

ОРИГИНАЛЬНАЯ СТАТЬЯ

УДК 541.6+544.1

doi: 10.26907/2542-064X.2023.1.49-57

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АССОЦИИИ АРИЛОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ МОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ

Д.П. Герасимова, Л.В. Французова, Р.Р. Файзуллин, О.А. Лодочникова

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова
ФИЦ Казанский научный центр РАН, г. Казань, 420088, Россия

Аннотация

Выполнено теоретическое исследование ассоциации фенолового и *орто*-замещенных ариловых производных молочной кислоты. Рассчитаны два варианта водородносвязанных ассоциатов в газовой фазе, а именно неклассический димер, реально обнаруженный в кристаллах, и смоделированный классический. Показано энергетическое преимущество классических димеров и неэквивалентность диастереотопных неподеленных электронных пар у карбонильного атома кислорода.

Ключевые слова: водородносвязанный димер, карбоновые кислоты, неподелённые электронные пары

Введение

Известно, что рацемические образцы феноловых и *орто*-замещенных ариловых производных молочной кислоты **1–4** (схема 1) кристаллизуются нетипичным для карбоновых кислот способом, с формированием в кристаллах однотипных синтонов посредством водородной связи между гидроксильной группой в α -положении и карбонильной группой в составе карбоксильной функции [1], вместо образования классических димеров карбоновых кислот. С целью прояснить относительно неожиданный тип ассоциации указанного ряда соединений выполнен ряд квантово-химических расчетов.

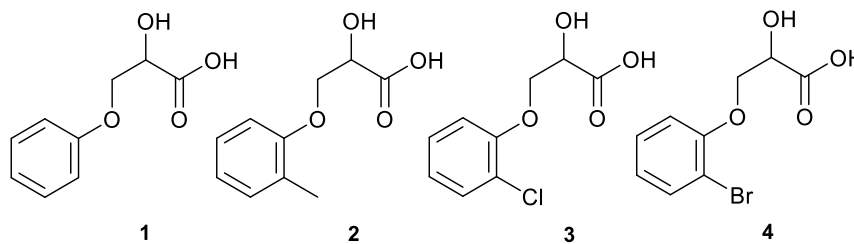


Схема 1. Структурные формулы исследованных соединений

Экспериментальная часть

Квантово-химические расчеты выполнены в рамках теории функционала плотности с использованием пакета программ Gaussian 16 [2]. Оптимизация геометрии выполнялась без ограничений по симметрии. Использовали гибридный функционал PBE0 [3, 4] и базисный набор 6-31G(d,p) [5]. Топологический анализ функции распределения электронной плотности выполнен в рамках теории «Атомы в молекулах» [6] с использованием программы AIMAll [7].

Результаты и их обсуждение

Проведено теоретическое исследование ассоциации указанного ряда соединений, а именно: рассчитали вариант реально реализующегося неклассического димера и искусственно смоделированного классического (схема 2, варианты *a* и *б* соответственно).

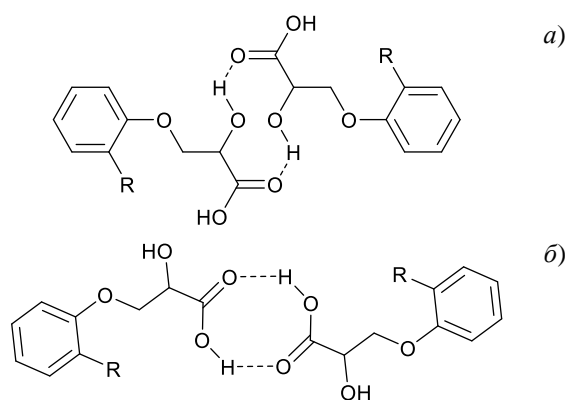


Схема 2. Схематичное изображение *a*) неклассического (реально реализующегося) и *б*) классического (смоделированного) димеров

Табл. 1

Энергетический выигрыш классического димера в сравнении с неклассическим

Соединение	Энергетический выигрыш классического димера, ккал моль ⁻¹
1	-16.19
2	-10.38
3	-12.78
4	-10.29

По данным расчетов (PBE0/6-31G(d,p)), классический димер выигрывает по энергии на величину около 10–16 ккал моль⁻¹ (табл. 1), как и следует из общих соображений.

