

*stvennogo universiteta. Seriya Fizika [News of Saratov State University. Series Physics], 2011, vol. 11, issue 1, pp. 20–25.*

8. Elkin P. M., Erman M. A., Pulin V. F. Strukturno-dinamicheskie modeli i anгармонический анализ колебательных состояний полихлорированных дбензо-*n*-диоксинов [Structural and dynamic models and anharmonic analysis of vibrational states of polychlorinated dibenzo-*n*-dioxine]. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii [Journal of Applied Spectroscopy], 2007, vol. 74, no. 1, pp. 21–24.*

9. Bandyopadhyay I. Force fields and assignments of the vibrational spectra of acridine and phenazine. Ab initio study. *J. Mol. Structure, 2000, vol. 507, pp. 217–227.*

10. Fu A., Du D., Zhou Z. Density functional theory study of vibrational spectra of acridine and phenazine. *Spectrochim. Acta, 2003, vol. 59, no. 2, pp. 245–253.*

11. Hoy A. R., Mills I. M., Strey. G. Anharmonic force constants calculation. *J. Mol. Phys., 1972, vol. 21, no. 6, pp. 1265–1290.*

12. Kure B., Morris M. D. Raman spectra of phenothiazine and pharmaceutical derivatived. *Talanta, 1976, vol. 23, pp. 398–400.*

13. Rasanen J., Stenman F., Penttinen E. Raman scattering from molecular crystals-II. Anthracene. *Spectrochim. Acta, 1973, vol. 29A, no. 3, pp. 595–403.*

УДК 539.193/.194.535/.33/34

### **МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ДИНАМИКИ S-ГЕКСОГЕНА**

*Элкин Михаил Давыдович*, доктор физико-математических наук, профессор, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

*Смирнов Владимир Вячеславович*, кандидат физико-математических наук, доцент, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

*Джалмухамбетова Елена Азатуллаевна*, кандидат физико-математических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

*Алыкова Ольга Михайловна*, кандидат педагогических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

*Амантаева Луиза Садыховна*, ассистент, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

На основании неэмпирических квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала в данной работе предложена интерпретация колебательных состояний гексогена, или циклотриметилнитроаминина ( $C_6H_6N_6O_6$ ). Проведен анализ конформационной структуры исследуемого соединения, выявлены признаки его спектральной идентификации. Обоснован выбор метода и базиса расчета частот фундаментальных колебаний и интенсивностей полос в спектрах ИК и КР. Описана методика оценки ангармонизма колебаний с использованием кубических и квартичных силовых постоянных. В статье представлены результаты численного эксперимента, определены геометрические параметры молекул, такие как длины валентных связей и величины углов между ними. Получены частоты колебательных состояний и величины их интегральных интенсивностей. Для исследованного соединения предложена теоретическая интерпретация спектра, приводится сравнение с экспериментальными данными по ИК и КР спектрам. Расчет проводился квантовым методом функционала плотности DFT/B3LYP для четырех базисных наборов 6-311G\*, 6-311G\*\*, 6-311+G\*\*, 6-311++G\*. Показано, что данный метод может быть использован для моделирования геометрических параметров молекул и

электронной структуры различных замещенных бензола. Он позволяет построить на основе численных расчетов структурно-динамические модели указанного класса соединений.

**Ключевые слова:** гексоген, RDX, s-гексоген, конформер, колебательные спектры, молекулярные спектры, ИК спектр, спектр КР, адиабатический потенциал

## THE MODELING STRUCTURE AND DYNAMICS OF THE S-CYCLONITE HEXOGEN

*Elkin Mikhail D.*, D.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Astrakhan State University  
20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: elkinmd@mail.ru,  
kof@aspu.ru

*Smirnov Vladimir V.*, Ph.D. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

*Dzhalmukhambetova Yelena A.*, Ph.D. (Physics and Mathematics), Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

*Alykova Olga M.*, Ph.D. (Pedagogics), Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

*Amantaeva Luiza S.*, Assistant, Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: elkinmd@mail.ru, kof@aspu.ru

