

СТРОЕНИЕ И КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ 2,2-ДИФЕНИЛ-5-МЕТИЛ-1,3-ДИОКСАНА

А. Е. Курамшина^a, Р. А. Халиков^b, В. А. Катаев^b, Т. В. Тюмкина^c,
Е. С. Мещерякова^c, Л. М. Халилов^c, В. В. Кузнецов^{a, d, *}

^a ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет»,
450062, Россия, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. Космонавтов 1
*e-mail: kuzmaggy@mail.ru

^b ФГБОУ ВО «Башкирский государственный медицинский университет» Минздрава России,
450008, Россия, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. Ленина 3

^c ФГБУН «Институт нефтехимии и катализа РАН»,
450075, Россия, Республика Башкортостан, г. Уфа, пр. Октября 141

^d ФГБОУ ВО «Уфимский государственный авиационный технический университет»,
450008, Россия, Республика Башкортостан, Уфа, ул. К. Маркса 12

Поступила в редакцию 13 июля 2020 г.

После доработки 18 июля 2020 г.

Принята к публикации 26 июля 2020 г.

С помощью ЯМР ¹H, ¹³C и данных рентгеноструктурного анализа исследовано строение 2,2-дифенил-5-метил-1,3-диоксана. Его молекулы в кристаллическом состоянии, а также в растворах CDCl₃ и C₆D₆ пребывают в конформации *кресло* с экваториальной метильной группой. Компьютерное моделирование в рамках приближений PBE/3ξ и гiMP2/λ2 наряду с сопоставлением теоретических и экспериментальных вицинальных констант спин-спинового взаимодействия позволили выявить маршрут конформационных превращений, а также значение Δ*G*₂₉₈⁰ C⁵-CH₃ группы в CDCl₃ и C₆D₆, и оптимальное число молекул растворителя в ближайшей сольватной оболочке исследуемого 1,3-диоксана.

Ключевые слова: 1,3-диоксан, рентгеноструктурный анализ, ЯМР, конформер, кластерная модель, компьютерное моделирование.

DOI: 10.31857/S0514749220100158

Известно, что 1,3-диоксанный фрагмент присутствует во многих биомолекулах с широким спектром фармакологического действия [1], в силу чего соединения этого класса весьма перспективны для создания новых лекарственных препаратов [2, 3]. Помимо этого замещенные 1,3-диоксаны широко используются в качестве реагентов тонкого органического синтеза [4–6], в частности, в региоселективных процессах в химии углеводов [7], при получении хиральных карбоновых кислот [8] и 1,3-диолюв [9], а также являются классическими объектами конформационного анализа [10]. Настоящая работа посвящена исследованию влияния природы и числа молекул растворителя на относительные энергии отдельных минимумов на

поверхности потенциальной энергии (ППЭ) данного соединения (кластерная модель), изучению строения и конформационных превращений неопределенного ранее 2,2-дифенил-5-метил-1,3-диоксана **1** (схема 1) с помощью ЯМР на ядрах ¹H, ¹³C, рентгеноструктурного анализа и апробированного для соединений этого класса DFT-метода PBE/3ξ [11] с использованием в отдельных случаях приближения гiMP2/λ2 (программное обеспечение ПРИРОДА [12]).

Образец диоксана **1** получен конденсацией 2-метил-1,3-пропандиола с бензофеноном (схема 2).

Было проведено рентгеноструктурное исследование кристаллов **1**. Кристаллографические

Схема 1.

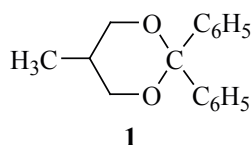
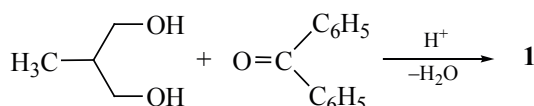


Схема 2.



детали приведены в экспериментальной части, а диоксан **1** зарегистрирован в Кембриджской базе структурных данных под CCDC 1988349.

Установлено, что структура молекулы кетала **1** отвечает конформации *кресло* с экваториальной метильной группой. При этом молекулы исследуемого соединения формируют моноклинные кристаллы с пространственной группой $P2_1/n$ (рис. 1). Для гетероатомной части кольца характерны ожидаемые длины связей С–О (1.410–1.430 Å) и значения валентных углов, близкие к 111–114° (табл. 1) [10, 11].