Далее в контексте развиваемого нашей группой стереохимического подхода к анализу кристаллической структуры [8–11] мы выполнили блок расчетов по топологическому анализу вычисленной электронной плотности $\rho(\mathbf{r})$ и ее лапласиана $\nabla^2\rho(\mathbf{r})$ как для изолированной молекулы, так и для обоих вариантов димера. Мы исходили из предположения, что альтернативное участие либо одной, либо другой неподеленной электронной пары (НЭП) карбонильного атома кислорода напрямую соотносится с формированием первого или второго синтона.

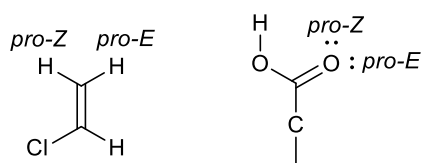


Схема 3. *pro-E* и *pro-Z* стереодескрипторы диастереотопных атомов и неподеленных электронных пар

Табл. 2

Топологические характеристики диастереотопных НЭП – критических точек минимума функции $\nabla^2\rho(\mathbf{r})$ – у атома кислорода карбонильной группы

Соединение	<i>pro-Z</i> НЭП		<i>pro-E</i> НЭП		
	ρ (НЭП), a.u.	$\nabla^2\rho(\mathbf{r})$ (НЭП), a.u.	ρ (НЭП), a.u.	$\nabla^2\rho(\mathbf{r})$ (НЭП), a.u.	
1	Изолированная молекула	0.9414	-5.7663	0.9462	-5.8455
	Неклассический димер	0.9108	-5.2727	0.9495	-5.8434
	Классический димер	0.9514	-5.9183	0.9391	-5.7224
2	Изолированная молекула	0.9417	-5.7722	0.9460	-5.8437
	Неклассический димер	0.9107	-5.2720	0.9500	-5.8515
	Классический димер	0.9534	-5.9466	0.9426	-5.7730
3	Изолированная молекула	0.9417	-5.7736	0.9466	-5.8543
	Неклассический димер	0.9112	-5.2789	0.9500	-5.8517
	Классический димер	0.9518	-5.9198	0.9435	-5.7833
4	Изолированная молекула	0.9418	-5.7751	0.9466	-5.8533
	Неклассический димер	0.9507	-5.9025	0.9457	-5.8162
	Классический димер	0.9121	-5.2859	0.9472	-5.8092

Как известно из классической стереохимии, в группе типа $abC=Cc_2$ два атома c являются стереохимически неэквивалентными, им могут быть приписаны дескрипторы *pro-E* и *pro-Z* (пример на схеме 3). Мы сочли уместным расширить это правило также и на НЭП. НЭП определяли как критические точки минимума функции $\nabla^2\rho(\mathbf{r})$. В соответствии со стереохимической неэквивалентностью их топологические характеристики могут различаться, что мы и обнаружили (табл. 2). Так, больший заряд сосредоточен на *pro-E* неподеленной паре в изолированной молекуле, а также в неклассическом димере, в то время как в классическом димере зависимость обратная.

Одновременная визуализация связевых путей и критических точек НЭП в обоих димерах показала следующее: в классическом димере синтонообразующая $O-H\cdots O$ -водородная связь всегда реализуется с непосредственным участием *pro-Z* неподеленной электронной пары (рис. 1). Кроме межмолекулярной водородной связи в этом типе димера во всех четырех случаях реализуется внутримолекулярное $O-H\cdots O$ -взаимодействие (параметры даны в табл. 3). Для классического бромсодержащего димера соединения **4** дополнительно реализуется $Br\cdots O$ -связывающий контакт (рис. 1, б).

