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**

выпуск 12

ТВЕРЬ 2020

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 журнале «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, 2020. – Вып. 12. – 908 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС77-47789 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. Журнал 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, 2020

© Тверской государственный университет, 2020

ЭЛЕКТРОННЫЕ ПАРАМЕТРЫ СТРУКТУРНЫХ ИЗОМЕРОВ k, k – ДИФТОРОКТАНА

А.В. Котомкин^{1,2}, Н.П. Русакова¹, В.В. Туровцев^{1,2}, 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/2020.12.438

Аннотация: Проведено исследование электронного строения 6,6–дифторундекана ($6,6-F_2C_{11}H_{22}$) и структурных изомеров k, k –дифтороктана ($k, k-F_2C_8H_{16}$, где $1 \leq k \leq 8$, k – положение фторов в углеводородной цепи). В рамках «квантовой теории атомов в молекулах» найдены переносимые или «стандартные» электронные параметры топологических атомов и атомных групп (заряд, объем и энергия). Оценена дальность индуктивного воздействия атомов фтора и фторсодержащих фрагментов (CHF_2 и CF_2) на ближайшее окружение. Установлено, что влияние CHF_2 распространяется на четыре CH_2 , а CF_2 на две CH_2 группы в обе стороны по алкильной цепи. Получены данные по изменениям электронных параметров в зависимости от удаления от атома фтора. Составлен ряд групповых электроотрицательностей, согласно которому CF_2 является более сильным акцептором электронной плотности, чем CHF_2 .

Ключевые слова: индуктивный эффект, электроотрицательность, квантовая теория атомов в молекуле, электронная плотность, дифторалканы.

1. Введение

Исследование взаимосвязи «строение-свойство» (Quantitative Structure – Property Relationship – QSPR) является одним из важнейших инструментов прогнозирования свойств и параметров химических соединений. При этом значительное число моделей QSPR основано на принципе аддитивности, согласно которому экстенсивное свойство молекулы как целого (или вещества) складывается из парциальных долей (вкладов) отдельных фрагментов. Фторсодержащие соединения относятся к веществам, к которым плохо применим принцип аддитивности, что связано с существенным индуктивным влиянием [1] электроотрицательных атомов фтора на распределение электронной плотности молекул $\rho(r)$. Вследствие этого, при расчетах свойств данных соединений аддитивными методами приходится вводить дополнительные поправки, учитывающие отклонение от аддитивности [2-4]. Более точные закономерности «строение-свойство», построение которых возможно на основе «квантовой теории атомов в молекуле» (The quantum theory of atoms in molecules – QTAIM) [5-7], должны автоматически включать внутримолекулярные взаимодействия.

2. Постановка задачи

Электронное строение фторсодержащих соединений исследовалось неоднократно. Ранее нами в рамках QTAIM был проведен анализ $\rho(r)$ и построены шкалы электроотрицательности групп и фрагментов для фторалканов с концевым положением F – заместителей [8-10], в частности в [9] было установлено, что концевые атомы фтора в 1,1-дифторалканах оказывают индуктивное влияние на четыре идущих подряд CH_2 группы. Электронные параметры 1,1-дифторалканов (в т.ч. заряд энергия, объем и др.) так же были найдены в [11] с помощью расчета $\rho(r)$ методом Хартри-Фока в базисах 6-31++G** и 6-31G*. Однако, исследование влияния CF_2 в положениях, отличных от концевого ранее проведено не было. Некоторые аспекты применения соединений, содержащих фрагменты CF_2 внутри углеводородной цепи описаны в работе [12]. В данной публикации также рассматриваются энергетически наиболее выгодные конформеры. Однако, исследование электронного строения дифторалканов и влияния на него CF_2 в положениях, отличных от концевого, ранее не проводилось.

Целью данной работы является изучение электронного строения 6,6-дифторундекана ($6,6-F_2C_{11}H_{22}$) и структурных изомеров k,k -дифтороктана ($k,k-F_2C_8H_{16}$, где $1 \leq k \leq 8$, k – положение фторов в углеводородной цепи) и оценка индуктивного эффекта двух атомов фтора (и в целом группы CF_2). Выбор изучаемых соединений обусловлен необходимостью сравнения влияния на углеводородную цепь концевой группы CF_2 и аналогичной группы, расположенной внутри данной цепи.

