	1.386	1.420	C3-C4-C5	118.223	118.441	120.460	C3-C4-C5-C6	-0.440	-0.356	-0.401
C4-C5	1.402	1.397	1.388	1.365	1.387	1.421	C4-C5-C6	121.084	120.925	119.413	C4-C5-C6-C1	-0.123	-0.224	-0.216
C5-C6	1.390	1.388	1.387	1.446	1.443	1.450	C5-C6-C1	120.244	120.260	120.813	C6-C1-C2-C3	-0.320	-0.023	-0.291
C6-C1	1.401	1.396	1.392	1.380	1.393	1.398	C6-C1-C2	119.117	119.191	118.898	C1-C2-C3-H16	179.056	179.062	179.198
C1-C14	1.480	1.484	1.496	1.002	1.004	1.005	C2-C1-C14	120.428	120.377	120.198	C2-C3-C4-S7	178.965	179.524	179.421
C2-H15	1.100	1.096	1.087	0.946	0.961	0.971	C6-C1-C14	120.453	120.427	120.797	C3-C4-S7-O12	-158.945	-158.747	-158.224
C4-S7	1.669	1.777	1.801	0.625	0.720	0.798	C1-C2-H15	119.807	119.867	119.642	C3-C4-S7-O13	26.815	26.352	25.698
S7-O12	1.400	1.461	1.663	1.265	1.228	1.208	C3-C4-S7	120.786	120.670	119.656	C3-C4-C5-H17	178.406	178.838	178.717
S7-O13	1.403	1.465	1.674	1.250	1.216	1.196	C4-S7-O12	110.492	110.250	109.467	C5-C4-S7-O12	151.358	152.432	153.390
S7-C8	1.685	1.780	1.796	0.582	0.657	0.714	C4-S7-O13	110.275	110.322	108.694	C5-C4-S7-O13	-19.326	-20.098	-19.769
C8-C9	1.336	1.334	1.325	1.894	1.908	1.928	C4-S7-C8	98.363	98.757	100.006	C4-S7-C8-C9	110.537	109.213	112.011
C8-H19	1.107	1.100	1.088	0.942	0.953	0.956	O12-S7-O13	117.915	118.302	123.953	O12-S7-C8-C9	-6.006	-6.164	-7.274
C9-H20	1.110	1.102	1.093	0.927	0.942	0.949	O12-S7-C8	108.759	108.287	105.754	O13-S7-C8-C9	-134.317	-135.570	-134.594
C9-C10	1.422	1.425	1.447	1.005	1.010	1.012	O13-S7-C8	108.309	108.080	105.133	O12-S7-C8-H19	173.590	172.504	174.115
C10-N11	1.163	1.160	1.158	2.887	2.888	2.886	S7-C8-C9	125.642	125.233	123.197	O13-S7-C8-H19	44.248	43.513	45.418
C14-H21	1.119	1.098	1.090	0.960	0.972	0.968	S7-C8-H19	115.356	115.455	116.299	S7-C8-C9-C10	-179.820	-179.893	-179.911
C14-H22	1.118	1.099	1.088	0.971	0.983	0.981	H19-C8-C9	118.987	119.291	122.472	H19-C8-C9-C10	0.544	0.761	0.704
C14-H23	1.118	1.098	1.089	0.971	0.983	0.980	C8-C9-C10	122.496	121.895	122.838	H19-C8-C9-H20	-179.148	-179.014	-179.636
							C8-C9-C20	121.652	122.870	120.582	C8-C9-C10-N11	175.585	174.022	174.600
							C20-C9-C10	114.852	115.235	116.310	N11-C19-C9-H20	-4.604	-5.891	-5.075
							C9-C10-N11	179.789	179.691	179.812	H15-C2-C1-C14	-0.636	0.529	0.558
							C1-C14-H21	110.175	111.801	110.704	C2-C1-C14-H21	150.233	151.322	153.762
							C1-C14-H22	111.054	111.784	110.863	C2-C1-C14-H22	30.086	30.768	34.140
							C1-C14-H23	111.035	110.370	110.412	C2-C1-C14-H23	-89.467	-88.746	-84.719
							H21-C14-H22	108.236	107.790	108.473	C6-C1-C14-H21	-29.431	-29.054	-26.649
							H21-C14-H23	108.231	107.528	107.849	C6-C1-C14-H22	-150.407	-149.983	-152.336
							H21-C14-H23	108.546	107.614	108.244	C6-C1-C14-H23	90.141	90.503	95.305

Таблица 2. Резултати от геометричната оптимизация на 1-толуенсулфонил-2-нитроетен

