УДК 544.421.032.76 *Оригинальная статья*

Электронное строение свободного радикала 9-флуоренил в рамках QTAIM

Е.М. Чернова[1], Ю.Д. Орлов[1], Е.А. Мирошниченко[2]
[1]ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
170100, Россия, Тверь, ул. Желябова, 33
[2]ФГБУН«Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН»
119334, Россия, Москва, ул. Косыгина, 4
Chernova.EM@tversu.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.514

Аннотация: В работе представлены результаты исследования влияния свободной валентности на электронное строение 9-фуоренил радикала в сравнении с молекулой флуорена. Геометрическое строение и распределения электронной плотности в указанных соединениях рассчитаны методом функционала плотности B3LYP/6-311++G(3df,3pd) 6d 10f. Электронное строение изученных соединений исследовано в рамках «квантовой теории атомов в молекуле» (quantum theory of atoms in molecules). Полная электронная плотность рассматриваемых соединений была разделена на пространственные области («топологические» атомы»), объединенные для анализа в атомные группы. Вычислены их электронные параметры: заряд, объем и для радикалов, спиновая плотность. Проведен сравнительный анализ параметров атомных групп в молекуле и радикале. Получены и проанализированы характеристики критических точек связей *C-C* и критических точек циклов. Количественно охарактеризованы понятия «радикальный центр» и «свободная валентность», показано сопряжение свободной валентности в 9-флуорениле через распределение спиновой плотности.

Ключевые слова: флуорен, 9-флуоренил, квантовая теория атомов в молекуле, электронная плотность, спиновая плотность, свободная валентность, радикальный центр.

Чернова Елена Михайловна – заведующая базовой учебной лабораторией общей физики при кафедре общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
Орлов Юрий Димитриевич – заведующий кафедрой общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
Мирошниченко Евгений Александрович – главный научный сотрудник отдела горения и взрыва, ФГБУН «Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН»

Original paper

The electronic structure of free radical 9-fluorenyl within the framework of QTAIM

E.M. Chernova[1], Yu.D. Orlov[1], E.A. Miroshnichenko[2]
[1]Tver State University, Tver, Russia
[2]N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the RAS, Moscow, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.514

Abstract: The paper presents the results of studying the influence of free valence on the electronic structure of 9-fuorenyl radical in comparison with the fluorene molecule. The geometric structure and electron density distributions in the above compounds were calculated using the density functional method B3LYP/6-311++G(3df,3pd) 6d 10f. The electronic structure of the studied compounds was investigated within the framework of the «quantum theory of atoms in a molecule». The total electron density of the compounds under consideration was divided into spatial areas («topological» atoms) combined for analysis into atomic groups. Their electronic parameters were calculated: charge, volume, and spin density (for radicals). A comparative analysis of the parameters of atomic groups in the molecule and radical was performed. The characteristics of bond critical points and cycle critical points were obtained and analyzed. The concepts of «radical center» and «free valence» are quantitatively characterized, and the conjugation of free valence in 9-fluorenyl is shown through the distribution of spin density.

Keywords: fluorene, 9-fluorenyl, quantum theory of atoms in a molecule, electron density, spin density, free valence, radical center.

Elena M. Chernova – Head of the Basic Educational Laboratory, General Physics Department, Tver State University
Yuri D. Orlov – Head of the General Physics Department, Tver State University
Evgeny A. Miroshnichenko – Chief Researcher, Burning and Explosion Department, N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the RAS

Поступила в редакцию/received: 02.07.2025; после рецензирования/revised: 30.07.2025; принята/accepted: 01.08.2025.

1. Введение

Свободные радикалы, в подавляющем большинстве, характеризуются малыми временами жизни и высокой реакционной способностью. Это ограничивает возможности использования экспериментальных методов для исследования их свойств.

Современные методы расчета, в частности квантово-химические методы, способны предоставлять информацию о строении и свойствах химических соединений, с точностью соизмеримой с экспериментальной через волновую функцию или распределение электронной плотности $\rho(r)$ [1, 2].

