Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 11

ТВЕРЬ 2019

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2019. – Вып. 11. – 680 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2019

© Тверской государственной
университет, 2019

УДК 530.145

Оригинальная статья

СТЕРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В МОЛЕКУЛАХ ДИФТОРАЛКАНОВ

А.В. Котомкин^{1,2}, Н.П. Русакова¹, В.В. Туровцев², Ю.Д. Орлов¹

¹ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170100, Россия, Тверь, ул. Желябова, 33

²ФГБОУ ВО «Тверской государственный медицинский университет»

170100, Россия, Тверь, ул. Советская, 4

prospectpobedy@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.478

Аннотация: Найдено 15 равновесных конформаций молекулы $\text{CHF}_2 - (\text{CH}_2)_6 - \text{CH}_3$. В рамках «квантовой теории атомов в молекулах» рассчитаны равновесные геометрии, полные энергии и изучено их электронное строение. Анализ и сравнение электронных параметров позволили выявить в некоторых структурах стерическое воздействие от фторсодержащей группы CHF_2 .

Ключевые слова: стерический эффект, электроотрицательность, квантовая теория атомов в молекуле, электронная плотность, фторалканы.

1. Введение

Органические соединения фтора являются основой для получения материалов для медицины, термостойких покрытий, пластмасс, каучуков, негорючих смазочных и гидравлических жидкостей, хладагентов, средств пожаротушения. В то же время, экспериментальных данных по их термодинамическим и термохимическим свойствам недостаточно [1]. Для быстрой оценки термодинамических величин существующих и перспективных соединений широко используются аддитивные модели «строение-свойство», в которых свойства молекул M представляются как сумма вкладов отдельных атомов Ω или групп атомов R . Однако их построение и применение для фторорганических соединений осложнено высокой электроотрицательностью фтора [1-2]. Его влияние на ближайшие R приводит к отличию их вкладов в разных M – к их переносимости.

Определение границ переносимости возможно путем квантовомеханического исследования фторсодержащих молекул, сравнением распределения их электронной плотности $\rho(r)$ [3-5]. В этом случае критерием переносимости группы может служить идентичность распределения её электронной плотности $\rho_R(r)$ в разных M . Выделение границ $\rho(r)$ отдельных «топологических» атомов и состоящих из них R возможно с позиции топологии функции электронной плотности в трехмерном пространстве, на которой базируется «квантовая теория атомов в молекулах» (The quantum theory of atoms in molecules – QTAIM) [3]. Согласно ей, условием существования граничной поверхности является равенство нулю потока градиента электронной плотности. Наличие межатомных поверхностей позволяет выделить атом в молекуле, соотнести к нему электронную плотность и найти ее интегральные

характеристики – заряд $q(\Omega)$ и объем $V(\Omega)$. Значительное влияние на распределение $\rho(r)$ фторсодержащих соединений оказывают невалентные внутримолекулярные взаимодействия, такие, как индуктивный и стерический эффекты [6]. Под индуктивным эффектом (ИЭ) понимают способность электроотрицательного атома «стягивать» на себя $\rho(r)$. Стерический эффект проявляется в «деформировании» электронной плотности отдельных участков молекулы электронным бассейном заместителя. Проследить влияние фторсодержащей группы на окружение возможно через сравнение характеристик $\rho_R(r)$, таких как заряд $q(R)$ и объем $V(R)$.

2. Постановка цели

Ранее [7-9] в рамках QTAIM исследовалось электронное строение и ИЭ в углеводородах с различными заместителями, в том числе в гомологическом ряду для 1,1-дифторалканов [7]. В работе [7] было сделано предположение о наличии стерического эффекта (СЭ) фторов на четвертую группу CH_2 , однако детально он не рассматривался. Для такого исследования СЭ необходимо оценить влияние F на алкильную цепь в разных конформерах, что требует конформационного анализа [10] (поиска возможных равновесных геометрий и сравнения их электронного строения). Целью данной работы стало детальное изучение стерического воздействия фрагмента CHF_2 на углеводородную цепь на примере конформационных стереоизомеров дифтороктана $CHF_2-(CH_2)_6-CH_3$.