The article has proposed an interpretation of the vibrational states of the s-cyclonite hexogen, or RDX ( $C_6H_6N_6O_6$ ), which is based on ab initio quantum calculations for its adiabatic potential. Moreover, the paper has analyzed the hexogen compound's conformational structure, which displays signs of its spectral identification. Subsequently, the critique offers a choice of the method and basis of fundamental vibration frequencies and band intensities in the IR and Raman spectra. It also describes a technique for evaluating anharmonicity with cubic and quartic force constants. The study goes on to present the results of numerical experiments defining the geometrical parameters of molecules, such as valence bond lengths and angles between them. Using this methodology, the frequency of the vibrational states and the magnitude of their integrated intensities are obtained. For the s-cyclonite compound, a theoretical interpretation of the spectrum and a comparison with experimental data on IR and Raman spectra are also given. The calculation was carried out by applying the DFT/B3LYP quantum density functional method with bases 6-311G\*, 6-311G\*\*, 6-311+G\*\* and 6-311++G\*. According to the commentary, this method could be used for modeling the molecular geometrical parameters and electronic structure of various benzoyl substitutes. It would allow a solution to be built on the basis of numerical calculations for the structural-dynamic models of this class of compound.

**Keywords:** cyclonite, RDX, s-cyclonite, conformer, vibrational spectra, molecular spectra, IR spectra, Raman spectra, adiabatic potential

**Введение.** Гексоген (циклотриметилентринитроамин, RDX) – известное взрывчатое вещество ( $C_6H_6N_6O_6$ ), превосходящее по скорости детонации многие типы взрывчатых соединений бризантного действия, в частности тротила. Известен как сильный яд, принадлежащий к энергоемким соединениям.

Исследование колебательных спектров гексогена осуществлялось неоднократно [6, 8–12], однако использовать полученные результаты для задачи спектральной идентификации соединений затруднительно ввиду отсутствия количественной оценки интенсивностей полос в ИК и КР спектрах. Такую оценку можно осуществить в рамках исследования геометрической структуры и колебательных состояний сложных молекулярных систем квантовыми методами.

Отметим, что предлагаемая в цитируемой литературе теоретическая интерпретация колебательных спектров гексогена и его возможных конформеров осуществлена в рамках гармо-

нического приближения теории молекулярных колебаний [2], а учет ангармонизма колебаний осуществлялся с помощью различных схем процедуры масштабирования [1, 8]. Согласно представленным экспериментальным данным по ИК и КР спектрам, спектральная идентификация конформеров затруднительна, поскольку сдвиг полос составляет величину  $\sim 10 \text{ см}^{-1}$ .

Цель данной работы – построение структурно-динамической модели доминирующего конформера гексогена, обладающего симметрией  $C_{3v}$  (s-гексоген) (рис.). Решение задачи осуществлено в рамках метода функционала плотности DFT/B3LYP с базисами 6-311G\*, 6-311G\*\*, 6-311+G\*\*, 6-311++G\* [7]. Трудность использования технологии «Gaussian» при решении задачи в ангармоническом приближении для соединений высокой симметрии устранена искусственным понижением симметрии объекта исследования.

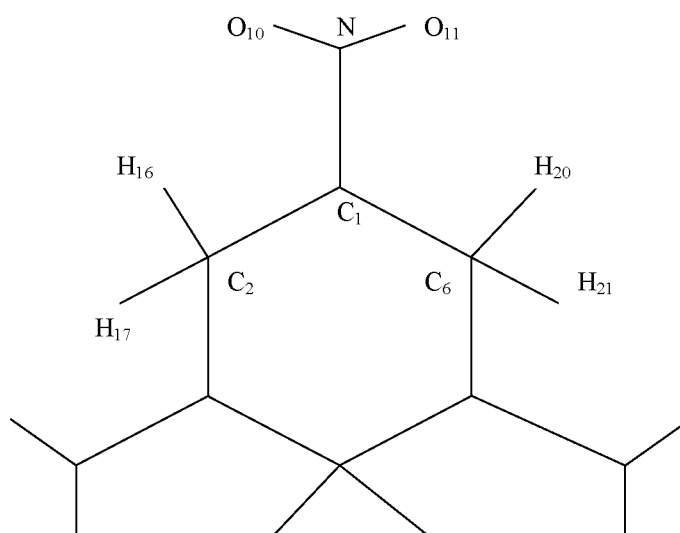


Рис. Молекулярная диаграмма s-гексогена

**Математическая модель анализа колебательных состояний.** Воспользуемся следующим соотношением для оценки энергии колебательных состояний

$$E_v = v_s \left( n_s + \frac{1}{2} \right) + \chi_{sr} \left( n_s + \frac{1}{2} \right) \left( n_r + \frac{1}{2} \right). \quad (1)$$