Метод QTAIM (quantum theory of atoms in molecules) [3, 4] позволяет разбить полученную квантовыми методами электронную плотность $\rho(r)$ молекулы на фрагменты $\rho_\Omega(r)$, относимые к атомам. Атомы Ω («топологические» атомы) в QTAIM являются открытыми квантовыми системами, ограниченными поверхностями нулевого потока градиента $\rho(r)$, для которых возможно вычисление ряда параметров электронной плотности. Взаимодействующие топологические атомы соединяются линиями (связевыми путями), проходящими от ядра одного атома до ядра второго атома через так называемую критическую точку связи [3]. Вдоль связевого пути электронная плотность максимальна, по сравнению с другими линиями, а критическая точка связи – есть точка пересечения связевого пути и межатомной поверхности. Химическая связь в QTAIM описывается параметрами критической точки связи (электронная плотность – ρ_B, лапласиан – $\nabla^2\rho_B$, эллиптичность – ε_B) и длиной связевого пути L [3]. Циклические соединения в QTAIM [3] характеризуются параметрами критических точек цикла (электронная плотность – ρ_R, лапласиан – $\nabla^2\rho_R$).

Такое разделение молекулы на атомы позволяет описывать внутримолекулярные и межмолекулярные взаимодействия, а также взаимосвязи «строение-свойство» в понятиях классической теории – аддитивность, переносимость, индуктивный и стерический эффекты, электроотрицательность, радикальный центр, свободная валентность,

сопряжение и др. [5-10].

При описании свободных радикалов $R^{\bullet}$ появляется еще одна характеристика – «спиновая плотность» $\sigma(r)$ – разность распределения плотностей α и β электронов $\sigma(r) = \rho_{\alpha}(r) - \rho_{\beta}(r)$. Величина $\sigma(r)$ определяет радикальный центр и количественно характеризует такое свойство $R^{\bullet}$ и $\Omega^{\bullet}$ как «свободная валентность» [9]. Присутствие свободной валентности в радикале приводит к дополнительному возмущению электронной плотности по сравнению с исходной молекулой. Группа, в бассейне которой сосредоточена подавляющая часть электронной плотности неспаренного электрона, является радикальным центром, а свободную валентность, как правило, изображаемую символом «$^{\bullet}$», относят к Ω радикального центра, бассейн которого включает основную часть спиновой плотности. При «размазывании» спиновой плотности по нескольким фрагментам $R^{\bullet}$ возникает явление «сопряжения свободной валентности», что особенно характерно для $R^{\bullet}$, где есть кратные связи [9].