Результаты ЯМР ^1H и ^{13}C (табл. 2) в растворах CDCl_3 и C_6D_6 по данным 1D и 2D спектроскопии с использованием режимов NOESY, COSYHH и HSQC также свидетельствуют о пребывании молекул кетала **1** при комнатной температуре в преимущественной конформации *кресло* с экваториальной метильной группой у атома C^5 . На это указывает магнитно-неэквивалентный характер метиленовых протонов при углеродных атомах C^4 и C^6 гетероциклического кольца и значения констант спин-спинового взаимодействия (КССВ) $^3J_{\text{AX}}$ и $^3J_{\text{BX}}$.

Полученные результаты подтверждаются данными конформационного анализа диоксана **1** в рамках расчетных приближений РВЕ/3 ζ и – для изолированной молекулы – гМР2/ λ 2. На ППЭ этого соединения выявлены три минимума: *кресло* с экваториальной (*Ke*) и аксиальной (*Ka*) ориентацией метильной группы, 2,5-*твист*-форма, 2,5-*T*, – а также переходные состояния ПС1 и ПС2, отвечающее конформациям *полукресла* (схема 3). Расчетные значения длин связей, а также валентных и торсионных углов для конформера *Ke* близ-

ки к данным рентгеноструктурного эксперимента (табл. 1).

Относительные энергии всех форм, отвечающих стационарным точкам на ППЭ для изолированной молекулы диоксана **1**, а также для кластеров с растворителями (формы *Ke* и *Ka*) представлены в табл. 3.

Данные относительных энергий свидетельствуют о весьма низкой концентрации гибких форм на ППЭ. Следовательно, интерконверсию молекул кетала **1** возможно свести к бинарному равновесию $Ke \leftrightarrow Ka$ (схема 4).

В этом случае для оценки относительного содержания данных конформеров и соответствующей величины ΔG^0 метильного заместителя независимым методом можно использовать хорошо апробированный для 5-замещенных 1,3-диоксанов подход, учитывающий связь экспериментальных (из спектра ЯМР ^1H : $^3J_{\text{AX}}$, $^3J_{\text{BX}}$) и теоретических (J_{Aa} , J_{Ba} , J_{Ae} , J_{Be}) вицинальных КССВ альтернативных конформеров с относительным содержанием N и $1-N$ соответственно [11]:

$$^3J_{\text{AX}} + ^3J_{\text{BX}} = N \cdot (J_{\text{Aa}} + J_{\text{Ba}}) + (1-N) \cdot (J_{\text{Ae}} + J_{\text{Be}});$$

$$\Delta G^0 = -RT \ln N / (1-N)$$

В свою очередь, теоретические КССВ определяются по модифицированному уравнению Карплуса [13] с использованием торсионных углов между соответствующими протонами в конформерах, участвующих в бинарном равновесии (данные оптимальной геометрии).

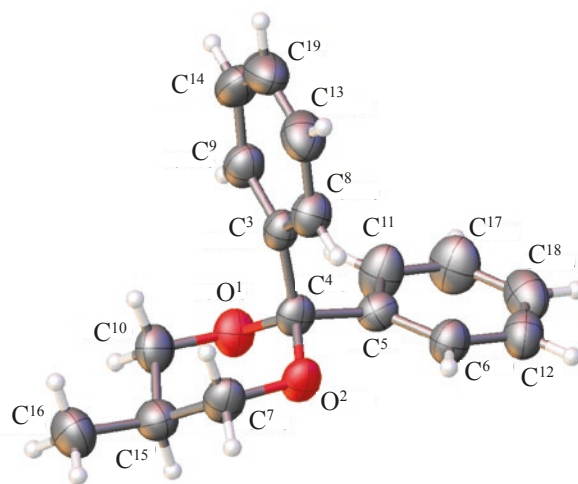


Рис. 1. Молекула соединения **1** в представлении атомов эллипсоидами тепловых колебаний ($p = 50\%$).

Таблица 1. Избранные длины связей и валентные углы в молекуле диоксана **1**^a.