3. Результаты

Оптимальная геометрия и распределение $\rho(r)$ молекулы 6,6-дифторундекана ($6,6-F_2C_{11}H_{22}$) и молекул k,k -дифтороктанов вида $k,k-F_2C_8H_{16}$, $1 \leq k \leq 8$, где k – положение фторов в углеводородном скелете, были рассчитаны в GAUSSIAN 03 [13] методом B3LYP с базисом 6-311++G(3df,3pd) 6d10f. Заряд q , энергия E и объем V «топологических» атомов Ω были вычислены в рамках QTAIM [5] с использованием AIMALL [14] и суммированы в соответствующие групповые параметры $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$, где $R=CH_2, CH_3, CHF_2, CF_2$ (см. Таблицы 1-5). Погрешность расчёта: $q(R) - \leq 0,001$ а.е., $E(R) - \leq 10$ кДж/моль, $V(R) - \leq 0,1 \text{ \AA}^3$. В 6,6-дифторундекане группы, удаленные на одно и то же число связей от центральной CF_2 , имеют в силу симметрии одинаковые свойства, поэтому в Таблице 4 указаны параметры фрагментов только одной из частей молекулы.

Таблица 1. Заряды групп $q(R)$ в молекулах $k, k - F_2C_8H_{16}$, где $1 \leq k \leq 4$, в а.е. Жирным шрифтом выделены значения $q(R)$ для содержащих фтор групп CHF_2 и CF_2 .

k	n							
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-0,145	0,071	0,058	0,005	0,008	0,002	0,018	-0,013
2	0,109	-0,243	0,062	0,059	0,000	0,008	0,015	-0,012
3	0,053	0,075	-0,259	0,061	0,058	0,002	0,023	-0,012
4	-0,005	0,074	0,061	-0,259	0,060	0,058	0,016	-0,005

Таблица 2. Заряды групп $\Delta E(R)$ в молекулах $k, k - F_2C_8H_{16}$, где $1 \leq k \leq 4$, в кДж/моль. Жирным шрифтом выделены значения $\Delta E(R)$ для содержащих фтор групп CHF_2 и CF_2 .

k	n							
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	80	-20	40	0	0	0	40	0
2	-10	40	-50	40	0	0	40	0
3	50	-10	0	-50	40	0	40	0
4	10	80	-50	0	-50	40	40	0

Таблица 3. Заряды групп $V(R)$ в молекулах $k, k - F_2C_8H_{16}$, где $1 \leq k \leq 4$, в $\text{\AA}^3$. Жирным шрифтом выделены значения $V(R)$ для содержащих фтор групп CHF_2 и CF_2 .

k	n							
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	44,3	22,9	22,6	23,4	23,4	23,5	23,6	33,1
2	31,6	36,1	22,7	22,5	23,5	23,4	23,6	33,0
3	32,0	22,8	35,7	22,7	22,5	23,5	23,5	33,1
4	32,9	22,7	22,7	35,7	22,7	22,6	23,6	33,0

Таблица 4. Электронные параметры групп в молекуле $6, 6 - F_2C_{11}H_{22}$.

Параметры	CH_3	CH_2	CH_2	CH_2	CH_2	CF_2
q , а.е.	-0,012	0,022	0,002	0,058	0,060	-0,259
ΔE , кДж/моль	0	40	0	40	-50	0
V , $\text{\AA}^3$	33,1	23,6	23,5	22,5	22,7	35,7

Значение полной электронной энергии соединения и его фрагментов $E(R)$ зависит от использованных в квантовохимическом расчете метода и базисного набора, в связи с этим в Таблицах 2 и 4 представлена относительная энергия $\Delta E(R)$. Её величина есть разность между полной электронной энергией группы в данном соединении и полной электронной энергией $E(R)$ соответствующей переносимой или «стандартной» группы (обычно эта энергия определяется из расчетов для наибольшего гомолога). Внутримолекулярные взаимодействия приводят к стабилизации / дестабилизации групп [5], результат взаимодействия (стабилизация / дестабилизация) определяется знаком $\Delta E(R)$ [5].

Энергии переносимых («стандартных») групп в данных соединениях составляют: $E(CH_3) = -104730$ кДж/моль, $E(CH_2) = -103150$ кДж/моль, $E(CHF_2) = -627070$ кДж/моль (из [9]), $E(CF_2) = -625440$ кДж/моль. (Округление до 10 кДж/моль связано с погрешностью вириального отношения). Значительное отклонение $\Delta E(CH_2)$ от нуля (см. Таблицы 2 и 4) является результатом возмущений, вызванных атомами фтора и группой CH_3 .