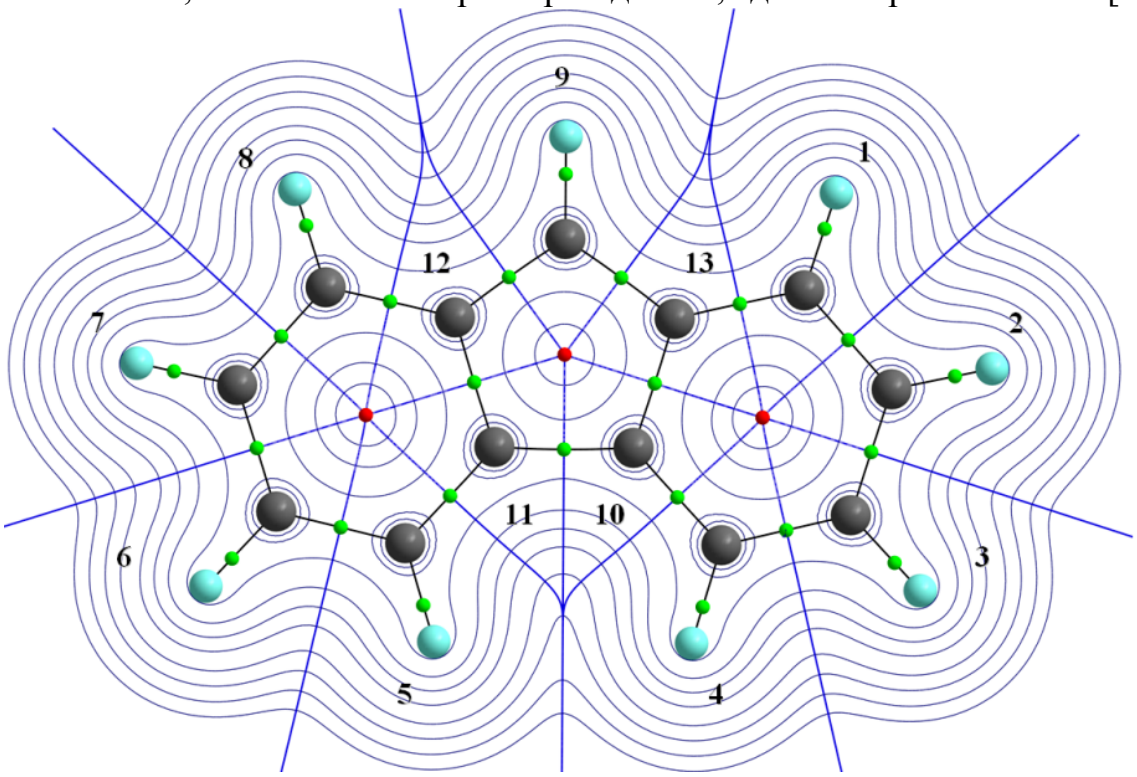

Рис. 1. Распределение электронной плотности в 9-флуоренил радикале. Цифрами указано положение атомных групп (R).

В настоящей работе было проведено исследование электронного строения 9-флуоренильного радикала и сравнение его параметров с молекулой флуорена в рамках QTAIM. Флуорен относится к группе полициклических ароматических углеводородов. Флуорензамещенные соединения используются в производстве красок, фармацевтических препаратов, электропроводящих полимеров и др.

На рис. 1 представлено распределение $\rho(r)$ в 9-флуореннле, серые сферы – атомы C, голубые – атомы H, синим обозначены границы раздела (атомных групп) в рамках QTAIM. «Топологические атомы» соединены связевыми путями, критические точки – зеленые маленькие сферы. Отметим, что критические точки связи располагаются на пересечениях границ раздела атомных групп и связевого пути. Критические точки цикла изображены красными сферами.

2. Расчеты

Равновесная геометрия флуорена и его радикала 9-флуоренила получена в пакете программ Gaussian'03 методом B3LYP 6-311++G(3df,3pd) [11]. Разбиение молекулярной электронной плотности на фрагменты (атомы и группы атомов) и вычисление их интегральных параметров(заряд $q(R)$, объем $V(R)$, спиновая плотность $\sigma(R)$) в рамках QTAIM этих фрагментов производилось в программе AIMALL [12]. В этой же программе проведены вычисления параметров критических точек связей, связевых путей и критических точек цикла.

Таблица 1. Параметры QTAIM атомных групп флуорена.

Параметр	CH				C		CH_2
	1, 8	**2, 7**	**3, 6**	**4, 5**	**10, 11**	**12,13**	**9**
$q(R)$, a.e.	0,000	-0,002	0,002	0,003	-0,018	-0,024	0,078
$V(R)$, $Å^3$	19,9	19,9	19,8	19,9	10,5	10,4	23,9

Таблица 2. Параметры QTAIM атомных групп 9-флуоренила.

Параметр	CH				C		$C^{\bullet}H$
	1, 8	**2, 7**	**3, 6**	**4, 5**	**10, 11**	**12, 13**	**9**
$q(R)$, a.e.	0,010	0,004	0,003	0,012	-0,018	-0,012	0,001
$V(R)$, $Å^3$	19,9	19,9	19,9	19,8	10,6	10,6	20,3
$\sigma(R)$, a.e.	0,13	-0,04	0,14	-0,03	0,10	-0,05	0,49

Таблица 3. Параметры QTAIM связей $C(n)-C(m)$ флуорена.