3. Результаты

Согласно [7] в ряду $CHF_2-(CH_2)_n-CH_3$ при $n \geq 6$ появляется невозмущенная группа CH_2 , следовательно, изучать СЭ CHF_2 можно на примере $CHF_2-(CH_2)_6-CH_3$, где влияния групп CHF_2 и CH_3 на алкильную цепь разделяются. В ходе конформационного поиска были построены потенциальные кривые внутреннего вращения вокруг каждой связи $C-C$. Расчет состояний проводился с помощью программы GAUSSIAN 03 [11] методом DFT с использованием гибридного функционала B3LYP в базисе 6-311++G(3df,3pd)6d10f путем минимизации полной энергии (E_{total}) и оптимизации геометрического строения с шагом двугранного угла $\Delta\phi = 10^\circ$. Использование данного метода для расчёта равновесных состояний соединений обосновано в работе [12]. Для полученных конформеров (см. рис. 1), соответствующих минимумам потенциальных кривых, было найдено равновесное строение, найдены полные энергии и вычислено распределение электронной плотности.

Рис. 1. Схема конформационных переходов молекулы 1,1-дифтороктана $\text{CHF}_2-(\text{CH}_2)_6-\text{CH}_3$. Приведены проекции Ньюмена изученных конформеров, их полные энергии, в а.е. (1 а.е. = 2625,5 кДж/моль)

Заряды $q(\Omega)$ и объемы $V(\Omega)$ «топологических» атомов (Ω) были рассчитаны в рамках QTAIM [3] численным интегрированием по атомным бассейнам в пределах межатомных поверхностей и изоповерхностей электронной плотности 0,001 а.е. с использованием программы AIMALL [13]. Атомные параметры были суммированы в параметры функциональных групп $R - q(R)$ и $V(R)$. Погрешность расчёта парциальных зарядов $q(R)$ составила не более 0,001 а.е. (1 а.е. заряда = $1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл), объемов $V(R)$ не более 0,01 Å³. Электронные параметры исследованных структур сведены в Таблицу 1. Электронное строение некоторых структур совпадает, поэтому значения для них объединены (см. рис. 1, №№ 2, 9, 10).

Конформационный поиск дал для $\text{CHF}_2-(\text{CH}_2)_6-\text{CH}_3$ пятнадцать равновесных состояний, схема конформационных переходов которых представлена на рис. 1. Для всех исследованных структур приведены соответствующие проекции Ньюмена и полные энергии (в а.е.).

Обозначение конформаций состоит из номера связи $C-C$, вокруг которой проводилось вращение (нумерация идет от ближайшей к фтору связи $C-C$) и типа конформации (транс – tr , гош⁺ – g^+ , гош[−] – g^-). Так, например, обозначение $1g^-2g^+$ говорит о том, что относительно первой от фтора связи $C-C$ структура является гош[−] – конформером, а относительно второй – гош⁺. Всем приведенным на рис. 1 конформациям присвоены номера, используемые для обозначения их в Таблицах 1 и 2.

Вращение волчка $CHF_2-(C)$ показало, что помимо исходной транс-конформации № 1 (см. Таблицу 1) возможны зеркальные гош-структуры ($1g^+$ и $1g^-$, рис. 1 (конформер № 2, см. Таблицу 1) с полной электронной энергией, на 0,001 а.е. меньшей, чем у № 1. Для последующих внутренних вращений вокруг связей $C-C$ выбран конформер $1g^-$ (конформационный поиск $1g^+$ так же дает двенадцать равновесных состояний, которые не отражены в данной работе). Далее было проведено вращение из структуры $1g^-2g^+$ (структура № 3, Таблица 1), что показало наличие конформеров $1g^-2g^+3g^-$ и $1g^-2g^+3g^+$ (конформации № 11 и 12, см. Таблицу 1). Их энергия выше, чем у № 2 на 0,003 а.е. и 0,005 а.е. соответственно, что несколько снижает их концентрацию в веществе. Проведение дальнейших вращений признано нецелесообразным, поскольку приводит к сильным пространственным влияниям участков алкильной цепи друг на друга в получаемых конформерах.