Индуктивное воздействие фторов в 1,1-дифторалканах (в концевом положении) распространяется на четыре ближайшие группы CH_2 (см. Таблицу 1 и [9]). При этом, первые две группы испытывают сильное влияние, а следующие две слабое и им можно пренебречь. Дальность распространения индуктивных эффектов фтора требуется учитывать при составлении аддитивных расчетных схем.

Электронные характеристики $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$ изомеров $k,k-F_2C_8H_{16}$ приведены в Таблицах 1-3. Индексом n в данных таблицах отмечено положение группы CF_2 вдоль цепи молекулы $k,k-F_2C_8H_{16}$ при отсчете от одного из концевых углеродов. Заряд CF_2 отклоняется от «стандартного» значения только при $k=2$, в остальных изомерах его величина остается неизменной или «стандартной» $q(CF_2) = -0,259$ а.е. (см. Таблицу 1), при этом заряд атомов фтора в этой группе меняется незначительно, от $q(F) = -0,660$ а.е. в 1,1- $F_2C_8H_{16}$ до $q(F) = 0,663$ а.е. при $k=4$ и для 6,6- $F_2C_{11}H_{22}$. Сравнение зарядов групп позволило составить качественную шкалу их электроотрицательностей в виде:

$$\chi(CH_2) < \chi(CH_3) < \chi(CHF_2) < \chi(CF_2).$$

Индуктивный эффект согласно данным, представленным Таблицами 1 и 4, проявляется в том, что электронная плотность углеводородных заместителей смещается к группе CF_2 , приводя к увеличению зарядов соседних с CF_2 метиленов (положительные значения), при этом ближайшая к фторам группа CH_2 стабилизируется, а следующая дестабилизируется. Знаки их относительных энергий противоположны, а $\Delta E(R)$ близки по модулю (см. Таблицу 2). При этом значения $q(CH_2)$ для них близки по величине. Объем «стандартной» группы CH_2 равен $23,5 \text{ \AA}^3$. «Перетекание» электронной плотности с CH_2 на CH_3 выражается в увеличении заряда CH_2 , но при этом группа CH_2 немного «разбухает» – объем CH_2 , смежной с CH_3 и не подверженной воздействию фторов, увеличивается на $0,1 \text{ \AA}^3$ (данная величина близка к расчётной погрешности).

Индуктивное влияние фторсодержащего фрагмента несколько иное.

Величины объема первого и второго от CF_2 метиленов меньше, чем у невозбужденных CH_2 на 0,8 и 1,0 Å³ соответственно. Из этого следует, что «значительное» индуктивном воздействии CF_2 распространяется на две соседние группы CH_2 . При этом, объем более удаленной CH_2 уменьшается чуть сильнее и она, как указано выше, дестабилизируется. Возможно, часть ее электронной плотности оказывается в бассейне первого от фторов метилена, что и приводит к его стабилизации, хотя, судя по величинам зарядов, обе группы теряют значительную часть электронной плотности.

Размещение фрагмента CF_2 в центре самой длинной углеводородной цепи (в $6,6-F_2C_{11}H_{22}$) позволило выделить «стандартные» группы CF_2 и CH_2 (см. Таблицу 5) и определить дальность влияния фторсодержащего фрагмента (см. Таблицу 4). Сравнения $q(CH_2)$ показывают (см. данные Таблиц 1 и 4), что третья от CF_2 группа CH_2 является невозмущенной (ее заряд равен 0,002 а.е., что близко к погрешности расчета). Таким образом, фторы, располагаясь внутри углеводородного скелета, оказывают влияние на две CH_2 в каждую сторону.

Анализ полученных данных для $k, k-F_2C_8H_{16}$, $3 \leq k \leq 5$ и $6,6-F_2C_{11}H_{22}$ позволил определить переносимые группы. Их величины $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$ представлены в Таблице 5. (как правило, энергия $E(R)$ «переносима» только внутри гомологического ряда).

Таблица 5. Параметры переносимых групп в молекулах $k, k-F_2C_8H_{16}$, $3 \leq k \leq 5$ и $6,6-F_2C_{11}H_{22}$.