$n-m$	**1-2 7-8**	**2-3 7-6**	**3-4 6-5**	**4-10 5-11**	**1-13 8-12**	**9-13 9-12**	**10-13 11-12**	**10-11**
ρ_B, a.e.	0,316	0,316	0,317	0,317	0,321	0,255	0,313	0,277
$\nabla^2\rho_B$, a.e.	-0,926	-0,929	-0,935	-0,937	-0,955	-0,620	-0,900	-0,731
ε_B	0,201	0,197	0,206	0,191	0,207	0,033	0,187	0,088
L, Å	1,392	1,393	1,391	1,392	1,385	1,511	1,405	1,467

В таблицах представлены данные по атомным группам молекулы флуорена (см. Таблицу 1) и 9-флуоленил радикала (см. Таблицу 2). Были рассмотрены параметры для связей $C(n)-C(m)$, где n и m номера атомных

групп (см. рис. 1), в молекуле флуорена (см. Таблицу 3) и в 9-флуоренил радикале (см. Таблицу 4). Параметры циклов исследуемых соединений приведены в Таблице 5. В таблицах группы с одинаковыми параметрами были снесены в одну ячейку. Для проведения анализа электронного строения группы в соединениях были пронумерованы, как показано на рис. 1.

Таблица 4. Параметры QTAIM связей $C(n)-C(m)$ 9-флоуренила.

$n-m$	**1-2 7-8**	**2-3 7-6**	**3-4 6-5**	**4-10 5-11**	**1-13 8-12**	**9-13 9-12**	**10-13 11-12**	**10-11**
ρ_B, а.е.	0,318	0,315	0,313	0,323	0,300	0,297	0,314	0,277
$\nabla^2\rho_B$, а.е.	-0,939	-0,922	-0,912	-0,968	-0,834	-0,825	-0,923	-0,729
ε_B	0,207	0,194	0,191	0,206	0,155	0,151	0,176	0,092
L, Å	1,390	1,396	1,399	1,382	1,398	1,427	1,428	1,465

Таблица 5. Параметры QTAIM циклов флуорена и 9-флоуренила.

Параметр	флуорен		9-флоуренил	
	1-2-3-4-10-13 5-6-7-8-12-11	**10-11-12-9-13**	**1-2-3-4-10-13 5-6-7-8-12-11**	**10-11-12-9-13**
ρ_R, а.е.	0,023	0,045	0,022	0,047
$\nabla^2\rho_R$, а.е.	0,158	0,274	0,155	0,295

3. Обсуждение результатов

Сравнение параметров атомных групп различных соединений позволяет выявить «переносимые» или «стандартные» группы, характеристики которых одинаковы. Отметим, что согласно «голографической теореме» [13, 14], абсолютно точной переносимости групп не существует [6], однако при введении некоторых обоснованных допущений можно обнаружить ряд закономерностей необходимые для построения или уточнения аддитивных методов [15, 16].

Сравнение QTAIM параметров атомных групп CH флуорена с характеристиками аналогичных групп CH в бензоле ($q(CH) = 0{,}000$ а.е., $V(CH) = 19{,}9\ \mathring{A}^3$ [12]) показал их практическое совпадение. Группа CH_2 в положении **9** в флуорене является донором электронной плотности, которая стягивается на группы C в положениях **10**, **11**, **12** и **13,** при этом объем CH_2 увеличивается, в сравнении со «стандартной» CH_2 [8-10].

Отрыв водорода в группе 9 флуорена приводит к образованию радикала 9-флуоренила и, исходя из значений спиновой плотности, свободная валентность делокализована по всему объему радикала 9-флуоренила. Наибольшая спиновая плотность сосредоточена на группе **9**, что говорит о том, что он является радикальным центром.

Сравнение зарядовых параметров формально одинаковых групп флуорена и 9-флуоренила (см. Таблицы 1 и 2) показало, что наибольшее

изменение в заряде претерпели группы **1**, **8** (заряд увеличился на 0,010 а.е.), **4**, **5** (заряд увеличился на 0,009 а.е.), **12**, **13** (заряд уменьшился на 0,012 а.е), заряд остальных групп изменился незначительно. Появление в соединении свободной валентности практически не повлиял на объем рассмотренных выше групп.