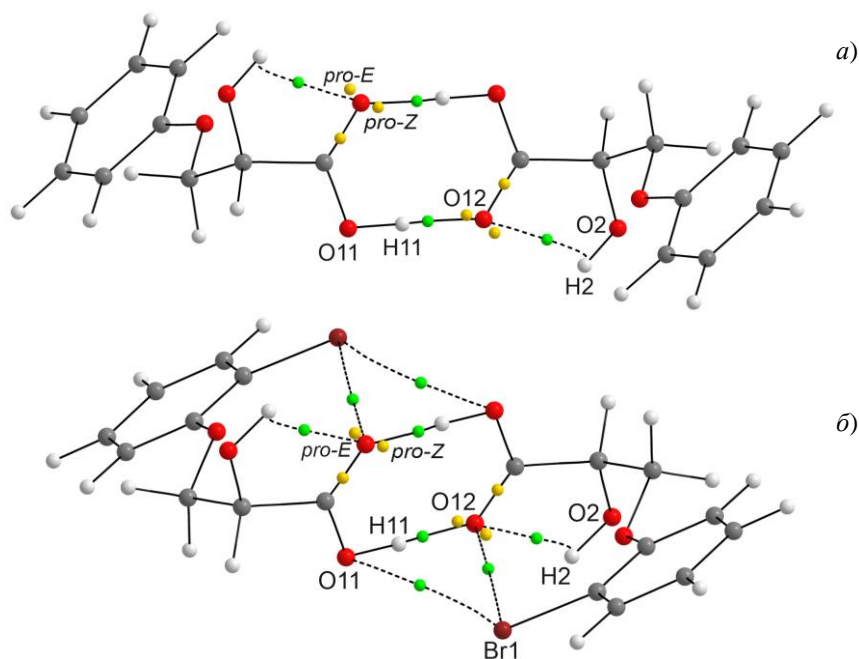


Рис. 1. а) Классические димеры соединений 1–3 на примере соединения 1; б) классический димер соединения 4

Табл. 3

Топологические характеристики связевых критических точек для нековалентных взаимодействий по данным квантово-химических расчетов в классических димерах

Соединение	Взаимодействие	$\rho(\mathbf{r}_{\text{BCP}})$, а.у.	$\nabla^2 \rho(\mathbf{r}_{\text{BCP}})$, а.у.	$v(\mathbf{r}_{\text{BCP}})$, а.у.	E_{int} , ккал моль ⁻¹
1	O11–H11…O12	0.0657 (0.0656)	0.1479 (0.1478)	–0.0548 (–0.0547)	–17.2067 (–17.1762)
	O2–H2…O12	0.0220 (0.0190)	0.0865 (0.0865)	–0.0190 (–0.0189)	–5.9515 (–5.9443)
2	O11–H11…O12	0.0657 (0.0657)	0.1479 (0.1479)	–0.0550 (–0.0549)	–17.2415 (–17.2384)
	O2–H2…O12	0.0215 (0.0215)	0.0867 (0.0867)	–0.0186 (–0.0186)	–5.8295 (–5.8307)
3	O11–H11…O12	0.0660 (0.0659)	0.1480 (0.1480)	–0.0553 (–0.0553)	–17.3369 (–17.3350)
	O2–H2…O12	0.0220 (0.0219)	0.0868 (0.0868)	–0.0189 (–0.0189)	–5.9365 (–5.9343)
4	O11–H11…O12	0.0674 (0.0674)	0.1491 (0.1491)	–0.0575 (–0.0575)	–18.0365 (–18.0293)
	O2–H2…O12	0.0246 (0.0246)	0.0881 (0.0881)	–0.0209 (–0.0209)	–6.5690 (–6.5712)
	Br1…O11	0.0046 (0.0046)	0.0157 (0.0157)	–0.0026 (–0.0026)	–0.8067 (–0.8060)

Примечание: $\rho(\mathbf{r}_{\text{BCP}})$ – электронная плотность, $\nabla^2 \rho(\mathbf{r}_{\text{BCP}})$ – лапласиан электронной плотности, $v(\mathbf{r}_{\text{BCP}})$ – плотность потенциальной энергии, E_{int} – аппроксимированная энергия взаимодействия; в скобках даны значения для аналогичного контакта.