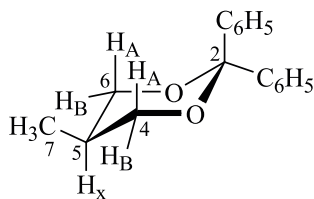
Связь	Длина связи, Å		Валентный угол	φ, град	
	расчет	эксперимент		расчет	эксперимент
C ₀₀₄ –O ₀₀₂	1.430	1.410(2)	O ₀₀₁ –C ₀₀₄ –O ₀₀₂	111.6	111.2(15)
C ₀₀₄ –O ₀₀₁	1.430	1.416(2)	C ₀₀₄ –O ₀₀₂ –C ₀₀₇	113.4	114.1(14)
C ₀₀₇ –O ₀₀₂	1.430	1.430(2)	C ₀₀₄ –O ₀₀₁ –C ₀₁₀	113.4	112.8(13)
C ₀₁₀ –O ₀₀₁	1.439	1.426(2)	C ₀₀₇ –C ₀₁₅ –C ₀₁₀	107.0	107.0(17)
C ₀₁₆ –C ₀₁₅	1.529	1.515(3)	C ₀₁₅ –C ₀₁₀ –O ₀₀₁	111.2	112.2(16)
C ₀₀₄ –C ₀₀₅	1.531	1.513(3)	C ₀₁₅ –C ₀₀₇ –O ₀₀₂	111.2	111.9(15)
C ₀₀₄ –C ₀₀₃	1.546	1.545 (3)	C ₀₀₃ –C ₀₀₄ –C ₀₀₅	109.2	108.1(16)

^a Данные расчета приведены для изолированной молекулы в вакууме, конформер *кресло-е*, РВЕ/3ζ.

Для всех типов исследованных кластеров средние значения расчетных торсионных углов между вицинальными протонами в конформерах *Ke* и *Ka* (РВЕ/3ζ) составили: φ_{Аа} 175.4°, φ_{Ва} 54.9°, φ_{Ае} 47.4° и φ_{Ве} 73.6° при среднем отклонении ±0.5°. Установленные, согласно уравнению [13], расчетные КССВ (*J*_{Аа} 11.7, *J*_{Ва} 4.9, *J*_{Ае} 3.6, *J*_{Ве} 2.3 Гц), а также соответствующие экспериментальные КССВ (табл. 2) были использованы для определения свободной конформационной энергии метильной группы у атома С⁵ в диоксане **1**. Полученные значения Δ*G*₂₉₈⁰ оказались равными 1.45 ккал/моль

(СНСl₃) и 0.84 ккал/моль (С₆Н₆). Сопоставление этих параметров с расчетными данными для исследованных комплексов (табл. 3) свидетельствуют о том, что в случае хлороформа величина Δ*G*₂₉₈⁰ хорошо соответствует кластеру с пятью молекулами в ближайшей сольватной оболочке 1,3-диоксана (рис. 2).

В случае бензола расчетное значение Δ*G*₂₉₈⁰ близко к данным на основании КССВ для систем **1**@4С₆Н₆ и **1**@7С₆Н₆. Однако термодинамическая вероятность реализации первого комплекса

Таблица 2. Данные ЯМР ¹Н и ¹³С диоксана **1**.

Растворитель	Протоны	ЯМР ¹ Н, м.д.; КССВ (Гц) ^a	С атомы	ЯМР ¹³ С, м.д.
CDCl ₃	H _А	3.6 т	C ²	100.8
	H _В	4.1 к	C ⁴ , C ⁶	67.9
	H _Х	2.2 м	C ⁵	29.4
	CH ₃	0.8 д; ³ <i>J</i> _{АХ} 11.3; ³ <i>J</i> _{ВХ} 4.4	C ⁷	13.2
	C ₆ H ₅	7.3–7.6 м	C _{аром}	125.8–144.0
C ₆ D ₆	H _А	3.4 т	C ²	101.0
	H _В	3.8 к	C ⁴ , C ⁶	67.7
	H _Х	1.8 м	C ⁵	29.5
	CH ₃	0.3 д; ³ <i>J</i> _{АХ} 10.2; ³ <i>J</i> _{ВХ} 4.3	C ⁷	13.0
	C ₆ H ₅	7.0–7.2 м	C _{аром}	126.4–144.8

^a т – триплет, к – квартет, м – мультиплет.

Таблица 3. Энергетические параметры конформационных превращений молекул диоксана **1** относительно формы *Ke* по данным РВЕ/3 ζ и гiMP2/ λ 2^a.