Параметры	CH_3	CH_2	CF_2	F
q , а.е.	-0,013	0,001	-0,259	-0,663
$-E$, кДж/моль	104730	103150	625440	263690
V , Å ³	33,1	23,5	35,7	15,6

4. Выводы

В работе исследовано электронное строение молекул $k, k-F_2C_8H_{16}$, $1 \leq k \leq 8$ и $6,6-F_2C_{11}H_{22}$. Найдены групповые переносимые («стандартные») электронные параметры для CH_2 , CH_3 , CF_2 и F , на основании которых проведено рассмотрение индуктивного эффекта в рассматриваемых соединениях. Показано, что фрагмент CF_2 в не концевом положении оказывает влияние на два метилена по обе стороны вдоль углеводородной цепи (в противном случае электроноакцепторное воздействие CHF_2 , затрагивает четыре ближайших CH_2). Таким образом, подтверждено

воздействию CF_2 четыре CH_2 , как и у CH_2F [10], однако влияние CF_2 на электронное строение соседних групп более интенсивное. Построена общая для всех изученных структур качественная шкала групповых электроотрицательностей $\chi(R)$: $\chi(CH_2) < \chi(CH_3) < \chi(CHF_2) < \chi(CF_2)$.

Полученные результаты должны учитываться при построении аддитивных схем в корреляционных моделях «строение-свойство», используемых для оценки термодинамических и термохимических свойств соединений, содержащих группы CH_2 , CH_3 , CF_2 и F .

Библиографический список:

1. **Верещагин, А.Н.** Индуктивный эффект / А.Н. Верещагин. – М.: Наука. 1987. – 326 с.
2. **Колесов, В.П.** Термохимия галогензамещенных этана / В.П. Колесов, Т.С. Папина // Успехи химии. – 1983. – Т. 52. – Вып. 5. – С. 754-776. DOI: 10.1070/RC1983v052n05ABEH002829.
3. **Орлов, Ю.Д.** Расчет энтальпий образования свободных радикалов и энергий диссоциации химических связей по методу групповых вкладов. Сообщение 3. Соединения с электроотрицательными заместителями. / Ю.Д. Орлов, Ю.А. Лебедев, Б.Л. Корсунский // Известия Академии наук СССР. Серия химическая. – 1984. – № 7. – С. 1550-1555.
4. **Орлов, Ю.Д.** Определение энтальпий образования органических свободных радикалов по энергиям диссоциации связей. Сообщение 2. Галогензамещенные радикалы / Ю.Д. Орлов, Р.Х. Зарипов, Ю.А. Лебедев // Известия Академии наук. Серия химическая. – 1998. – № 4. – С. 643-646.
5. **Бейдер, Р.** Атомы в молекулах: Квантовая теория / Р. Бейдер. – М.: Мир, 2001. – 532 с.
6. **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. DOI: 10.1139/v94-120.
7. **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. DOI: 10.1021/ci980072y.
8. **Котомкин, А.В.** Электронные параметры 1,1,1-трифторалканов / А.В. Котомкин, Н.П. Русакова, В.В. Туровцев, Ю.Д. Орлов // Известия высших учебных заведений. Серия «Химия и химическая технология». – 2019. – Т. 62. – № 1. – С. 31-37. DOI: 10.6060/ivkkt201962fp.5517.
9. **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.
10. **Котомкин, А.В.** Стерический эффект в молекулах дифторалканов / А.В. Котомкин, Н.П. Русакова, В.В. Туровцев и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2019. – Вып. 11. – С. 478-486. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.478
11. **Quiñónez, P.B.** AIM study on the influence of fluorine atoms on the alkyl chain / P.B. Quiñónez, A. Vila, A.M. Graña, R.A. Mosquera // Chemical Physics. – 2003. – V. 287. – I. 1-2. – P. 227-236. DOI: 10.1016/S0301-0104(02)00993-X.

12. **Gillis, E.P.** Applications of fluorine in medicinal chemistry / E.P. Gillis, K.J. Eastman, M.D. Hill, D.J. Donnelly, N.A. Meanwell // *Journal of Medicinal Chemistry*. – 2015. – V. 58. – I. 21. – P. 8315-8359. DOI: 10.1021/acs.jmedchem.5b00258.
13. **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.
14. **Keith, T.A.** AIMAll (Version 11.09.18, Professional). – Режим доступа: www.url: http://aim.tkgristmill.com. – 1.08.2020.