Группы CH_2 в Таблицах 1 и 2 пронумерованы в порядке удаления от CHF_2 : 1CH_2 – ближайшая к CHF_2 , 6CH_2 – наиболее удаленная. Распределение электронной плотности начальной структуры ($1tr$), показывает понижение $V(^4CH_2)$ относительно $V(^3CH_2)$ и $V(^5CH_2)$ (см. Таблицу 1). Объем 2CH_2 так же снижен относительно 3CH_2 и 1CH_2 . В то же время $q(^4CH_2)$ больше, чем заряды соседних с ними групп CH_2 (см. Таблицу 2, № 1). Подобный эффект объясняется тем, что оба атома F в № 1 расположены вне плоскости углеродной цепи и оказывают непосредственное парное влияние на 2CH_2 и 4CH_2 (см. рис. 2).

Рис. 2. Конформер $1tr$ молекулы $CHF_2-(CH_2)_6-CH_3$.

Из Таблицы 1 видно, что изменение конформаций приводит к увеличению объема фтора, находящегося в плоскости алкильной цепи $V(F^1)$, то время как заряды изменяются в пределах расчетной погрешности ($q(F) = -0,660$ а.е.). Таким образом, $\rho(r)$ в бассейнах F^1 немного разрежена по сравнению с F^2 , и это является следствием стерического влияния на атомы фторов со стороны углеводородной цепи. Изменение расположения атомов фтора в № 2 (см. рис. 1) приводит к отсутствию такого явного влияния на объемы 2CH_2 , 3CH_2 и 4CH_2 (см. Таблицу 1, № 2). В данной конфигурации один из атомов фтора расположен в плоскости цепи, а один – вне её и воздействие F^2 на алкильную цепь выравняется за счёт F^1 . Это выражается в изменении объемов и зарядов групп CH_2 : $V(CH_2)$ возрастает с удалением от CHF_2 (см. Таблицу 1, № 2), а $q(CH_2)$ уменьшаются от $q({}^1CH_2)$ к $q({}^5CH_2)$ (см. Таблицу 2, № 2). Таким образом, изменение конформации приводит к деформации электронной плотности и подтверждает предположение о стерическом эффекте, который следует приписать воздействию атомов фтора. По сравнению с № 2, СЭ в № 1 выражается более интенсивно и накладывается на индуктивный эффект в 2CH_2 , что приводит к несовпадению в изменениях её объема и заряда (см. Таблицы 1, 2, № 1).

Таблица 1. Объемы групп $V(R)$ конформеров, в $\text{\AA}^3$

№	CH_3	6CH_2	5CH_2	4CH_2	3CH_2	2CH_2	1CH_2	CH	CHF_2	F^1	F^2
1	33,05	23,61	23,49	23,39	23,44	22,61	22,91	12,20	44,28	16,04	16,04
2	33,05	23,62	23,48	23,43	23,39	23,06	22,71	12,20	44,41	16,16	16,06
3	33,05	23,62	23,49	23,40	23,25	22,96	22,72	12,00	44,20	16,15	16,05
4	33,04	23,64	23,46	23,48	22,72	23,33	22,69	12,19	44,21	16,15	15,87
5	33,04	23,63	23,44	23,22	23,35	23,05	22,46	12,21	44,41	16,16	16,04
6	33,05	23,61	23,47	23,19	23,38	23,07	22,48	12,19	44,41	16,16	16,06
7	33,04	23,62	23,21	23,44	23,39	22,80	22,71	12,20	44,42	16,16	16,05
8	33,05	23,59	23,24	23,42	23,40	22,80	22,70	12,21	44,42	16,16	16,06
9	33,02	23,39	23,47	23,44	23,15	23,05	22,72	12,20	44,42	16,16	16,05
10	32,80	23,62	23,48	23,18	23,38	23,05	22,72	12,21	44,42	16,16	16,06
11	33,03	23,62	23,45	23,23	23,15	22,98	22,43	12,02	44,20	16,15	16,04
12	33,03	23,61	23,42	23,03	23,32	22,94	22,61	11,82	43,99	16,15	16,03