Дължина на връзките (Å)	Порядък на връзките			Валентни ъгли (deg)			Торзионни ъгли (deg)							
	AM1	PM3	ZINDO/1	AM1	PM3	ZINDO/1	AM1	PM3	ZINDO/1					
C1-C2	1.401	1.396	1.402	1.376	1.392	1.394	C1-C2-C3	120.238	120.259	121.270	C1-C2-C3-C4	0.161	-0.211	0.042
C2-C3	1.389	1.388	1.392	1.451	1.446	1.450	C2-C3-C4	121.122	120.939	118.865	C2-C3-C4-C5	0.345	0.419	0.244
C3-C4	1.402	1.398	1.392	1.356	1.384	1.427	C3-C4-C5	118.163	118.428	120.324	C3-C4-C5-C6	0.242	-0.356	-0.401
C4-C5	1.403	1.398	1.392	1.356	1.383	1.428	C4-C5-C6	121.092	120.914	118.987	C4-C5-C6-C1	0.161	-0.211	-0.042
C5-C6	1.389	1.388	1.393	1.451	1.446	1.450	C5-C6-C1	120.263	120.273	121.109	C6-C1-C2-C3	0.231	-0.019	-0.322
C6-C1	1.402	1.397	1.402	1.376	1.392	1.398	C6-C1-C2	119.124	119.188	118.457	C1-C2-C3-H16	179.058	179.118	179.380
C1-C14	1.480	1.484	1.476	1.002	1.004	1.005	C2-C1-C14	120.408	120.392	120.782	C2-C3-C4-S7	178.947	179.346	179.206
C2-H15	1.105	1.096	1.096	0.946	0.961	0.977	C6-C1-C14	120.373	120.415	120.781	C3-C4-S7-O12	-160.678	-160.175	-158.840
C4-S7	1.670	1.772	1.810	0.638	0.726	0.798	C1-C2-H15	119.877	119.879	119.796	C3-C4-S7-O13	26.828	26.309	25.296
S7-O12	1.397	1.451	1.681	1.276	1.222	1.198	C3-C4-S7	120.733	120.674	119.856	C3-C4-C5-H17	178.603	178.819	178.940
S7-O13	1.400	1.455	1.684	1.259	1.219	1.196	C4-S7-O12	110.974	110.809	109.972	C5-C4-S7-O12	151.358	152.432	153.390
S7-C8	1.714	1.800	1.787	0.557	0.674	0.764	C4-S7-O13	111.045	110.802	109.694	C5-C4-S7-O13	-17.635	-18.684	-21.971
C8-C9	1.332	1.330	1.332	1.938	1.952	1.938	C4-S7-C8	98.786	98.219	101.346	C4-S7-C8-C9	110.427	109.360	112.837
C8-H19	1.111	1.102	1.095	0.930	0.947	0.954	O12-S7-O13	118.366	118.623	120.431	O12-S7-C8-C9	134.148	135.680	131.576
C9-H20	1.110	1.108	1.096	0.916	0.940	0.946	O12-S7-C8	108.667	108.803	108.002	O13-S7-C8-C9	5.218	5.668	4.870
C9-N10	1.490	1.502	1.423	0.853	0.895	0.979	S7-C8-C9	125.645	124.965	123.873	O12-S7-C8-H19	-44.716	-44.199	-48.504
N10-O11	1.202	1.214	1.243	1.463	1.494	1.452	S7-C8-H19	115.118	115.136	114.877	O13-S7-C8-H19	-173.645	-173.124	-174.768
N10-O24	1.201	1.213	1.243	1.464	1.509	1.452	H19-C8-C9	119.336	120.007	120.478	S7-C8-C9-N10	-179.825	-179.793	-179.903
C14-H21	1.118	1.099	1.099	0.962	0.973	0.961	C8-C9-N10	123.153	123.223	122.908	H19-C8-C9-N10	-0.548	0.613	0.704
C14-H22	1.117	1.098	1.098	0.972	0.982	0.975	C20-C9-N10	112.379	114.321	113.310	H19-C8-C9-H20	178.868	-178.869	-179.315
C14-H23	1.118	1.099	1.099	0.971	0.982	0.977	C9-N10-O11	117.522	117.690	118.253	C8-C9-N10-O11	179.845	-179.556	-179.450
							C9-N10-O24	119.894	119.905	120.114	C8-C9-N10-O24	-0.341	0.501	0.713
							O11-N10-O24	122.503	122.302	122.069	H15-C2-C1-C14	-0.446	0.458	0.506
							C1-C14-H21	110.575	110.149	109.430	C2-C1-C14-H21	149.132	150.322	151.753
							H21-C14-H22	108.213	107.911	107.475	C2-C1-C14-H22	28.108	29.406	29.861
											C2-C1-C14-H23	-91.500	-90.149	-91.103
											C6-C1-C14-H21	-31.777	-30.661	-30.342
											C6-C1-C14-H22	-152.700	-150.897	-151.213
											C6-C1-C14-H23	86.869	87.276	88.012