Отметим, что совпадение параметров QTAIM атомных групп для обоих соединений соответствует типу их симметрии (C_{2v}).

Сравнение параметров связей $C-C$ флуорена и бензола (L = 1,391 Å, ρ_B = 0,318 а.е., $\nabla^2\rho_B$ = –0,942 а.е., ε_B = 0,196 [17]) показало, что связи **1-2**, **2-3**, **3-4**, **4-10**, **5-11**, **5-6**, **6-7**, **7-8** имею практически идентичные (ρ_B одинаковые, $\nabla^2\rho_B$ и ε_B немного выше, L одинаковые) параметры со связями бензола. Связи **11-12** и **10-13** отличаются от бензольных более существенно: ρ_B ниже на 0,005 а.е., $\nabla^2\rho_B$ выше на 0,042 а.е., ε_B ниже на 0,004, L длиннее на 0,014 $Å$. Связи **8-12** и **1-13** отличаются в обратную сторону: ρ_B выше на 0,003 а.е., $\nabla^2\rho_B$ ниже на 0,007 а.е., ε_B выше на 0,016, L короче на 0,006 $Å$. Данные изменения, в приведенных выше связях флуоренов, скорее всего связаны с наличием дополнительного пятичленного цикла, соединяющего бензольные кольца. Отметим, что связи **9-13**, **9-12** и **10-11**, которые вместе со связями **11-12** и **10-13** образуют пятичленный цикл, являются одинарными, о чем свидетельствует их малая эллиптичность.

Анализ данных Таблиц 3 и 4 показал, что наибольшее изменение при появлении свободной валентности претерпевают связи **9-12** и **9-13:** увеличивается их электронная плотность и эллиптичность, уменьшается лапласиан критических точек связи и их длины. При этом данные параметры приближаются по величинам к ароматическим связям в бензоле [17]. Так же длины связей **10-13** и **11-12** увеличиваются, а их остальные параметры изменяются незначительно.

Сравнение данных из Таблицы 5, показал, что появление свободной валентности приводит к небольшому стеканию электронной плотности с бензольных циклов на пятичленный цикл со свободной валентностью. При этом, параметры бензольных циклов в флуорене и бензоле (ρ_B = 0,023 а.е., $\nabla^2\rho_B$ = 0,160 а.е. [17]) практически идентичны (в рамках расчетной погрешности в 0,003 а.е.).

4. Заключение

Таким образом, были рассчитаны количественные характеристики распределения электронной плотности в молекуле флуорена и 9-флуоренил радикале. Проведено сравнение параметров атомных групп и критических точек связи и циклов рассматриваемых соединений между

собой и с бензолом, отмечена зависимость изменения характеристик от расстояния до радикального центра. Анализ электронной плотности неспаренного электрона позволили охарактеризовать 9-флуоренил радикал как сопряженный радикал [9], а группу **9** с наибольшей электронной плотностью неспаренного электрона обозначить как радикальный центр. Рассмотрение параметров связей показал, что при образовании 9-флуоренил радикал существенно изменяются параметры ближайшие к радикальному центру связей. Изменение в характеристиках циклов флуорена и 9-флуоренил радикале не существенно.

Данное исследование увеличивает базу данных по электронному строению циклических и ароматических соединений, что позволит в дальнейшем выявить закономерности «структура – свойство», и может способствовать разработке качественных феноменологических моделей и методов фрагментирования [15, 16].