Вращение вокруг второй от F связи $C-C$ так же отражается на электронных параметрах групп. Наиболее ярко это проявляется в $1g^-2g^-$ (см. рис. 1, № 4 и рис. 3) в виде значительного снижения $V({}^3CH_2)$ по сравнению с $V({}^2CH_2)$ (см. Таблицу 1, состояние № 4). Заряд групп 3CH_2 при этом выше $q({}^2CH_2)$ и $q({}^4CH_2)$ (см. Таблицу 2). Группа CHF_2 в № 4 так

же оказывает стерическое влияние на параметры $q(^5CH_2)$ и $V(^5CH_2)$ (структура № 4 в Таблицах 1 и 2), несколько отклоняя их от стандартных значений $q(CH_2)_{cm} = 0,000$ а.е. и $V(CH_2)_{st} = 23,48 \left(\text{\AA}^3 \right)$. Тогда как в $1g^-2g^+$ в изменении $V(CH_2)$ СЭ не наблюдается (см. Таблицу 1, № 3), однако в численном выражении деформации $q(^4CH_2)$ и $V(^4CH_2)$ аналогичны № 1 (конформеры № 1 и № 3 в Таблицах 1 и 2).

Рис. 3. Конформер $1g^-2g^-$ молекулы $CHF_2-(CH_2)_6-CH_3$.

Таблица 2. Заряды групп $q(R)$ конформеров, в а.е.

№	CH_3	6CH_2	5CH_2	4CH_2	3CH_2	2CH_2	1CH_2	CHF_2
1	-0,013	0,018	0,002	0,008	0,005	0,058	0,071	-0,145
2	-0,012	0,017	0,003	0,006	0,012	0,033	0,086	-0,145
3	-0,011	0,018	0,003	0,008	-0,001	0,044	0,087	-0,148
4	-0,012	0,015	0,006	-0,002	0,033	0,020	0,089	-0,149
5	-0,011	0,016	0,005	-0,002	0,019	0,034	0,085	-0,147
6	-0,012	0,018	0,003	0,003	0,014	0,034	0,085	-0,145
7	-0,011	0,016	0,002	0,007	0,013	0,031	0,086	-0,145
8	-0,012	0,018	-0,002	0,010	0,013	0,031	0,086	-0,146
9	-0,011	0,013	0,007	0,008	0,010	0,032	0,086	-0,145
10	-0,015	0,020	0,005	0,005	0,012	0,032	0,086	-0,145
11	-0,010	0,017	0,005	-0,003	0,009	0,045	0,087	-0,149
12	-0,010	0,017	0,006	-0,008	0,013	0,045	0,085	-0,148

Сравнение объемов групп CH_2 для остальных конформеров (см. Таблицу 1) показало наличие стерического эффекта на 4CH_2 в стереоизомерах №№ 5,6,10,11,12; на 5CH_2 в №№ 7, 8 и 9 (см. рис. 1). В случае № 9 $V(^5CH_2)$ обладает стандартным значением (см. Таблицу 1, № 9), а её $q(^5CH_2)$ значительно выше (см. Таблицу 2, структура № 9), что говорит о деформации электронной плотности (разрежении). Электронная плотность 4CH_2 (параметры V и q) в №№ 5, 6, 10, 11 и 12 претерпевает

обратное деформирование – уплотняется. Это выражается в малом объеме 4CH_2 и низкой величине заряда, как по отношению к стандартному значению $V(CH_2)$, так и по отношению $V({}^4CH_2)$ к $q({}^4CH_2)$. В остальных полученных равновесных конформациях подобный эффект не был обнаружен, поэтому выделить стерическое воздействие в них сравнением $V(CH_2)$ и $q(CH_2)$ невозможно.

4. Выводы

Осуществлен поиск возможных конформеров молекулы дифтороктана $CHF_2-(CH_2)_6-CH_3$, рассмотрены 15 равновесных структур. Проведено сравнение найденного электронного строения оптимизированных состояний и рассмотрены его особенности. Рассмотрены особенности стерического эффекта атомов фтора на алкильную цепь в молекулах 1,1-дифторалканов. Наиболее отчетливо он выражен в структуре *1tr*, где оба фтора расположены вне плоскости углеводородной цепи. Чуть менее отчетлив, но очевиден СЭ в конформерах $1g^-2g^-$, $1g^-3g^-$, $1g^-3g^+$, $1g^-4g^-$, $1g^-4g^+$, $1g^-5g^-$, $1g^-5g^+$, $1g^-6g^-$, $1g^-6g^+$, $1g^-2g^+3g^+$ и $1g^-2g^+3g^-$. Величина полной электронной энергии при этом от структуры к структуре изменяется в пределах расчетной погрешности.