Растворитель	Конформер или конформация	ΔG_{298}^0 (ΔG_{298}^\ddagger), ккал/моль
	<i>Ka</i> ^a	0.60
	2,5- <i>T</i> ^a	3.10
	<i>Ka</i>	1.33
	2,5- <i>T</i>	1.84
	ПС1	(7.15)
	ПС2	(7.82)
3 CHCl ₃	<i>Ka</i>	1.11
5 CHCl₃	<i>Ka</i>	1.45
	ПС1	(5.53)
	ПС2	(7.76)
7 CHCl ₃	<i>Ka</i>	2.71
10 CHCl ₃	<i>Ka</i>	2.16
3 C ₆ H ₆	<i>Ka</i>	2.36
4 C₆H₆	<i>Ka</i>	0.83
	ПС1	(5.42)
	ПС2	(7.82)
5 C ₆ H ₆	<i>Ka</i>	1.87
6 C ₆ H ₆	<i>Ka</i>	2.47
7 C ₆ H ₆	<i>Ka</i>	0.75
8 C ₆ H ₆	<i>Ka</i>	4.79

^a Результаты гiMP2/ λ 2.

должна быть более высокой из-за меньшего числа молекул растворителя в ближайшей сольватной оболочке (рис. 3). Согласно полученным результатам активационный барьер перехода *Ke* \leftrightarrow *Ka* соответствует форме ПС2; данные эксперимента замещенных 1,3-диоксанов для полярных и не-

полярных растворителей лежат в интервале 8–10 ккал/моль [10].

Предложенный подход позволяет оценить реальное число молекул растворителя в ближайшем окружении молекулы растворенного вещества. Ранее по аналогичной методике были успешно

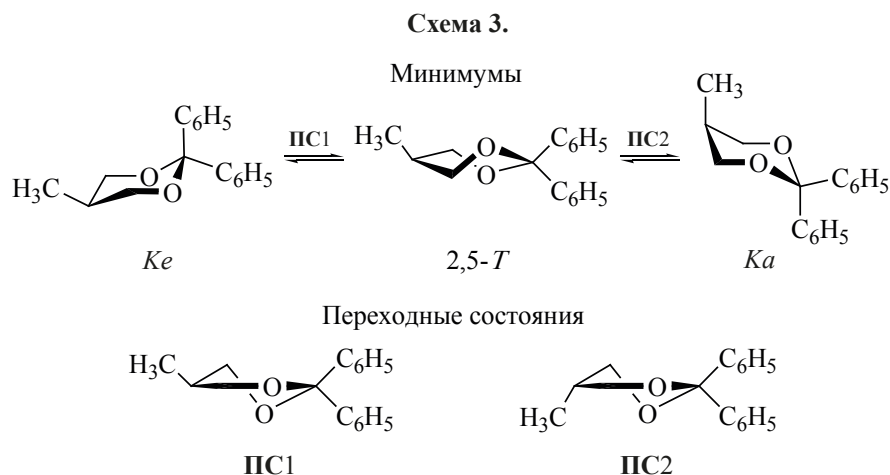
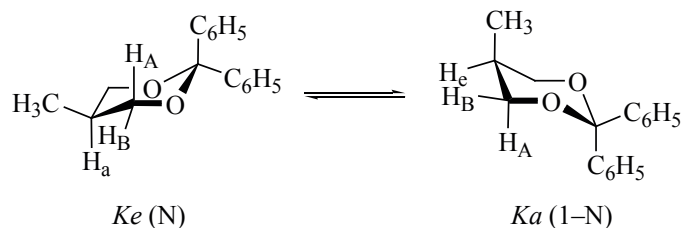


Схема 4.



исследованы кластеры 2,2,5,5-замещенных 1,3-диоксанов с молекулами различных растворителей [14, 15].

Следует также отметить отсутствие на ППЭ промежуточного минимума: 1,4-*твист*, – характерного для равновесия молекул незамещенного, а также 2-, 4-, 5-, 2,5- и 4,4-замещенных 1,3-диоксанов [11].

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Спектры ЯМР получены на спектрометре Bruker Avance 400 (Германия) с рабочими частотами 400.13 (^1H) и 100.62 (^{13}C) МГц (растворы в CDCl_3 и C_6D_6); внутренним стандартом является сигнал соответствующего растворителя. Чистота растворителей для ЯМР экспериментов составила 99.5–99.8% (Sigma–Aldrich).

