УДК 539.193 *Оригинальная статья*

Топология электронной плотности и молекулярные параметры монохлорзамещенных производных антрацена: QTAIM-анализ позиционной изомерии в контексте молекулярной электроники

А.М. Рихмайер, Е.М. Чернова, Ю.Д. Орлов, М.А. Рихмайер
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
170100, Россия, Тверь, ул. Желябова, 33
amrihmayer@yandex.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.484

Аннотация: Выполнен систематический анализ топологии электронной плотности позиционных изомеров монохлорантрацена. Расчеты реализованы в рамках теории функционала электронной плотности B3LYP с базисом 6-311G. Анализ полученной электронного строения осуществлялся с использованием квантовой теории атомов в молекуле. Установлено, что положение атома хлора оказывает влияние на распределение электронной плотности в антраценовом ядре, что проявляется в изменении значений атомных зарядов и объемов, энергиях ионизации и сродства к электрону. Показано, что 9-хлорантрацен характеризуется максимальной делокализацией электронной плотности, максимальной энергией сродства к электрону и минимальной энергией ионизации, что предсказывает высокую подвижность носителей заряда. Полученные результаты демонстрируют эффективность использования дескрипторов электронной топологии для предсказательного дизайна органических полупроводников на уровне изолированной молекулы.

Ключевые слова: антрацен, монохлорантрацен, QTAIM, топология электронной плотности, позиционная изомерия, молекулярная электроника, органические полупроводники, энергия ионизации, энергия сродства к электрону, энергия ширины запрещённой зоны.

Рихмайер Артем Михайлович – аспирант 3 года обучения кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
Чернова Елена Михайловна – к.ф.-м.н., доцент кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
Орлов Юрий Димитриевич – д.х.н., профессор, заведующий кафедрой общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
Рихмайер Мария Андреевна – аспирант 1 года обучения кафедры общей физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Original paper

Electron density topology and molecular parameters of monochloro-substituted anthracene derivatives: QTAIM positional isomerism analysis in the context of molecular electronics

A.M. Rikhmaier, E.M. Chernova, Yu.D. Orlov, M.A. Rikhmaier
Tver State University, Tver, Russia
amrihmayer@yandex.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.484

Abstract: A systematic analysis of the electron density topology in a number of positional isomers of monochloranthracene is performed. The calculations were carried out using the B3LYP electronic density functional theory with the basis 6-311G. The analysis of the obtained electronic structure was performed using the quantum theory of atoms in the molecule. It has been established that the position of the chlorine atom affects the distribution of electron density in the anthracene core, which is manifested in a change in the values of atomic charges and volumes, ionization energies, and electron affinity. It has been shown that 9-chloroanthracene is characterized by maximum delocalization of

© А.М. Рихмайер, Е.М.Чернова, Ю.Д. Орлов, М.А. Рихмайер, 2026

electron density, maximum electron affinity energy and minimum ionization energy, which predicts high mobility of charge carriers and the ability to form rigid crystalline packages. The findings demonstrate that descriptors of electronic topology can serve as an effective tool for predictive design of organic semiconductors at the isolated molecule level.
Keywords: anthracene, monochloranthracene, QTAIM, electron density topology, positional isomerism, molecular electronics, organic semiconductors, ionization energy, electron affinity energy, band gap energy.

Artem M. Rikhmaier – 3rd year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0009-0000-0993-5118
Elena M. Chernova – Ph. D., Associate Professor, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0001-8734-2350
Yuri D. Orlov – Dr. Sc., Professor, Head of the General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0000-0003-1291-6019
Maria A. Rikhmaier – 1st year postgraduate student, General Physics Department, Tver State University, ORCID: 0009-0002-3978-9304

Поступила в редакцию/received: 01.06.2026; после рецензирования/revised: 25.06.2026; принята/accepted: 29.06.2026.

1. Введение

Органические полупроводники на основе линейно аннелированных аценов занимают центральное место в молекулярной электронике благодаря высокой подвижности носителей заряда [1]. Антрацен и его производные широко применяются в органических полевых транзисторах (OFETs) и органических светодиодах (OLEDs) [2, 3]. Введение галогенов, в частности хлора, открывает возможности для модуляции электронных свойств за счет электроноакцепторного эффекта, повышения стабильности к окислению и создания направленных межмолекулярных взаимодействий (галогенных связей) [4, 5].

Однако влияние положения атома хлора (1-, 2- или 9-позиции) (см. рис. 1) на фундаментальные молекулярные параметры, определяющие функциональность материала, остается предметом дискуссий.