Таблица 3. Резултати от квантово-химичното изследване на R-CN

Заряд на атомите		IR- спектър			UV- спектър	
атом	q	Честота cm ⁻¹ (експеримент)	Честота cm ⁻¹ (изчислен спектър)	Интензивност	λ, nm	Сила на осцилатора
C1	0.006		17.01	1.80	287.0	0.114
C2	-0.159		35.45	0.57	257.6	0.211
C3	-0.010		80.30	0.35	251.7	0.129
C4	-0.845		106.29	1.83	236.7	0.096
C5	-0.009		121.39	2.95	215.4	0.396
C6	-0.160		155.46	0.60	212.3	0.105
S7	2.891		210.44	4.37	207.5	0.523
C8	-0.852		299.07	1.43	199.4	0.244
C9	0.091		323.38	2.45	191.1	0.123
C10	-0.133		329.88	1.92	180.9	0.153
N11	0.003		364.99	0.43	113.7	0.092
O12	-0.924		378.58	3.06	101.4	0.084
O13	-0.940		445.57	14.05	95.1	0.097
C14	-0.196	470	472.26	33.10	93.1	0.083
H15	0.144	518	513.21	20.44	81.6	0.184
H16	0.153		562.83	22.97	81.3	0.138
H17	0.154	570	570.04	46.83	78.1	0.093
H18	0.144		599.46	105.96	76.4	0.129
H19	0.183	625 мн. сл.	651.91	0.21	75.7	0.143
H20	0.175		694.36	61.99	73.6	0.081
H21	0.098	760	748.13	76.70	72.6	0.112
H22	0.093	780	803.08	50.34	70.6	0.087
H23	0.093	805 сл.	812.42	11.11	69.2	0.176
		850	853.37	0.47	69.0	0.137
			908.53	131.46	68.2	0.169
		960	967.26	11.61	67.5	0.107
		980	981.95	6.45	66.4	0.163
			990.75	96.71	66.3	0.091
			995.69	27.20	65.4	0.093
		1010	1006.31	41.76	63.9	0.086
			1075.82	7.06	62.9	0.121
		1090	1089.44	69.04	62.2	0.080
		1140	1152.00	12.14	60.9	0.091
		1170	1172.00	25.67	58.5	0.088
			1242.27	40.95	58.3	0.175
		1250	1255.42	12.54	55.9	0.102
		1290	1300.14	5.22	55.3	0.092
		1310	1312.48	7.21	53.5	0.120
		1360	1372.55	3.28	36.8	0.110
		1380	1378.82	2.20	30.5	0.188
		1420	1421.42	5.36	30.3	0.101
		1590	1548.96	19.18	25.8	0.266
			1774.61	74.80	24.7	0.082
		2220	2195.10	68.88	24.0	0.124
		2950	3010.89	27.16		
		3000	3042.60	3.65		
			3148.11	23.37		
			3153.09	17.13		
			3185.02	35.48		