Работа выполнена в рамках государственного задания (проект № 4.6469.2017/8.9).

Библиографический список:

1. Орлов, Ю.Д. Термохимия органических свободных радикалов / Ю.Д. Орлов, Ю.А. Лебедев, И.Ш. Сайфулин. – М.: Наука, 2001. – 304 с.
2. Колесов, В.П. Термохимия галогензамещенных этана / В.П. Колесов, Т.С. Папина // Успехи химии. – 1983. – Т. 52. – Вып. 5. – С. 754-776.
3. Бейдер, Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория / Р. Бейдер. – М.: Мир, 2001. – 532 с.
4. Mezey, P.G. Quantum chemical shape: new density domain relations for the topology of molecular bodies, functional groups, and chemical bonding / P.G. Mezey // Canadian Journal of Chemistry. – 1994. – V. 72. – №. 3. – P. 928-935.
5. Mezey, P.G. Holographic electron density shape theorem and its role in drug design and toxicological risk assessment / P.G. Mezey // Journal of Chemical Information and Modeling. – 1999. – V. 39. – I. 2. – P. 224-230.
6. Верещагин, А.Н. Индуктивный эффект / А.Н. Верещагин. – М.: Наука. 1987. – 326 с.
7. Котомкин, А.В. Электронные параметры молекул ряда 1,1-дифторалканов / А.В. Котомкин, Н.П. Русакова, В.В. Туровцев, Ю.Д. Орлов // Вестник Казанского технологического университета. – 2015. – Т. 18. – № 13. – С. 23-25.
8. Русакова, Н.П. Сравнительный анализ электронного строения и электроотрицательности групп неразветвленных простых эфиров сульфоксиловой кислоты / Н.П. Русакова, В.В. Туровцев, Ю.Д. Орлов // Журнал структурной химии.

– 2015. – Т. 56. – № 1. – С. 29-33.

9. **Quinonez, P.B.** AIM study on the influence of fluorine atoms on the alkyl chain / P.B. Quinonez, A. Vila, A.M. Grana, R.A. Mosquera // *Chemical Physics*. – 2003. – V. 287. – I. 1-2. – P. 227-236.

10. **Дашевский, В.Г.** Конформационный анализ органических молекул / В.Г. Дашевский, – М.: Химия, 1982. – 272 с.

11. **Frisch, M.J.** Gaussian 03 (Revision E 0.1 SMP) / M.J. Frisch, G.W. Canceucks, H.B. Schlegel, et al. – Pittsburgh PA: Gaussian Inc., 2007.

12. **Туровцев, В.В.** Сравнение стандартных функционалов расчета свойств молекул на вариационном пределе / В.В. Туровцев, Ю.Д. Орлов, И.А. Каплунов // *Журнал структурной химии*. – 2018. – Т. 59. – №. 8. – С. 2021-2027.

13. **Keith, T.A.** AIMAll (Version 11.09.18, Professional). – Режим доступа: [www.url: http://aim.tkgristmill.com](http://aim.tkgristmill.com). – 11.09.2018.

References:

1. **Orlov, Yu.D.** Thermochemistry of organic free radicals / Yu.D. Orlov, Yu.A. Lebedev, I.Sh. Sajfulin. – М.: Nauka, 2001. – 304 p. (In Russian).

2. **Kolesov, V.P.** Thermochemistry of haloethanes / V.P. Kolesov, T.S. Papina // *Russian Chemical Reviews*. – 1983. – V. 52. – I. 5. – P. 425-429.

3. **Bejder, R.** Atoms in molecules: Quantum theory / R. Bejder. – М.: Mir, 2001. – 532 p. (In Russian).

4. **Mezey, P.G.** Quantum chemical shape: new density domain relations for the topology of molecular bodies, functional groups, and chemical bonding / P.G. Mezey // *Canadian Journal of Chemistry*. – 1994. – V. 72. – №. 3. – P. 928-935.