Выражения для ангармонических констант  $\chi_{sr}$  были предложены в работе [10]:

$$\chi_{ss} = \frac{1}{16} F_{ssss} - \frac{5}{48} \frac{(F_{sss})^2}{v_s} + \frac{1}{32} (F_{ssr})^2 (\Omega(s; s; -r) - \Omega(s; s; r) - 12\Omega(r; r; r)) (1 - \delta_{sr}); \quad (2)$$

$$\chi_{sr} = \frac{1}{16} F_{ssrr} - \frac{1}{8} (F_{ssr})^2 (\Omega(s; s; -r) + \Omega(s; s; r) (1 - \delta_{sr})) + \frac{3}{8} (F_{srt})^2 (\Omega(s; r; t) - \Omega(s; r; -t) + \Omega(s; -r; t) - \Omega(s; -r; -t)) \times \\ \times (1 - \delta_{sr}) (1 - \delta_{st}) (1 - \delta_{rt}) + L(\alpha, sr)^2 \frac{\Omega(s; r; 0) + \Omega(s; -r; 0)}{2}. \quad (3)$$

В соотношениях (1)–(3)  $P_\alpha = L(\alpha; sr) Q^s P_r$ ;  $L(\alpha; sr)$  – постоянные Кориолиса;  $v_s$  – частоты гармонических колебаний (в  $\text{см}^{-1}$ );  $Q^s$  – безразмерные нормальные колебательные координаты, линейно связанные с декартовыми смещениями атомов;  $F_{srt}$  и  $F_{srtu}$  – кубические и четвертные силовые постоянные (параметры адиабатического потенциала молекулы);

$\Omega(s; \pm r; \pm t) = (v_s \pm v_r \pm v_t)^{-1}$  – резонансные функции;  $n_s$  – квантовые числа рассматриваемого колебательного состояния.

Воспроизвести низкочастотные деформационные колебания шестичленного триазинового цикла удастся лишь в предположении его неплоской структуры. Выбор в качестве исходной модели конформера симметрии  $C_{3v}$  (s-гексоген) после оптимизации геометрии молекулы привел к значениям длин валентных связей, валентных и двугранных углов, представленных в табл. 1. Влияние атомного базиса сказывается на третьем знаке мантиссы для рассчитанных длин связей, втором – для валентных углов. Для двугранных углов значения различаются мантиссой.

Таблица 1

**Оптимизированные значения геометрических параметров S-гексогена**

$R_{CN}$	1,46	$A_{CNC}$	117,1	$D_{C6N1C2N3}$	-55	$D_{N7N1C2H16}$	44
$R_{NN}$	1,40	$A_{NCN}$	105,8	$D_{C6N1C2H16}$	-173	$D_{N7N1C2H17}$	-77
$R_{NO}$	1,22	$A_{NNO}$	116,5	$D_{C6N1C2H17}$	66	$D_{C6N1N7O11}$	19
$R_{CH}$	1,09	$A_{ONO}$	126,9	$D_{N7N1C2C3}$	162	$D_{C6N1N7O10}$	-162

*Примечание.* Длины связей  $R$  в Å, значения валентных  $A$  и двугранных углов  $D$  в °.