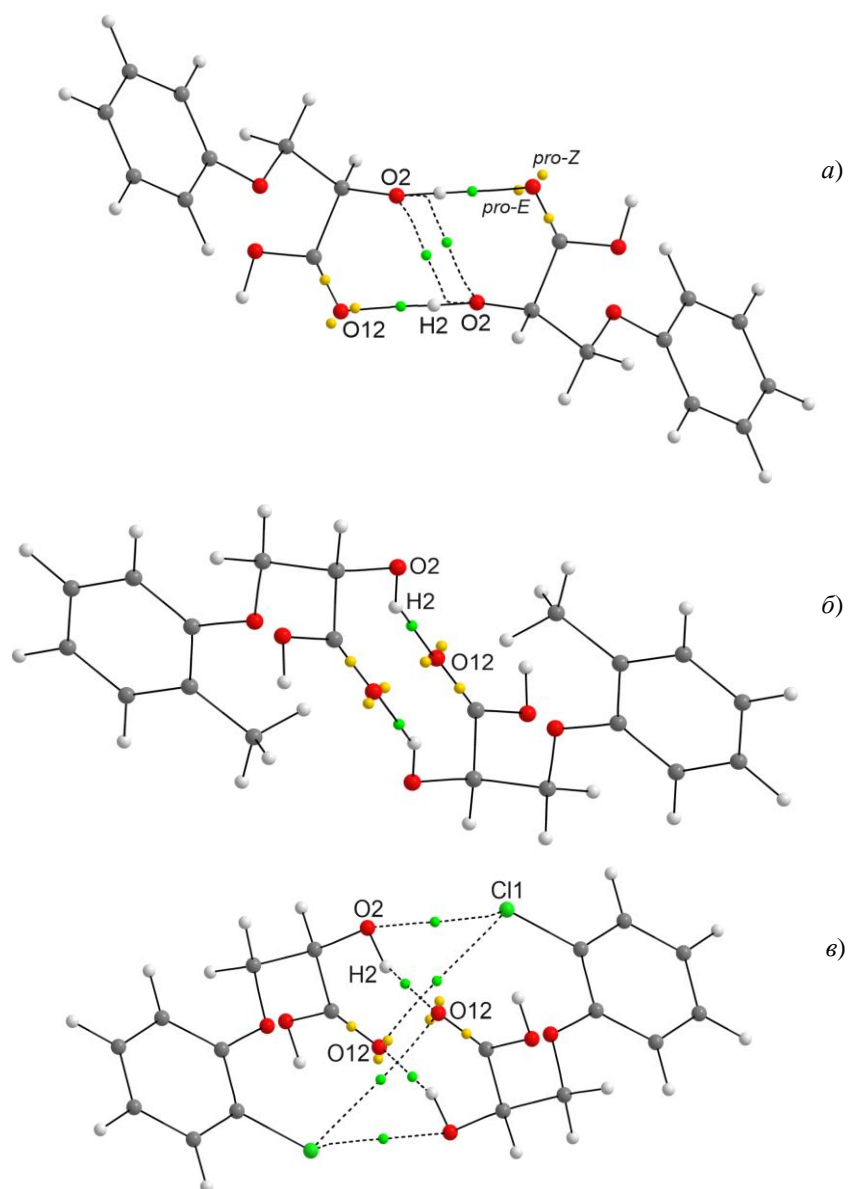


Рис. 2. а) Неклассический димер соединения **1**; б) неклассический димер соединения **2**; в) неклассический димер соединений **3** и **4** на примере соединения **3**

Устройство неклассических димеров соединений **1–4** более сложно и вариативно (табл. 4). Так, НЭП с дескриптором *pro-E* принимает участие в формировании неклассического синтона только в случае димера **1** (рис. 2, а), в то время как в димерах **2–4** донорный атом водорода гидроксильной группы ориентирован по биссектрисе угла между двумя неподеленными парами (рис. 2, б, в).

Далее, только в неклассическом димере **1** реализуется дополнительный внутренний контакт $O \cdots O$ (рис. 2, а). В неклассическом димере соединения **2** реализуется только одна водородная связь без каких-либо дополнительных связывающих контактов (рис. 2, б).

Табл. 4

Топологические характеристики критических точек нековалентных взаимодействий по данным квантово-химических расчетов в неклассических димерах*

Соединение	Взаимодействие	$\rho(\mathbf{r}_{\text{BCP}})$, а.у.	$\nabla^2 \rho(\mathbf{r}_{\text{BCP}})$, а.у.	$v(\mathbf{r}_{\text{BCP}})$, а.у.	E_{int} , ккал моль ⁻¹
1	O2–H2...O12	0.0321 (0.0321)	0.0914 (0.0914)	–0.0237 (–0.0237)	7.4462 (7.4453)
	O2...O2	0.0089 (0.0089)	0.0396 (0.0396)	–0.0065 (–0.0065)	2.0416 (2.0419)
2	O2–H2...O12	0.0262 (0.0262)	0.0795 (0.0795)	–0.0195 (–0.0195)	6.1131 (6.1131)
3	O2–H2...O12	0.0249 (0.0249)	0.0768 (0.0768)	–0.0184 (–0.0184)	5.7595 (5.7595)
	Cl1...O2	0.0058 (0.0058)	0.0221 (0.0221)	–0.0035 (–0.0035)	1.0912 (1.0912)
	Cl1...O12	0.0025 (0.0025)	0.0101 (0.0101)	–0.0013 (–0.0013)	0.3991 (0.3991)
4	O2–H2...O12	0.0230 (0.0230)	0.0707 (0.0707)	–0.0169 (–0.0169)	5.3027 (5.3027)
	Br1...O2	0.0107 (0.0107)	0.0336 (0.0336)	–0.0066 (–0.0066)	2.0560 (2.0560)
	Br1...O12	0.0052 (0.0052)	0.0169 (0.0169)	–0.0029 (–0.0029)	0.9105 (0.9105)