Библиографический список:

1. **Цирельсон, В.Г.** Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела / В.Г. Цирельсон. – М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2010. – 496 с.
2. **Tsirelson, V.G.** / Electron density and bonding in crystals: principles, theory and X-ray diffraction experiments in solid state physics and chemistry / V.G. Tsirelson, R.P. Ozerov. – Boca Raton: CRC Press, 1996. – 532 p. DOI: 10.1201/9781003062998.
3. **Бейдер, Р.** Атомы в молекулах: Квантовая теория / Р. Бейдер. – М.: Мир, 2001. – 532 с.
4. The quantum theory of atoms in molecules: from solid state to DNA and drug design / ed. by C.F. Matta, R.J. Boyd. – Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co, 2007. – 567 p. DOI: 10.1002/9783527610709.
5. **Верещагин, А.Н.** Индуктивный эффект / А.Н. Верещагин. – М: Наука. 1987. – 326 с.
6. **Bader, R.F.W.** Transferability of atomic properties and the theorem of Hohenberg and Kohn / R.F.W. Bader, P. Becke // Chemical Physics Letters. – 1988. – V. 148. – I. 5. – P. 452-458. DOI: 10.1016/0009-2614(88)87203-8.
7. **Черкасов, А.Р.** Концепция электроотрицательности. Современное состояние проблемы / А.Р. Черкасов, В.И. Галкин, Е.М. Зуева, Р.А. Черкасов // Успехи химии. – 1998. – Т. 67. – Вып. 5. – С. 423-441.
8. **Туровцев, В.В.** Изучение индуктивного и стерического эффектов в нормальных спиртах / В.В. Туровцев, Е.М. Чернова, Ю.Д. Орлов // Журнал структурной химии. – 2015. – Т. 56. – № 2. – С. 225-231.
9. **Чернова, Е.М.** Исследование электронного строения алкилаллинильных радикалов / Е.М. Чернова, В.Н. Ситников, В.В. Туровцев, Ю.Д. Орлов // Журнал структурной химии. – 2018. – Т. 59. – № 6. – С. 1315-1320. DOI: 10.26902/JSC20180603.
10. **Чернова, Е.М.** Исследование электронного строения разветвленных углеводородов в рамках квантовой теории атомов в молекуле. Изо- и трет- алканы / Е.М. Чернова, В.В. Туровцев, Ю.Д. Орлов // Химическая физика. – 2018. – Т. 37. – № 11. – С. 10-14. DOI: 10.1134/S0207401X18110043.
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. **Keith, T.A.** AIMAll (Version 11.09.18, Professional). – Режим доступа: www.url: http://aim.tkgristmill.com. – 1.06.2025.
13. **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 Computer Sciences. – 1999. – V. 39. – I. 2. – P. 224-230. DOI: 10.1021/ci980072y.
14. **Riess, J.** The theorem of Hohenberg and Kohn for subdomains of a quantum system / J. Riess, W. Münch // Theoretica chimica acta. – 1981. – V. 58. – I. 4. – P. 295-300. DOI: 10.1007/BF02426905.
15. **Cohen N.** Revised group additivity values for enthalpies of formation (at 298 K) of carbon–hydrogen and carbon–hydrogen–oxygen compounds / N. Cohen // Journal of Physical and Chemical Reference Data. – 1996.

– V. 25. – I. 6. – P. 1411-1481. DOI: 10.1063/1.555988.
16. **Орлов, Ю.Д.** Взаимосвязь феноменологических методов расчета энтальпий образования свободных радикалов / Ю.Д. Орлов, Ю.А. Лебедев // Журнал физической химии. – 1993. – Т. 67. – № 5. – С. 925-932.
17. **Чернова, Е.М.** Влияние свободной валентности на распределение электронной плотности в бензольном кольце / Е.М. Чернова, Н.П.Русакова, Е.А. Мирошниченко, Ю.Д. Орлов // Вестник Тверского государственного университета. Серия «Химия». – 2021. – № 4 (46). – С. 85-89. DOI: 10.26456/vtchem2021.4.10.