Рентгеноструктурный анализ проведен на автоматическом четырехкружном дифрактометре XCalibur Eos (США), (графитовый монохроматор,

MoK_α -излучение, λ 0.71073 Å, ω -сканирование, $2\theta_{\text{max}}$ 62°). Сбор и обработка данных произведены с помощью программы CrysAlis^{Pro} Oxford Diffraction Ltd., версия 1.171.36.20. Структуры расшифрованы прямым методом и уточнены полноматричным методом наименьших квадратов в анизотропном приближении для неводородных атомов. Атомы водорода локализованы в разностном синтезе Фурье и уточнены изотропно. Расчеты выполняли по программе SHELX97 [16]. Кристаллографические данные и детали рентгеноструктурного эксперимента: T 293(2) К; кристаллическая система – моноклинная; пространственная группа $P2_1/n$; параметры ячейки a 15.636(5), b 6.2367(13), c 15.804(7) Å; α 90°, β 116.03(4)°, γ 90°, V 1384.8(9) Å³, Z 4; $\rho_{\text{выч}}$ 1.220 г/см³, μ 0.078 мм⁻¹, $F(000)$ 544.0; область сканирования $4.892 < \theta < 58.228$ град.; область индекса отражений $-14 \leq h \leq 21$, $-8 \leq k \leq 7$, $-21 \leq l \leq 10$; число независимых отражений 3193 (R_{int} 0.0408), $\text{GOOF } S = 1.000$; для отражений с $I_{\text{hkl}} > 2\sigma(I)$ $R_1 = 0.0578$, $wR_2 = 0.1237$;

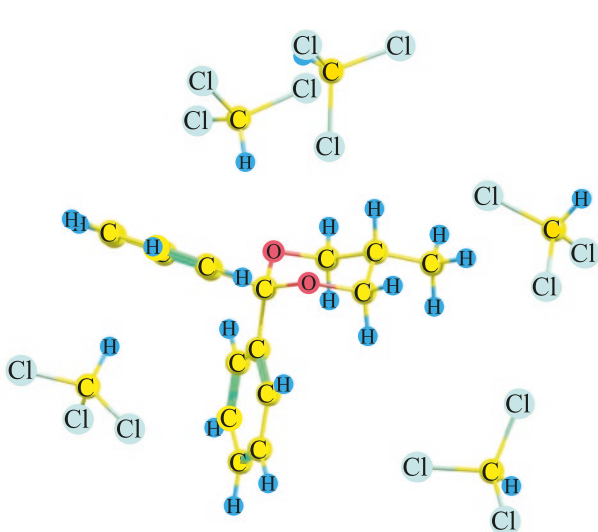


Рис. 2. Кластер диоксан 1 (*Ke*)@5CHCl₃.

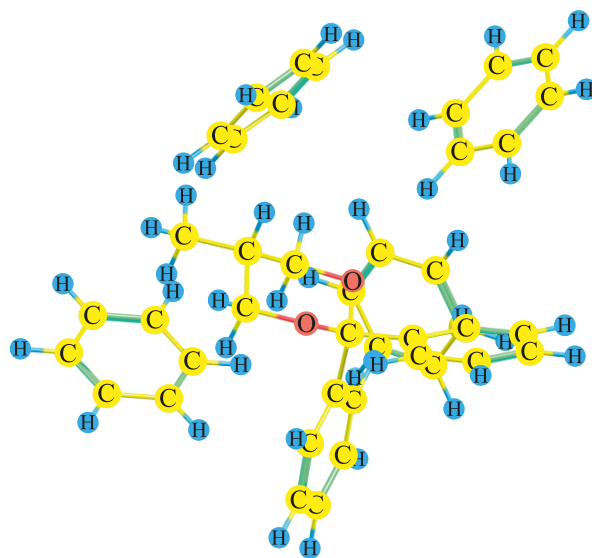


Рис. 3. Кластер диоксан 1 (*Ke*)@4C₆H₆.

для всех отражений $R_1 = 0.1110$, $wR_2 = 0.1570$; $\Delta\rho_{\min/\max} 0.16/-0.18 \text{ e}\text{\AA}^{-3}$.

Первоначальная оптимизация геометрии молекулы кетала **1** проводилась в рамках программного обеспечения HyperChem 8.0 (метод AM1) [17], а далее – с помощью метода РВЕ/3 ζ и, для свободной молекулы, приближения $\text{gMP2}/\lambda 2$ (ПРИРОДА [12]). Моделирование интерконверсии цикла проводилось путем сканирования торсионного угла СССО в пределах $-60\div 25^\circ$. Значения потенциальных барьеров установлены с помощью процедуры поиска переходных состояний в рамках программного обеспечения ПРИРОДА. Принадлежность стационарных точек ППЭ к переходному состоянию подтверждалась наличием одной мнимой частоты в соответствующем гессиане, а к минимуму – отсутствием мнимых частот. Модельные кластеры формировались путем последовательного добавления молекул растворителя в окрестность исследуемого 1,3-диоксана с помощью программных средств ПРИРОДА, после чего полученная система оптимизировалась в рамках РВЕ/3 ζ .