Квантовая теория атомов в молекуле [6], предлагает строгий формализм для анализа топологии электронной плотности $\rho(r)$. В рамках QTAIM молекула рассматривается как совокупность атомных бассейнов, разделённых поверхностями нулевого потока градиента $\rho(r)$. Это позволяет получать экспериментально обоснованные (через волновые функции) значения атомных зарядов, характеризовать природу химических связей (BCP) и количественно оценивать ароматичность отдельных колец [7].

Ранее топология электронной плотности родственных соединений рассматривалась в работах [8-10].

Цель данного исследования – систематическое исследование влияния позиционной изомерии в ряду монохлорзамещенных производных антрацена на топологию электронной плотности и полупроводниковые характеристики (энергии ионизации, сродства к электрону, ширины

запрещенной зоны) с использованием методологии QTAIM. Полученные результаты направлены на установление количественных корреляций «структура – свойство» на молекулярном уровне.

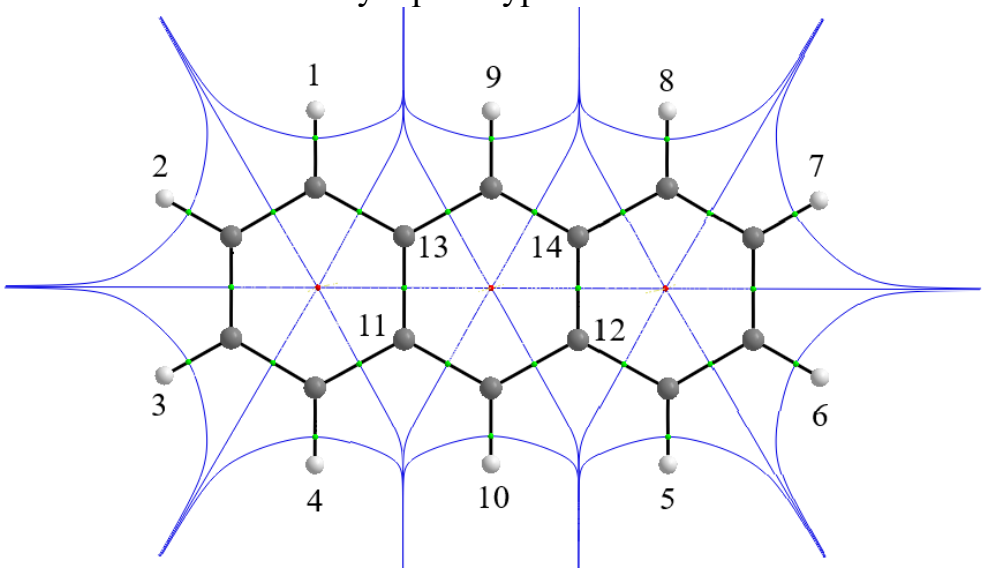

Рис. 1. Структурная формула антрацена с визуализацией границ межатомных поверхностей. Цифрами указано положение атомных групп (R).

2. Методы расчета

Квантово-механические расчеты исследуемых соединений выполнены с использованием программного обеспечения Gaussian 16 [11]. Разбиение электронной плотности на атомы (Ω) и группы атомов (R), а так же расчет их электронных интегральных характеристик: заряд ($q(\Omega)$), объем ($V(\Omega)$), реализовано посредством программы AIMALL [12].

2.1. Оптимизация геометрии и расчет волновых функций

Оптимизация геометрии изолированных молекул $1-Cl-C_{14}H_9$; $2-Cl-C_{14}H_9$; $9-Cl-C_{14}H_9$ и незамещенного антрацена $C_{14}H_{10}$ проведена с использованием метода функционала плотности (DFT – Density Functional Theory), в основе которого лежит отказ от использования волновой функции для описания системы и использование для этой цели функции электронной плотности [13]. В качестве основного функционала выбран гибридный функционал общего применения B3LYP, который даёт результаты средней точности на широкой группе структур с однородным распределением погрешностей для разных классов соединений. Рекомендуется как метод для молекулярных систем, свойства которых ещё не изучены [13]. В качестве базисного набора использовался 6-311G. Выбор B3LYP/6-311G обусловлен его высокой эффективностью для расчета полициклических ароматических углеводородов [14].

2.2. Энергетические параметры и ширина запрещенной зоны

Значения энергии ионизации (I) и сродства к электрону (A) определяют способность молекул «обмениваться» электронами, что прямым образом связано с прочностью химической связи (особенно ионной). Низкое значение I (легкая отдача e^-) и высокое A (легкое принятие e^-) способствуют образованию прочных ионных связей.