В табл. 2 приведены результаты теоретической интерпретации фундаментальных колебательных состояний s-гексогена на основании решения задачи о молекулярных колебаниях в ангармоническом приближении ( $v_{анг}$ ), которые хорошо согласуются с результатами применения процедуры масштабирования ( $v_M$ ). При этом мы ограничились лишь сильными по интенсивностям в спектрах ИК и КР полосами, которые могут представлять интерес для задачи спектральной идентификации соединений. Исключение составляет колебание угла  $\gamma_{ONO}$  нитрогруппы. Полосы, интерпретированные как валентные колебания связей С-Н, щель между которыми менее  $10 \text{ см}^{-1}$ , не разделены.

Таблица 2

**Интерпретация фундаментальных колебаний S-гексогена**

Форма колебаний	$v_{эксп}$ [1, 5]	$v_T$	$v_M$	$v_{анг}$	6-311G*		6-311G**		+G**		++G**	
					ИК	КР	ИК	КР	ИК	КР	ИК	КР
Симметрия $A_1$												
q	3072	3214	3075	3073	0,7	49	1,8	52	1,4	55	1,5	55
q	2949	2966	2837	2825	115	263	107	268	88	280	96	306
$Q_{NO}, \beta_{NNO}$	1589	1649	1594	1623	892	5,2	899	5,2	1034	15	1034	15
$\beta$	1458	1534	1486	1498	2,7	0,4	3,0	0,3	4,2	0,1	4,2	0,1
$Q_{NN}, Q_{NO}$	1342	1360	1319	1332	22	19	29	18	16	22	17	23
$\beta$	1218	1253	1217	1226	8,0	31	7,5	31	6,7	39	6,8	40
$\rho_{NN}, \chi, Q_{CN}$	881	914	890	889	55	4,1	52	4,7	47	4,6	47	4,6
$\gamma_{ONO}$	779	823	802	813	6,1	7,3	7,4	7,0	4,6	12	4,7	13
$\rho_{NN}$	739	767	748	756	21	0,2	22	0,2	11	0,1	12	0,1
$\gamma_{ONO}, \gamma$	670	704	687	691	1,1	0,3	1,2	0,3	0,5	0,2	0,5	0,2
$\chi$	348	332	325	328	0,3	12	0,2	12	0,1	13	0,1	13
$\chi, \rho_{NN}$	324	319	313	324	12	0,2	12	0,1	9,8	1,1	9,9	0,9
Симметрия $E$												
q	3067	3210	3072	3069	27	35	32	36	34	32	33	32
q	2949	2963	2834	2824	11	14	10	25	8	22	8	22
$\beta$	1527	1520	1472	1493	13	13	12	14	14	11	14	11
$\beta$	1386	1441	1397	1409	80	12	106	9,4	78	7,4	78	7,6
$\beta$	1307	1341	1301	1308	26	4,6	26	3,6	50	3,6	46	3,6
$Q_{CN}, \beta_{CNN}, \gamma$	1268	1304	1265	1264	98	0,2	104	0,2	148	0,1	144	0,2
$\beta, Q_{NO}, Q_{CN}$	1261	1285	1247	1251	1110	15	1084	15	1066	15	1074	15
$\beta, Q_{NN}$	1039	1067	1038	1050	113	8,5	129	8,2	232	8,6	236	8,8

$\beta, Q_{NN}$	947	998	971	970	690	11	674	10	740	11	738	11
$\gamma_{ONO}$	852	892	868	875	54	2,6	44	2,6	54	1,2	54	1,2
$\gamma, \beta_{NNO}$	591	592	578	584	18	7,4	19	7,6	19	6,6	19	6,4
$\gamma, \beta_{CNN}$	348	362	354	355	1,0	12	1,2	12	1,0	10	1,0	10
$\chi, \rho_{NN}$	226	223	219	242	9,2	0,4	8,6	0,3	8,7	0,8	8,6	0,7

*Примечание.* Частоты колебаний в  $\text{см}^{-1}$ , интенсивности в ИК спектрах –  $\text{км/моль}$ , в спектрах КР –  $\text{Å}^4/\text{а.е.м.}$

Как следует из табл. 2, выбор базиса расчета не влияет на теоретическую оценку интенсивностей полос в спектрах ИК и КР, что согласуется с результатами предсказательных расчетов, полученных для тринитротолуола, тринитротриазина и тринитробензола [4, 5]. Наибольшей интенсивностью в ИК спектрах обладают полосы, интерпретированные как валентные колебания связей NO ( $Q_{NO}$ ) нитрогрупп, что имеет место в тринитротолуоле, тринитротриазине и тринитробензоле [4, 5]. Однако диапазон их проявления смещен в коротковолновый диапазон до величины  $\sim 50 \text{ см}^{-1}$ .