5. **Mezey, P.G.** Holographic electron density shape theorem and its role in drug design and toxicological risk assessment / P.G. Mezey // *Journal of Chemical Information and Modeling*. – 1999. – V. 39. – I. 2. – P. 224-230.

6. **Vereshchagin, A.N.** Inductive effect / A.N. Vereshchagin. – М.: Nauka. 1987. – 326 p. (In Russian).

7. **Kotomkin, A.V.** Electronic parameters of molecules of a number of 1,1 difluoroalkanes / A.V. Kotomkin, N.P. Rusakova, V.V. Turovtsev, Yu.D. Orlov // *Vestnik Kazanskogo tekhnologicheskogo universiteta*. – 2015. – V. 18. – № 13. – P. 23-25. (In Russian).

8. **Rusakova, N.P.** Comparative analysis of the electronic structure and electronegativity of groups of unbranched ethers of sulfoxylate acid / N.P. Rusakova, V.V. Turovtsev, Y.D. Orlov // *Journal of Structural Chemistry*. – 2015. – V. 56. – I. 1. P. 22-26.

9. **Quinonez, P.B.** AIM study on the influence of fluorine atoms on the alkyl chain / P.B. Quinonez, A. Vila, A.M. Grana, R.A. Mosquera // *Chemical Physics*. – 2003. – V. 287. – I. 1-2. – P. 227-236.

10. **Dashevskij, V.G.** Conformational analysis of organic molecules / V.G. Dashevskij, – М.: Khimiya, 1982. – 272 p. (In Russian).

11. **Frisch, M.J.** Gaussian 03 (Revision E 0.1 SMP) / M.J. Frisch, G.W. Canceucks, H.B. Schlegel, et al. – Pittsburgh PA: Gaussian Inc., 2007.

12. **Turovtsev, V.V.** Comparison of standard functionals to calculate the properties of molecules at the variational limit / V.V. Turovtsev, Yu.D. Orlov, I.A. Kaplunov // *Journal of Structural Chemistry*. – 2018. – V. 59. – I. 8. – P. 1960-1966

13. **Keith, T.A.** AIMAll (Version 11.09.18, Professional). – Access mode: [www.url: http://aim.tkgristmill.com](http://aim.tkgristmill.com). – 11.09.2018.

STERIC EFFECT IN DIFLUORINEALCANE MOLECULES

A.V. Kotomkin^{1,2}, N.P. Rusakova¹, V.V. Turovtsev^{1,2}, Yu.D. Orlov¹

¹Tver State University, Tver, Russia

²Tver State Medical University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.478

Abstract: Fifteen conformers of the $\text{CHF}_2-(\text{CH}_2)_6-\text{CH}_3$ molecule were found. Within a «quantum theory of atoms in molecules», their equilibrium geometry, total energies and the electron structure were studied. Analysis and comparison of electron parameters revealed in some structures a steric effect from CHF_2 .

Keywords: steric effect, electronegativity, quantum theory of atoms in molecules, electron charge density, fluorinealkanes.

Котомкин Алексей Викторович – ассистент кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», ассистент кафедры физики, математики и медицинской информатики ФГБОУ ВО «Тверской государственный медицинский университет Росздрава РФ»

Русакова Наталья Петровна – к.х.н., доцент кафедры физической химии ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Туровцев Владимир Владимирович – д.ф.-м.н., доцент, заведующий кафедрой физики, математики и медицинской информатики ФГБОУ ВО «Тверской государственный медицинский университет Росздрава РФ»

Орлов Юрий Димитриевич – д.х.н., профессор, заведующий кафедрой общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Alexei V. Kotomkin – Assistant of the General Physics Department, Tver State University, Assistant of the Department of Physics, Mathematics and Medical Informatics, Tver State Medical University

Natalya P. Rusakova – Ph. D., Docent of the General Physics Department, Tver State University

Vladimir V. Turovtsev – Dr. Sc., Docent, Head of the Department of Physics, Mathematics and Medical Informatics, Tver State Medical University

Yury D. Orlov – Dr. Sc., Full Professor, Head of the General Physics Department, Tver State University

Поступила в редакцию/received: 15.09.2019; после рецензирования/revised: 15.10.2019; принята/accepted 09.11.2019.