Для интерпретации и оценки энергий ионизации и сродства к электрону исследуемых изомеров использовался подход, описанный в научной работе [15], основанный на теореме Купманса, применимой к методу Хартри-Фока. Однако, в рамках DFT, доказано соответствие орбитальных энергий энергиям ионизации и сродства к электрону [16]. Поэтому нами использован функционал B3LYP, применимость которого для данной задачи подтверждена в систематических исследованиях [17, 18].

Энергию ионизации химических соединений можно представить в виде величины, обратной энергии HOMO ($I = -E_{HOMO}$). Энергетическое состояние низшей свободной молекулярной орбитали (LUMO) указывает на сродство к присоединенному электрону, учитывая, что принимаемый электрон займет вакантную молекулярную орбиталь с самой низкой энергией в основном состоянии [15]. Таким образом, количественная оценка энергии сродства к электрону может быть выражена как величина, обратная энергии LUMO ($A = -E_{LUMO}$).

Разница энергий между HOMO и LUMO определяет ширину запрещённой зоны ($E_g = E_{LUMO} - E_{HOMO}$). Результаты вычислений данных полупроводниковых характеристик представлены в Таблице 1.

Таблица 1. Энергетические характеристики $C_{14}H_{10}$ и его позиционных изомеров.

	E_g, эВ			I, эВ			A, эВ		
$C_{14}H_{10}$	3,627			5,501			1,874		
	$9-Cl-C_{14}H_9$			$1-Cl-C_{14}H_9$			$2-Cl-C_{14}H_9$		
	E_g, эВ	I, эВ	A, эВ	E_g, эВ	I, эВ	A, эВ	E_g, эВ	I, эВ	A, эВ
$C_{14}H_9Cl$	3,549	5,752	2,202	3,589	5,762	2,173	3,612	5,792	2,179

2.3. Оценка интегральных характеристик

Для оценки влияния моногалогенирования антрацена хлором на топологию электронной плотности, исследуемые соединения были разбиты на «топологические» группы ($R = C, CH, CCl$), параметры которых представлены в виде суммы интегральных характеристик атомов, входящих в данные фрагменты. В таблицах 2, 3 приведены интегральные характеристики рассмотренных атомных групп; нумерация фрагментов

выполнена в соответствии с рис. 1. Параметры QTAIM атомных групп антрацена подтверждают его симметрию (C_2), соответственно в таблице 2 в одной ячейке приводятся данные для нескольких групп.

Таблица 2. QTAIM параметры $C_{14}H_{10}$.

	$1CH$, $4CH$, $5CH$, $8CH$	$2CH$, $3CH$, $6CH$, $7CH$	$9CH$, $10CH$	$11C$, $12C$, $13C$, $14C$
$q(R)$, a.e.	0,002	0,004	-0,003	-0,005
$V(R)$, Å^3	19,6	19,7	19,5	10,5

Таблица 3. QTAIM параметры изомеров $Cl-C_{14}H_9$ ($q(R)$, a.e.; $V(R)$, Å^3).

R	$9-Cl-C_{14}H_9$		R	$1-Cl-C_{14}H_9$		R	$2-Cl-C_{14}H_9$	
	$q(R)$	$V(R)$		$q(R)$	$V(R)$		$q(R)$	$V(R)$
$1CH$	0,040	18,8	$1CCl$	-0,205	43,8	$1CH$	0,070	18,9
$2CH$	0,017	19,6	$2CH$	0,073	18,9	$2CCl$	-0,204	44,4
$3CH$	0,013	19,6	$3CH$	0,026	19,6	$3CH$	0,062	19,2
$4CH$	0,010	19,5	$4CH$	0,016	19,5	$4CH$	0,028	19,4
$5CH$	0,010	19,5	$5CH$	0,006	19,6	$5CH$	0,006	19,6
$6CH$	0,013	19,6	$6CH$	0,010	19,7	$6CH$	0,009	19,7
$7CH$	0,017	19,6	$7CH$	0,011	19,7	$7CH$	0,011	19,6
$8CH$	0,040	18,8	$8CH$	0,012	19,5	$8CH$	0,007	19,6
$9CCl$	-0,206	43,0	$9CH$	0,037	18,8	$9CH$	0,007	19,4
$10CH$	0,009	19,3	$10CH$	0,006	19,4	$10CH$	0,006	19,4
$11C$	0,003	10,5	$11C$	-0,002	10,5	$11C$	-0,003	10,5
$12C$	0,003	10,5	$12C$	0,002	10,5	$12C$	-0,003	10,5
$13C$	0,015	10,4	$13C$	-0,001	10,5	$13C$	-0,002	10,5
$14C$	0,015	10,4	$14C$	0,010	10,4	$14C$	0,004	10,5

3. Обсуждение результатов.