References:

1. Tsirelson V.G. *Kvantovaya khimiya. Molekuly, molekulyarnye sistemy i tverdye tela* [Quantum chemistry. molecules, molecular systems and solids]. Moscow, BINOM, Laboratoriya znanii Publ., 2010, 496 p. (In Russian).
2. Tsirelson V.G., Ozerov R.P. *Electron density and bonding in crystals: principles, theory and X-ray diffraction experiments in solid state physics and chemistry.* Boca Raton, CRC Press, 1996, 532 p. DOI: 10.1201/9781003062998.
3. Bader R.F.W. *Atoms in molecules: a quantum theory, International series of monographs on chemistry*, Oxford, Clarendon Press, 1990, vol. 22, 438 p.
4. *The quantum theory of atoms in molecules: from solid state to DNA and drug design*, ed. by C.F. Matta, R.J. Boyd, Weinheim, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co, 2007, 567 p. DOI: 10.1002/9783527610709.
5. Vereshchagin A.N. *Induktivnyj effekt* [Inductive effect]. Moscow, Nauka Publ., 1987, 326 p. (In Russian).
6. Bader R.F.W., Becke P. Transferability of atomic properties and the theorem of Hohenberg and Kohn, *Chemical Physics Letters,* 1988, V. 148, issue 5, pp. 452-458. DOI: 10.1016/0009-2614(88)87203-8.
7. Cherkasov A.R., Galkin V.I., Zueva E.M., Cherkasov R.A. The concept of electronegativity. The current state of the problem, *Russian Chemical Reviews*, 1998, vol. 67, issue 5, pp. 375-392. DOI:10.1070/RC1998v067n05ABEH000383.
8. Turovtsev V.V., Chernova E.M., Orlov Yu.D. A study of inductive and steric effects in normal alcohols, *Journal of Structural Chemistry*, 2015, vol. 56, issue 2, pp. 209-215. DOI: 10.1134/S002247661502002X .
9. Chernova E.M., Sitnikov V.N., Turovtsev V.V., Orlov Y.D. Investigation of the electronic structure of alkyl allyl radicals, *Journal of Structural Chemistry*, 2018, vol. 59, issue 6, pp. 1265-1270. DOI: 10.1134/S0022476618060033
10. Chernova E.M., Turovtsev V.V., Orlov Yu.D. Electronic structure of branched hydrocarbons in the framework of quantum theory of atoms in molecules: Iso-and tert-alkanes, *Russian Journal of Physical Chemistry B,* 2018*,* vol.12, issue 6, pp. 965-969. DOI: 10.1134/S1990793118060040.
11. Frisch M.J., Canceucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 03 (Revision E 0.1 SMP), Pittsburgh PA, Gaussian Inc., 2007.
12. Keith T.A. AIMAll (Version 11.09.18, Professional). Available at: www.url: http://aim.tkgristmill.com. (accessed 1.06.2025).
13. Mezey P.G. Holographic electron density shape theorem and its role in drug design and toxicological risk assessment, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 1999, vol. 39, issue 2, pp. 224-230. DOI: 10.1021/ci980072y.
14. Riess J., Münch W. The theorem of Hohenberg and Kohn for subdomains of a quantum system, *Theoretica chimica acta*, 1981, vol. 58, issue 4, pp. 295-300. DOI: 10.1007/BF02426905.
15. Cohen N. Revised group additivity values for enthalpies of formation (at 298 K) of carbon–hydrogen and carbon–hydrogen–oxygen compounds, Journal of Physical and Chemical Reference Data, 1996, vol. 25, issue 6, pp. 1411-1481. DOI: 10.1063/1.555988.
16. Orlov Yu. D., Lebedev Yu. A. *Vzaimosvyaz' fenomenologicheskikh metodov rascheta ental'pij obrazovaniya svobodnykh radikalov* [Interrelation of phenomenological methods for calculating enthalpies of formation of free radicals], *Zhurnal fizicheskoj khimii [Russian Journal of Physical Chemistry A]*, 1993, vol. 67, no. 5, pp. 925-932. (In Russian).
17. Chernova E.M., Rusakova N.P., Miroshnichenko E.A., Orlov Yu.D. Vliyanie svobodnoj valentnosti na raspredelenie elektronnoj plotnosti v benzol'nom kol'tse [Effect of free valence on the electron density distribution in a benzene ring]*, Vestnik Tverskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya «Khimiya» [Bulletin of Tver State University. Chemistry Series],* 2021, no. 4 (46), pp. 85-89. DOI: 10.26456/vtchem2021.4.10.