Явным признаком спектральной идентификации гексогена является сильная по интенсивности в ИК спектре соединения полоса ( $\sim 970 \text{ см}^{-1}$ ), интерпретированная как валентное колебание связи NN ( $Q_{NN}$ ) нитрофрагмента. Использование остальных полос для этих целей затруднено.

**Заключение.** Результаты модельных расчетов геометрии молекул и колебательных состояний тринитрозамещенных шестичленных циклических соединений (тринитротолуола, тринитробензола, тринитротриазина, тринитрофенола), сопоставление полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными по колебательным спектрам соединений дают основание утверждать, что методы функционала плотности DFT/B3LYP обладают достоверными предсказательными возможностями для построения структурно-динамических моделей данного класса соединений.

#### Список литературы

1. Краснощеков С. В. Масштабирующие множители как эффективные параметры для коррекции неэмпирического силового поля / С. В. Краснощеков, Н. Ф. Степанов // Журнал физической химии. – 2007. – Т. 81, № 4. – С. 680–689.
2. Свердлов Л. М. Колебательные спектры многоатомных молекул / Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. – Москва : Наука, 1970. – 559 с.
3. Элькин М. Д. Математические модели в молекулярном моделировании / М. Д. Элькин, В. Ф. Пулин, А. Б. Осин // Вестник Саратовского гос. техн. ун-та. – 2010. – № 4 (49). – С. 36–39.
4. Элькин М. Д. Моделирование колебательных состояний s-тринитротриазина / М. Д. Элькин, В. В. Смирнов, Е. А. Джалмухамбетова, О. М. Алыкова, Л. С. Амантаева // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2012. – № 3 (19). – С. 120–127.
5. Элькин М. Д. Модельные расчеты колебательных состояний изомеров тринитротолуола / М. Д. Элькин, В. В. Смирнов, Е. А. Джалмухамбетова, О. М. Алыкова, Л. С. Амантаева // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2012. – № 1 (17). – С. 118–125.
6. Guadarrama-Perez Carlos. Theoretical infrared and terahertz spectra of RDX/aluminum complex / Carlos Guadarrama-Perez, J. M. Martinez, P. B. Balbuena // J. Phys. Chem. – 2010. – Vol. 114 (6). – P. 2284–2292.
7. Frisch M. J. Gaussian / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel et al. – Pittsburgh PA, 2003.
8. Infant-Castillo Ricardo. Monitoring the  $\alpha, \beta$  solid-solid phase transition of RDX with Raman spectroscopy: A theoretical and experimental study / Ricardo Infant-Castillo, Leonardo C. Pacheco-Londono, Samuel P. Hernandez-Rivera // J. Mol. Structure. – 2010. – Vol. 970. – P. 51–58.
9. Infant-Castillo Ricardo. Vibrational spectra and structure of RDX and its  $^{13}\text{C}$  and  $^{15}\text{N}$ -labeled derivatives: a theoretical and experimental study / Ricardo Infant-Castillo, Leonardo C. Pacheco-Londono // Spectrochim. Acta. – 2010 A. – Vol. 76, № 2. – P. 137–141.
10. Rice Betsy M. Ab initio and nonlocal density functional study of 1,3,5-trinitro-s-triazine(RDX) / Betsy M. Rice, Cary F. Chabalowski // J. Phys. Chem. A. – 1997. – Vol. 101. – P. 8720–8726.

11. Torrez Perla. Vibrational spectroscopy study of  $\alpha$  and  $\beta$  RDX deposits / Perla Torrez, L. Mercado, I. Cotle et al. // *J. Phys. Chem.* – 2004. – Vol. 108 (26). – P. 8799–8805.
12. Zheng X. High-pressure vibrational spectroscopy of hexahidro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine (RDX) / X. Zheng, J. Zheo, D. Tan et al. // *Properlants, Explosives, Pyrotechnics.* – 2011. – Vol. 36, № 1. – P. 22–27.