References:

1. **Vereshchagin, A.N.** Induktivnyi ehffekt [Inductive effect] / A.N. Vereshchagin. – M.: Nauka. 1987. – 326 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. DOI: 10.1070/RC1983v052n05ABEH002829.
3. **Orlov, Yu.D.** Calculation of the enthalpies of formation of free radicals and the energies of dissociation of chemical bonds by the group contribution method. Communication 3. Compounds with electronegative substituents / Yu.D. Orlov, Yu.A. Lebedev, B.L. Korsunskii // *Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR, Division of chemical science*. – 1984. – V. 33. – I. 7. – P. 1424–1428. DOI: 10.1007/BF00956518.
4. **Orlov, Yu.D.** Determination of enthalpies of formation of organic free radicals from bond dissociation energies 2. Halosubstituted radicals / Yu.D. Orlov, R.Kh. Zaripov, Yu.A. Lebedev // *Russian Chemical Bulletin*. – 1998, – V. 47. – I. 4. – P. 621–624. DOI: 10.1007/BF02495965.
5. **Bader, R.F.W.** Atoms in Molecules: A Quantum Theory / R.F.W. Bader // In: *International series of monographs on chemistry*. V. 22). – Oxford: Clarendon Press, 1990. – 438 p.
6. **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. DOI: 10.1139/v94-120.
7. **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. DOI: 10.1021/ci980072y.
8. **Kotomkin, A.V.** Ehlektronnye parametry 1,1,1–trifloralkanov [Electronic parameters of 1,1,1–trifluoroalkanes] / A.V. Kotomkin, N.P. Rusakova, V.V. Turovtsev, Yu.D. Orlov // «*Khimiya i Khimicheskaya Tekhnologiya*» *Russian Journal of Chemistry and Chemical technology*. – 2019. – V. 62. – № 1. – P. 31-37. DOI: 10.6060/ivkkt201962fp.5517. (In Russian).
9. **Kotomkin, A.V.** Ehlektronnye parametry molekul ryada 1,1 difloralkanov [Electronic parameters of molecules of the 1,1 difluoroalkanes series] / 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).
10. **Kotomkin, A.V.** Stericheskie ehffekt v molekulakh difloralkanov [Steric effect in difluoroalkane molecules] / A.V. Kotomkin, N.P. Rusakova, V.V. Turovtsev, Yu.D. Orlov // *Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*. – 2019. – I. 11. – P. 478-486. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.478. (In Russian).
11. **Quiñónez, P.B.** AIM study on the influence of fluorine atoms on the alkyl chain / P.B. Quiñónez, A. Vila, A.M. Graña, R.A. Mosquera // *Chemical Physics*. – 2003. – V. 287.

– I. 1-2. – P. 227-236. DOI: 10.1016/S0301-0104(02)00993-X.

12. **Gillis, E.P.** Applications of fluorine in medicinal chemistry / E.P. Gillis, K.J. Eastman, M.D. Hill, D.J. Donnelly, N.A. Meanwell // Journal of Medicinal Chemistry. – 2015. – V. 58. – I. 21. – P. 8315-8359. DOI: 10.1021/acs.jmedchem.5b00258.

13. **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.

14. **Keith, T.A.** AIMall (Version 11.09.18, Professional). – Режим доступа: [www.url: http://aim.tkgristmill.com](http://aim.tkgristmill.com). – 1.08.2020.

Short Communications

**ELECTRON PARAMETERS OF THE STRUCTURAL ISOMERS OF
 k,k – DIFLUOROCTANE**

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/2020.12.438

Abstract: The investigation of the electronic structure of the 6,6 – difluorine undecane ($6,6-F_2C_{11}H_{22}$) and structural isomers of k,k – difluorine octane molecules ($k,k-F_2C_8H_{16}$, $1 \leq k \leq 8$, where k is a position of the fluorine atoms in alkyl chain) has been carried out. Within the «quantum theory of atoms in molecules» the transferable or «standard» electron parameters of topological atoms and atomic groups (charge, energy and volume) have been determined. The inductive effect spread from the fluorine and the fluorine-containing fragments (CHF_2 and CF_2) on local environment was explored. The influence of CHF_2 applies to four CH_2 groups along the hydrocarbon chain, the influence of CF_2 applies to two CH_2 groups in both sides along the hydrocarbon chain. Data on changes in electronic parameters depending on the distance from the fluorine atom were obtained. Series of electronegativity of the functional groups has been made up. According to it CF_2 group is a stronger acceptor of electron density, than CHF_2 .

Keywords: inductive effect, electronegativity, quantum theory of atoms in molecules, electron density, fluorine alkanes.

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», научный сотрудник кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Орлов Юрий Дмитриевич – 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 Physical Chemistry Department, Tver State University

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

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

Поступила в редакцию/received: 01.09.2020; после рецензирования/revise: 20.09.2020; принята/accepted 24.09.2020.