* Обозначения см. к табл. 3.

Интересную конструкцию имеют неклассические димеры соединений **3** и **4**: кроме синтонообразующей водородной связи в них также реализуются Hal...O контакты с участием как карбонильного кислорода, так и кислорода α -гидроксильной группы (рис. 2, в).

Заключение

Совокупность выполненных квантово-химических расчетов позволяет заключить следующее. Оба варианта водородносвязанных димеров устойчивы, со значительным энергетическим преимуществом классических димеров. Классические димеры сформированы с непосредственным участием *pro-Z* неподеленной пары карбонильного атома кислорода, в то время как водородная связь в неклассических димерах, за единственным исключением, образована без явного участия НЭП, а соответствующий связевый путь проходит по биссектрисе угла между неподеленными парами. Хотя обнаруженная изначальная неэквивалентность НЭП, количественно охарактеризованная посредством топологического анализа, а также их эволюция при димеризации не позволяют объяснить результат димеризации, тем не менее представляют собой важную электронную характеристику карбонильной группы.

Благодарности. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-13-00284).

Литература

1. *Bredikhin A.A., Fayzullin R.R., Gubaidullin A.T., Bredikhina Z.A.* Intermolecular hydrogen bonding in alpha-hydroxy carboxylic acids crystals: Connectivity, synthons, supramolecular motifs // *Crystals*. – 2022. – V. 12, No 10. – Art. 1479. – doi: 10.3390/cryst12101479.
2. *Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Petersson G.A., Nakatsuji H., Li X., Caricato M., Marenich A.V., Bloino J., Janesko B.G., Gomperts R., Mennucci B., Hratchian H.P., Ortiz J.V., Izmaylov A.F., Sonnenberg J.L., Williams-Young D., Ding F., Lipparini F., Egidi F., Goings J., Peng B., Petrone A., Henderson T., Ranasinghe D., Zakrzewski V.G., Gao J., Rega N., Zheng G., Liang W., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Throssell K., Montgomery Jr J.A., Peralta J.E., Ogliaro F., Bearpark M.J., Heyd J.J., Brothers E.N., Kudin K.N., Staroverov V.N., Keith T.A., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A.P., Burant J.C., Iyengar S.S., Tomasi J., Cossi M., Millam J.M., Klene M., Adamo C., Cammi R., Ochterski J.W., Martin R.L., Morokuma K., Farkas O., Foresman J.B., Fox D.J.* Gaussian 16, Revision A.03. – Wallingford: Gaussian, Inc., 2016.
3. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – V. 77, No 18. – P. 3865–3868. – doi: 10.1103/PhysRevLett.77.3865.
4. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – V. 78, No 7. – P. 1396. – doi: 10.1103/PhysRevLett.78.1396.
5. *Rassolov V.A., Ratner M.A., Pople J.A., Redfern P.C., Curtiss L.A.* 6-31G* basis set for third-row atoms // *J. Comp. Chem.* – 2001. – V. 22, No 9. – P. 976–984. – doi: 10.1002/jcc.1058.
6. *Bader R.F.W.* Atoms in Molecules: A Quantum Theory. – N. Y.: Oxford Univ. Press, 1990. – xviii, 438 p.
7. *Keith T.A.* AIMAll (Version 19.10.12). – URL: <https://aim.tkgristmill.com/>.
8. *Lodochnikova O.A., Startseva V.A., Nikitina L.E., Bodrov A.V., Klimovitskii A.E., Klimovitskii E.N., Litvinov I.A.* When two symmetrically independent molecules must be different: “Crystallization-induced diastereomerization” of chiral pinanyl sulfone // *CrystEngComm*. – 2014. – V. 16, No 20. – P. 4314–4321.
9. *Lodochnikova O.A., Gerasimova D.P., Plemenkov V.V.* From classical to supramolecular dynamic stereochemistry: Double crystallization-induced diastereomerization of thiazine sulfonamide // *Chirality*. – 2021. – V. 33, No 7. – P. 409–420. – doi: 10.1002/chir.23316.
10. *Французова Л.В., Герасимова Д.П., Лодочникова О.А.* Стереохимические особенности воспроизведения устойчивого димерного мотива в кристаллах производных BODIPY при переходе от ахирального к хиральному заместителю в мезо-положении // *Журн. структ. химии*. – 2022. – Т. 63, Вып. 12. – Art. 102362. – doi: 10.26902/JSC_id102362.
11. *Герасимова Д.П., Гильфанов И.Р., Павельев Р.С., Никитина Л.Е., Лодочникова О.А.* Формирование симметричного вторичного упаковочного мотива как причина кристаллизации энантиочистого ментанилсульфона с двумя независимыми молекулами // *Журн. структ. химии*. – 2023. – Т. 64, Вып. 1. – Art. 104593. – doi: 10.26902/JSC_id104593.