Модифицированное уравнение Карплуса имеет вид [13]:

$${}^3J_{\text{HH}} = P_1 \cos^2\varphi + P_2 \cos\varphi + P_3 + \sum \Delta\chi_i [P_4 + P_5 \cos^2(\xi_i \varphi + P_6 |\Delta\chi_i|)].$$

Здесь $\Delta\chi_i$ – разность электроотрицательностей между заместителями соответствующего этанового фрагмента и водородом, φ – расчетные торсионные углы между взаимодействующими протонами, ξ_i принимают значения ± 1 в зависимости от ориентации заместителей у атомов углерода этанового фрагмента. Параметры P_1 – P_6 определяются степенью замещения этого фрагмента. В данном случае число заместителей равно трем (O, CH₂, CH₃) и $P_1 = 13.22$, $P_2 = -0.99$, $P_3 = 0$, $P_4 = 0.87$, $P_5 = -2.46$, $P_6 = 19.9^\circ$ [23]. Значения электроотрицательностей получены из работы [18].

2,2-дифенил-5-метил-1,3-диоксан (1). Эквивалентную смесь (0.02 моля, 1.8 г) 2-метил-1,3-пропандиола (Sigma–Aldrich) и бензофенона (3.64 г) в 50 мл бензола в присутствии 0.1 г *n*-толуолсульфокислоты (ПТСК) кипятили с обратным холодильником до прекращения выделения воды в ловушке Дина–Старка, промывали 5% раствором гидрокарбоната натрия (10 мл), затем водой (2 \times 10 мл),

растворитель отгоняют, а остаток дважды перекристаллизовывали из 95% EtOH. Выход продукта составил 2.7 г (53%). Температура плавления 114 – 115°C . Найдено, %: С 80.36; Н 7.11. С₁₇Н₁₈О₂. Вычислено, %: С 80.31; Н 7.09.

БЛАГОДАРНОСТИ

Структурные исследования диоксана **1** проведены в Центре коллективного пользования «Агидель» при Институте нефтехимии и катализа РАН.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ram V.J., Sethi A., Nath M., Pratar R. *The Chemistry of Heterocycles. Chemistry of Six- to Eight-membered N, O, S, P and Se Heterocycles*. Amsterdam: Elsevier. **2019**, 340–392. doi 10.1016/B978-0-12-819210-8.00002-3
2. Franchini S., Sorbi C., Linciano P., Camevale G., Tait A., Ronsisvalle S., Buccioni M., Del Bello F., Cilia A., Pironal L., Denora N., Iacobazzi R.M., Brasili L. *Eur. J. Med. Chem.* **2019**, 176, 310–325. doi 10.1016/j.ejmech.2019.05.024
3. Тугарова А.В., Казакова А.Н., Камнев А.А., Злотский С.С. *ЖОрХ.* **2014**, 84, 1652–1655. [Tugarova A.V., Kazakova A.N., Kamnev A.A., Zlotskij S.S. *Russ. J. Gen. Chem.* **2014**, 84, 1930–1933.] doi 10.1134/S1070363214100119
4. Рахманкулов Д.Л., Караханов Р.А., Злотский С.С., Кантор Е.А., Имашев У.Б., Сыркин А.М. *Итоги науки и техники. Технология органических веществ*. М.: ВИНТИ, **1979**, 5, 6–248.
5. Кузнецов В.В. *ХГС.* **2006**, 42, 643–654. [Kuznetsov V.V. *Chem. Heterocycl. Comp.* **2006**, 42, 559–569.] doi 10.1007/s10593-006-0127-x
6. Кузнецов В.В. *Изв. АН. Сер. хим.* **2005**, 54, 1499–1507. [Kuznetsov V.V. *Russ. Chem. Bull.* **2005**, 54, 1543–1551.] doi 10.1007/s11172-006-0001-0
7. Janssens J., Risseeuw M.D.P., Eycken J.V., Calenbergh S.V. *Eur. J. Org. Chem.* **2018**, 2018, 6405–6431. doi 10.1002/ejoc.201801245
8. Cooksey J., Gunn A., Philip J. Kocienski P.J., Kuhl A., Uppal S., Christopher J.A., Bell R. *Org. Biomol. Chem.* **2004**, 2, 1719–1731. doi 10.1039/B400242C
9. Sinz C.J., Rychnovsky S.D. *Top. Curr. Chem.* **2001**, 216, 50–93. doi 10.1007/3-540-44726-1_2