3.1. Полупроводниковые характеристики

Энергия ионизации, энергия сродства к электрону и ширина запрещённой зоны для антрацена и его монохлорзамещенных изомеров представлены в таблице 1.

Видно, что рассмотренные энергетические характеристики зависят не только от факта введения галогена, но и от позиционой изомерии производных $C_{14}H_{10}$. Так, энергия ионизации достигает максимального значения в соединении $2-Cl-C_{14}H_9$, разница энергий сродства к электрону для молекул $2-Cl-C_{14}H_9$ и $1-Cl-C_{14}H_9$ составляет 0,006 эВ, что позволяет говорить приблизительном равенстве этих значений. Ширина запрещённой зоны достигает минимального значения в изомере $9-Cl-C_{14}H_9$, характеризуя данную молекулу как наиболее «перспективную» с точки зрения полупроводниковой органики.

3.2. Интегральные характеристики

Анализ интегральных характеристик атомных фрагментов рассмотренных галогенсодержащих изомеров $Cl-C_{14}H_9$ представлен в виде сравнительной оценки значений зарядов и объёмов по отношению к незамещенной конфигурации антрацена.

В монохлорзамещенном изомере антрацена вида $9-Cl-C_{14}H_9$, фрагмент $C(Cl)$ оказывает сильное влияние на соседние атомные группы ($1CH$ и $8CH$; $13C$ и $14C$), что сказывается на значениях $q(R)$ (повышаются для групп $1CH$ и $8CH$, $13C$ и $14C$ на 0,038 а.е. и на 0,020 а.е., соответственно). При анализе $q(R)$ для фрагментов $2CH$ и $7CH$, $3CH$ и $6CH$, $4CH$ и $5CH$, $11C$ и $12C$ выявлено постепенное снижение зарядов групп (индуктивный эффект). Отмечено изменение значений $q(R)$ атомных групп $2CH$ и $7CH$ (на $0{,}011 \pm 0{,}003$ а.е.), $3CH$ и $6CH$ (на $0{,}007 \pm 0{,}003$ а.е.), $4CH$ и $5CH$ (на $0{,}007 \pm 0{,}001$ а.е.), $11C$ и $12C$ (на 0,008 а.е.), $10CH$ (на $0{,}009 \pm 0{,}003$ а.е).

В монхлорантрацене вида $1-Cl-C_{14}H_9$ фрагмент $C(Cl)$ значительно изменяет параметры атомных групп $2CH$, $9CH$ и $13C$, заряды этих групп увеличиваются на 0,069; 0,040 и 0,015 а.е. соответственно. Отметим, что влияние на остальную часть антрацена галогенированная группа оказывает примерно одинаковое – для групп $3CH$, $4CH$, $8CH$ и $10CH$ фиксируется прирост $q(R)$ на примерно 0,022; 0,010; 0,008 и 0,008 а.е и наименьшее влияние CCl оказывает на фрагменты $5CH$, $6CH$, $7CH$, $11C$, $12C$ и $14C$ (модификация значений q(R) одинакова и составляет $0{,}004 \pm 0{,}003$ а.е.).

Атомная группа $C(Cl)$ в $2-Cl-C_{14}H_9$ сильно преобразует значения $q(R)$ фрагментов $1CH$, $3CH$ и $4CH$ (увеличение на 0,068; 0,058 и 0,026 а.е. соответственно). Для $9CH$ и $10CH$ значения изменились на $0{,}009 \pm 0{,}001$ а.е.. В атомных группах $5CH$, $6CH$, $7CH$, $8CH$, $11C$, $12C$, $13C$ и $14C$ прирост $q(R)$ однородный и составляет $0{,}004 \pm 0{,}003$ а.е.

У фрагмента CCl значение заряда не зависит от положения галогена Cl ($q(R) = -0{,}205 \pm 0{,}001$ а.е.), однако положение влияет на объёмы хлорсодержащих групп, модифицируя значения $V(R)$ только для соседних CH групп, уменьшая объем этих фрагментов на $0{,}7 \pm 0{,}1$ Å^3 во всех монохлорзамещенных изомерах антрацена.