Поступила в редакцию 23.12.2022

Принята к публикации 13.02.2023

Герасимова Дарья Павловна, младший научный сотрудник лаборатории дифракционных методов исследований

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН

ул. Ак. Арбузова, д. 8, г. Казань, 420088, Россия

E-mail: darya.p_gerasimova@mail.ru

Французова Любовь Вадимовна, лаборант-исследователь лаборатории дифракционных методов исследований

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН

ул. Ак. Арбузова, д. 8, г. Казань, 420088, Россия

E-mail: lubovfrancuzova48@mail.ru

Файзуллин Роберт Рустемович, кандидат химических наук, научный сотрудник лаборатории дифракционных методов исследований

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН

ул. Ак. Арбузова, д. 8, г. Казань, 420088, Россия

E-mail: robert.fayzullin@gmail.com

Лодочникова Ольга Александровна, кандидат химических наук, заведующий лабораторией дифракционных методов исследований

Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН

ул. Ак. Арбузова, д. 8, г. Казань, 420088, Россия

E-mail: lod_olga@mail.ru

ISSN 2542-064X (Print)

ISSN 2500-218X (Online)

UCHENYE ZAPISKI KAZANSKOGO UNIVERSITETA. SERIYA ESTESTVENNYE NAUKI

(Proceedings of Kazan University. Natural Sciences Series)

2023, vol. 165, no. 1, pp. 49–57

ORIGINAL ARTICLE

doi: 10.26907/2542-064X.2023.1.49-57

Theoretical Study of the Association of Aryl Derivatives of Lactic Acid

D.P. Gerasimova, L.V. Frantsuzova, R.R. Fayzullin, O.A. Lodochnikova

Arbuzov Institute of Organic and Physical Chemistry, FRC Kazan Scientific Center,

Russian Academy of Sciences, Kazan, 420088 Russia

E-mail: ^{*}darya.p.gerasimova@mail.ru, ^{**}lubovfrancuzova48@mail.ru,

^{***}robert.fayzullin@gmail.com, ^{****}lod_olga@mail.ru

Received December 23, 2022; Accepted February 13, 2023

Abstract

A theoretical study of the association of phenyl and *ortho*-substituted aryl derivatives of lactic acid was carried out. Two variants of hydrogen-bonded associates in the gas phase were calculated: non-classical, actually found in the crystals, and simulated classical dimers. The energy advantage of classical dimers and the non-equivalence of diastereotopic electron lone pairs at the carbonyl oxygen atom were shown.

Keywords: hydrogen-bonded dimer, carboxylic acids, electron lone pairs

Acknowledgements. This study was supported by the Russian Science Foundation (project no. 22-13-00284).

Figure Captions

Scheme 1. Structural formulas of the studied compounds.

Scheme 2. General layout of *a*) non-classical (actual) and *b*) classical (simulated) dimers.

Scheme 3. *pro-E* and *pro-Z* stereodescriptors of diastereotopic atoms and electron lone pairs.

Fig. 1. a) Classical dimers of compounds 1–3 illustrated by the example of compound 1; b) classical dimer of compound 4.

Fig. 2. a) Non-classical dimer of compound 1; b) non-classical dimer of compound 2; c) non-classical dimer of compounds 3 and 4 illustrated by the example of compound 3.