Таблица 4. Резултати от квантово-химичното изследване на R- NO₂

Заряд на атомите		IR- спектър			UV- спектър	
атом	q	Честота cm ⁻¹	Честота cm ⁻¹	Интензивност	λ, nm	Сила на осцилатора
C1	0.013		16.78	1.80	290.7	0.188
C2	-0.158		113.39	6.14	281.0	0.222
C3	-0.005		118.47	3.30	247.7	0.085
C4	-0.862		211.90	5.60	228.6	0.267
C5	-0.006		247.16	1.19	216.1	0.083
C6	-0.160		364.49	2.93	211.9	0.219
S7	2.892		445.34	9.24	208.6	0.510
C8	-0.802	480	472.08	21.50	208.2	0.268
C9	-0.024	520, 530	513.73	79.74	205.3	0.108
N10	0.530	565	565.47	13.33	202.1	0.150
O11	-0.339		579.75	106.69	199.6	0.099
O12	-0.914	650	658.91	17.74	126.5	0.090
O13	-0.933	680	686.76	103.57	96.0	0.111
C14	-0.198	720	717.13	57.03	89.3	0.089
O21	-0.342	805	796.24	13.60	81.3	0.095
H15	0.147	840, 845	859.25	76.31	80.6	0.123
H16	0.155		873.90	9.40	77.8	0.237
H17	0.156		887.13	9.64	75.4	0.117
H18	0.147	910	905.78	124.18	73.1	0.113
H19	0.206		970.74	10.15	72.4	0.118
H20	0.206		974.86	34.74	69.6	0.080
H22	0.095		995.16	27.20	67.8	0.105
H23	0.094		996.25	34.50	67.2	0.088
H24	0.102	1020	1015.93	54.06	66.7	0.126
		1050	1066.69	6.66	66.2	0.163
		1080	1095.61	51.95	66.1	0.131
		1110	1110.31	5.20	64.9	0.298
		1150	1137.66	54.36	64.3	0.166
		1190	1221.94	19.19	63.6	0.079
			1234.88	8.55	62.8	0.181
			1248.49	39.54	62.7	0.089
		1290	1297.59	19.42	62.2	0.299
		1305, 1310	1315.01	7.43	60.8	0.087
		1350, 1370	1371.44	5.64	58.5	0.086
			1403.70	7.76	58.1	0.153
		1480	1473.18	19.59	56.7	0.123
		1595	1638.21	4.59	55.5	0.079
		1620	1649.43	11.87	45.9	0.085
			1772.07	100.14	36.8	0.075
		1780	1780.80	55.13	30.3	0.087
		1910	1870.17	49.10	27.8	0.087
			2073.39	186.68	27.7	0.081
		2805	2986.57	9.68	24.0	0.122
		2870	3041.13	3.95	20.8	0.244
		2920	3066.33	31.97		
		3060	3086.88	9.70		
		3100	3106.55	53.95		

За определяне на електронните преходи чрез ZINDO/S са използвани и термодинамичните функции определени по методите AM1 и PM3. След геометрично оптимизиране на молекулите на съединения е избрана геометрията с минимална енергия. Изчисляването на електронните преходи беше извършено чрез включването на единични възбудени конфигурации в конфи-

гурационно взаимодействие (CI изчисления) и използване на енергетичен критерий при преход на единични електрони от свързващи молекулни орбитали на незаети антисвързващи орбитали.

В табл. 5 са дадени някои изчислени важни енергетични и електронни характеристики на изследваните съединения

Таблица 5. Енергетични и електронни характеристики на изследваните съединения

Характеристики	R-CN		R-NO ₂	
	AM1	PM3	AM1	PM3
E _t , kcal/mol	-56365.3	-52040.5	-63345.9	-62808.7
E _b , kcal/mol	-2470.3	-2466.1	-2445.2	-2454.3
E _c , kcal/mol	-291877.9	-280216.0	-342100.4	-338235.1
E _N , kcal/mol				
H _f , kcal/mol	-6.05	-10.33	-22.67	-23.26
μ, D	5.112	5.056	5.855	5.742
E _{HOMO} , eV	-10.3771	-10.3447	-10.8791	-10.6428
E _{LUMO} , eV	-1.1112	-1.0812	-1.6753	-1.6430

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Инголд К. К., *Механизм реакций и строение органических соединений*, ИЛ, Москва, 1959, с. 251.
2. Baeg Z., J. Cheymol, J. M. Dallemadil, R. Hazard, J. Le Baree, J. J. Reuse and M. Welsh, *Pharmacolynume Biochenicque*, Masson and Co., Paris, 1961, p. 634.
3. Patai S. and Z. Rapport, *The chemistry of functional groups. The chemistry of alkenes*. London – N. Y., 1964, p. 469.
4. Simpkins Nidel S., *Tetrahedron*, **46**, 20, (1990) 6969.
5. Longer R.F., Baclocker F.G. and Penn L. Z., 2001, WO 01 62 668, 102 p.
5. Patai E., Z.Rappoport and C. J. Stirling, *The chemistry of Sulfoxides and Sulfones*, Wiley, New York, London, Chichester, 1988.
7. Прилежаева Е. Н., *Получение и свойства органических соединений серы*, Химия, Москва, 1998, с.115.
8. Прилежаева Е. Н., *Успехи химии*, **69**, 5 (2000) 403.
9. Qin Z., Cao Wei-guo, Chen J.and Tong W., *Ziran Kexueban*, **9** (1) 2003 83.
10. Morley J. O., *Int. J. Quantum Chem.*, (1998) 141.
11. Winget P., A. K. Horn and C. Selcuki, *J. Mol. Model*, 9 (2003) 408
12. Pogrebnya A.V., E. T. Oganesyanyan and A. A. Glushko, *Russian J. Org.Chem.*, **v.38**, 11 (2002) 1564.
13. *HyperChem for Windows*, Release 5.1, HyperCube, Ins.

Представена за печат на 29. 09. 2006 г.