10. *Внутреннее вращение молекул*. Ред. В.Дж. Орвилл-Томас. М.: Мир, 1977.
11. Кузнецов В.В. *ЖОрХ*. 2014, 50, 1247–1265. [Kuznetsov V.V. *Russ. J. Org. Chem.* 2014, 50, 1227–1246.] doi 10.1134/S1070428014090012
12. Лайков Д.Н., Устынюк Ю.А. *Изв. РАН. Сер. хим.* 2005, 54, 804–810. [Laikov D.N., Ustynyuk Yu.A. *Russ. Chem. Bull.* 2005, 54, 820–826.] doi 10.1007/s11172-005-0329-x
13. Haasnoot C.A.G., de Leeuw F.A.A.M., Altona C. *Tetrahedron*. 1980, 36, 2783–2792. doi 10.1016/0040-4020(80)80155-4
14. Раскильдина Г.З., Спирихин Л.В., Злотский С.С., Кузнецов В.В. *ЖОрХ*. 2019, 55, 601–607. [Raskildina G.Z., Spirikhin L.V., Zlotskij S.S., Kuznetsov V.V. *Russ. J. Org. Chem.* 2019, 55, 502–507.] doi 10.1134/S1070428019040146
15. Хажиев Ш.Ю., Хусаинов М.А., Халиков Р.А., Катаев В.А., Тюмкина Т.В., Мещерякова Е.С., Халилов Л.М., Кузнецов В.В. *ЖОрХ*. 2020, 56, 9–15. [Khazhiev Sh.Yu., Khusainov M.A., Khalikov R.A., Kataev V.A., Tyumkina T.V., Meshcheryakova E.S., Khalilov L.M., Kuznetsov V.V. *Russ. J. Org. Chem.* 2020, 56, 1–6.] doi 10.1134/S1070428020010017
16. Sheldrick G.M. *Acta Crystallogr., Sect. A*. 2008, 64, 112–122. doi 10.1107/S0108767307043930
17. HyperChem 8.0. <http://www.hyper.com>
18. Huggins M.L. *J. Am. Chem. Soc.* 1953, 75, 4123–4126. doi 10.1021/ja01113a001

Structure and Conformational Analysis of 2,2-Diphenyl-5-methyl-1,3-dioxane

A. E. Kuramshina^a, R. A. Khalikov^b, V. A. Kataev^b, T. V. Tyumkina^c,
E. S. Mesheryakova^c, L. M. Khalilov^c, and V. V. Kuznetsov^{a, d, *}

^a Ufa State Petroleum Technological University, 450062, Russia, Republic of Bashkortostan, Ufa, ul. Kosmonavtov 1
*e-mail: kuzmaggy@mail.ru

^b Bashkirian State Medical University, 450008, Russia, Republic of Bashkortostan, Ufa, ul. Lenina 3

^c Institute of Petrochemistry and Catalysis of Russian academy of Science,
450075, Russia, Republic of Bashkortostan, Ufa, pr. Oktyabrya 141

^d Ufa State Aviation Technical University,
450008, Russia, Republic of Bashkortostan, Ufa, ul. K. Marksa 12

Received July 13, 2020; revised July 18, 2020; accepted July 26, 2020

The structure of 2,2-diphenyl-5-methyl-1,3-dioxane was determined using NMR ¹H, ¹³C and X-ray analysis. In crystal state and in solutions of CDCl₃ and C₆D₆ its molecules have a chair conformation with equatorial orientation of methyl group. Computer simulation using PBE/3ξ and riMP2/λ2 approximations together with the comparison of theoretical and experimental vicinal coupling constants revealed the rout of conformational transformations, the value of Δ*G*₂₉₈⁰ for C⁵–CH₃ group in CDCl₃ and C₆D₆ solutions and the optimal number of the molecules of solvent in the nearest shell of studied 1,3-dioxane.

Keywords: 1,3-dioxane, X-ray analysis, NMR, conformer, explicit model, computer simulation