References

1. Bredikhin A.A., Fayzullin R.R., Gubaidullin A.T., Bredikhina Z.A. Intermolecular hydrogen bonding in alpha-hydroxy carboxylic acids crystals: Connectivity, synthons, supramolecular motifs. *Crystals*, 2022, vol. 12, no. 10, art. 1479. doi: 10.3390/cryst12101479.
2. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Petersson G.A., Nakatsuji H., Li X., Caricato M., Marenich A.V., Bloino J., Janesko B.G., Gomperts R., Mennucci B., Hratchian H.P., Ortiz J.V., Izmaylov A.F., Sonnenberg J.L., Williams-Young D., Ding F., Lipparini F., Egidi F., Goings J., Peng B., Petrone A., Henderson T., Ranasinghe D., Zakrzewski V.G., Gao J., Rega N., Zheng G., Liang W., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Throssell K., Montgomery Jr J.A., Peralta J.E., Ogliaro F., Bearpark M.J., Heyd J.J., Brothers E.N., Kudin K.N., Staroverov V.N., Keith T.A., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A.P., Burant J.C., Iyengar S.S., Tomasi J., Cossi M., Millam J.M., Klene M., Adamo C., Cammi R., Ochterski J.W., Martin R.L., Morokuma K., Farkas O., Foresman J.B., Fox D.J. *Gaussian 16, Revision A.03*. Wallingford, Gaussian, Inc., 2016.
3. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, vol. 77, no. 18, pp. 3865–3868. doi: 10.1103/PhysRevLett.77.3865.
4. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.*, 1997, vol. 78, no. 7, p. 1396. doi: 10.1103/PhysRevLett.78.1396.
5. Rassolov V.A., Ratner M.A., Pople J.A., Redfern P.C., Curtiss L.A. 6-31G* basis set for third-row atoms. *J. Comp. Chem.*, 2001, vol. 22, no. 9, pp. 976–984. doi: 10.1002/jcc.1058.
6. Bader R.F.W. *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*. New York, Oxford Univ. Press, 1990. xviii, 438 p.
7. Keith T.A. AIMAll (Version 19.10.12). Available at: <https://aim.tkgristmill.com/>.
8. Lodochnikova O.A., Startseva V.A., Nikitina L.E., Bodrov A.V., Klimovitskii A.E., Klimovitskii E.N., Litvinov I.A. When two symmetrically independent molecules must be different: “Crystallization-induced diastereomerization” of chiral pinanyl sulfone. *CrystEngComm*, 2014, vol. 16, no. 20, pp. 4314–4321.
9. Lodochnikova O.A., Gerasimova D.P., Plemenkov V.V. From classical to supramolecular dynamic stereochemistry: Double crystallization-induced diastereomerization of thiazine sulfonamide. *Chirality*, 2021, vol. 33, no. 7, pp. 409–420. doi: 10.1002/chir.23316.
10. Frantsuzova L.V., Gerasimova D.P., Lodochnikova O.A. Stereochemical features of reproducing a stable dimeric motif in the crystals of BODIPY derivatives in transitioning from an achiral to a chiral substitute in *meso*-position. *J. Struct. Chem.*, 2022, vol. 63, no. 12, pp. 1913–1922. doi: 10.1134/S0022476622120010.
11. Gerasimova D.P., Gilfanov I.R., Pavelyev R.S., Nikitina L.E., Lodochnikova O.A. Formation of a symmetric secondary packing motif as the reason of the crystallization of enantiopure mentanyl sulfone with two independent molecules. *J. Struct. Chem.*, 2023, vol. 64, no. 1, pp. 69–81. doi: 10.1134/S0022476623010043.

Для цитирования: Герасимова Д.П., Французова Л.В., Файзуллин Р.Р., Лодоchnikova O.A. Теоретическое исследование ассоциации ариловых производных молочной кислоты // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Естеств. науки. – 2023. – Т. 165, кн. 1. – С. 49–57. – doi: 10.26907/2542-064X.2023.1.49-57.

For citation: Gerasimova D.P., Frantsuzova L.V., Fayzullin R.R., Lodochnikova O.A. Theoretical study of the association of aryl derivatives of lactic acid. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Estestvennye Nauki*, 2023, vol. 165, no. 1, pp. 49–57. doi: 10.26907/2542-064X.2023.1.49-57. (In Russian)