#### References

1. Krasnoshchekov S. V., Stepanov N. F. Masshtabiruyushchie mnozhiteli kak effektivnye parametry dlya korrektsii neempiricheskogo silovogo polya [Scaling multipliers as effective parameters for correction of ab initio force field]. *Zhurnal fizicheskoy khimii* [Journal of Physical Chemistry], 2007, vol. 81, no. 4, pp. 680–689.
2. Sverdlov L. M., Kovner M. A., Kraynov Ye. P. *Kolebatelnye spektry mnogoatomnykh molekul* [Vibrational spectra of polyatomic molecules]. Moscow, Nauka, 1970. 559 p.
3. Elkin M. D., Pulin V. F., Osin A. B. Matematicheskie modeli v molekulyarnom modelirovanii [Mathematical models in molecular modeling]. *Vestnik Saratovskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta* [Bulletin of Saratov State Technical University], 2010, no. 4 (49), pp. 36–39.
4. Elkin M. D., Smirnov V. V., Dzhalmukhambetova Ye. A., Alykova O. M., Amantaeva L. S. Modelirovanie kolebatelnykh sostoyaniy s-trinitrotriazina [Modeling of vibrational states of s-trinitrotriazine]. *Prikaspiyskiy zhurnal: upravlenie i vysokie tekhnologii* [Caspian Journal: Management and High Technologies], 2012, no. 3 (19), pp. 120–127.
5. Elkin M. D., Smirnov V. V., Dzhalmukhambetova Ye. A., Alykova O. M., Amantaeva L. S. Modelnye raschety kolebatelnykh sostoyaniy izomerov trinitrotoluola [Model calculations of vibrational states of trinitrotoluene isomers]. *Prikaspiyskiy zhurnal: upravlenie i vysokie tekhnologii* [Caspian Journal: Management and High Technologies], 2012, no. 1 (17), pp. 118–125.
6. Guadarrama-Perez Carlos, Martinez J. M., Balbuena P. B. Theoretical infrared and terahertz spectra of RDX/aluminum complex. *J. Phys. Chem.*, 2010, vol. 114 (6), pp. 2284–2292.
7. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al. *Gaussian, Inc.* Pittsburgh PA, 2003.
8. Infant-Castillo Ricardo, Pacheco-Londono Leonardo C., Hernandez-Rivera Samuel P. Monitoring the  $\alpha$ ,  $\beta$  solid-solid phase transition of RDX with Raman spectroscopy: A theoretical and experimental study. *J. Mol. Structure.* 2010, vol. 970, pp. 51–58.
9. Infant-Castillo Ricardo, Pacheco-Londono Leonardo C. Vibrational spectra and structure of RDX and its  $^{13}\text{C}$  and  $^{15}\text{N}$ -labeled derivatives: a theoretical and experimental study. *Spectrochim. Acta*, 2010 A, vol. 76, no. 2, pp. 137–141.
10. Rice Betsy M., Chabalowski Cary F. Ab initio and Nonlocal density functional study of 1,3,5-trinitro-s-triazine(RDX). *J. Phys. Chem. A.*, 1997, vol. 101, pp. 8720–8726.
11. Torrez Perla, Mercado L., Cotle I. et al. Vibrational spectroscopy study of  $\alpha$  and  $\beta$  RDX deposits. *J. Phys. Chem.*, 2004, vol. 108 (26), pp. 8799–8805.
12. Zheng X., Zheo J., Tan D. et al. High-pressure vibrational spectroscopy of hexahidro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine (RDX). *Properlants, Explosives, Pyrotechnics*, 2011, vol. 36, no. 1, pp. 22–27.

УДК 539.193/194;535/33.34

#### **МОДЕЛИРОВАНИЕ АДИАБАТИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ ТАУТОМЕРОВ И КОНФОРМЕРОВ МЕРКАПТОПУРИНА**

*Эрман Евгений Анатольевич*, кандидат технических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kof@aspu.ru