Введение Cl-галогенов полностью нарушает симметрию интегральных значений антрацена для изомеров $(1;2)-Cl-C_{14}H_9$. В изомере $9-Cl-C_{14}H_9$ симметрия преобразуется в попарную, образуются дополнительные водородные связи и критические точки между атомами галогена и водорода. Одинаковые значения зарядов и объёмов

фиксируются для групп 1CH и 8CH, 2CH и 7CH, 3CH и 6CH, 4CH и 5CH, 11C и 12C, 13C и 14C.

4. Выводы

Проведённый QTAIM-анализ позволил установить, что позиционная изомерия монохлорпроизводных антрацена оказывает прямое влияние на потенциал использования данных соединений в молекулярной электронике.

В рассмотренных соединениях минимальное значение энергии ионизации и максимальное значение энергии сродства к электрону наблюдается в изомере вида $9-Cl-C_{14}H_9$, что позволяет предположить более высокую подвижность носителей по сравнению с $1-Cl-C_{14}H_9$ и $2-Cl-C_{14}H_9$. Таким образом, $9-Cl-C_{14}H_9$ может являться наиболее перспективным кандидатом для использования при разработке электрон-транспортных слоев.

Анализ интегральных параметров атомных фрагментов позволил выявить наличие стерического эффекта атома хлора, который проявляется в нарушении распределения объёмов соседних с хлорсодержащей группой углеводородных фрагментов во всех рассмотренных соединениях. В позициях $1-Cl-C_{14}H_9$ и $2-Cl-C_{14}H_9$ галоген практически не взаимодействует с противоположной частью молекул, тогда как в позиции $9-Cl-C_{14}H_9$ индуктивное смещение электронной плотности каскадно передается через систему связей, вызывая существенную модификацию ρ(r) всех углеводородных фрагментов. Это коррелирует с изменением ширины запрещённой зоны.

Полученные результаты демонстрируют эффективность совместного использования DFT и QTAIM для направленного дизайна структуры органических полупроводников с наперёд заданными полупроводниковыми параметрами.

Данное исследование позволяет увеличить базу данных по электронному строению гетероциклических соединений, что позволит в дальнейшем выявить закономерности «структура-свойство» и может положительно отразиться на разработке качественных методов макроинкрементирования [19].

Библиографический список:

1. **Wang, C.** Semiconducting π-conjugated systems in field-effect transistors: a material odyssey of organic electronics / C. Wang, H. Dong, W. Hu, Y. Liu, D. Zhu // Chemical Reviews. – 2012. – V. 112. – I. 4. – P. 2208-2267. DOI: 10.1021/cr100380z.

2. **Gershenson, M.E.** Colloquium: electronic transport in single-crystal organic transistors / M.E. Gershenson, V. Podzorov, A.F. Morpurgo // Reviews of Modern Physics. – 2006. – V. 78. – I. 3. – P. 973-989. DOI: 10.1103/RevModPhys.78.973.

3. **Anthony, J.E.** Functionalized acenes and heteroacenes for organic electronics / J.E. Anthony // Chemical Reviews. – 2006. – V. 106. – I. 12. – P. 5028-5048. DOI: 10.1021/cr050966z.
4. **Figueira-Duarte, T.M.** Pyrene-based materials for organic electronics / T.M. Figueira-Duarte, K. Müllen // Chemical Reviews. – 20011. – V. 111. – I. 11. – P. 7260-7314. DOI: 10.1021/cr100428a.
5. **Metrangolo, P.** Halogen versus hydrogen / P. Metrangolo, G. Resnati // Science. – 2008. – V. 321. – № 5891. – P. 918-919. DOI: 10.1126/science.1162215.
6. **Бейдер, Р.** Атомы в молекулах: Квантовая теория / Р. Бейдер. – М.: Мир, 2001. – 532 с.
7. **Popelier, P.L.A.** Atoms in molecules: an introduction / P.L.A. Popelier. – Essex: Pearson Education, 2000. –164 p.
8. **Чернова, Е.М.** Исследование электронного строения молекулы нафталина и его радикалов / Е.М. Чернова, Е.А. Мирошниченко, М.А. Рихмайер, М.Ю. Орлов, Ю.Д. Орлов // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия, – 2022. – №3(49). – С. 125-129. DOI: 10.26456/vtchem2022.3.15.
9. **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.
10. **Чернова, Е.М.** Электронное строение свободного радикала 9-флуоренил в рамках QTAIM / Е.М. Чернова, Ю.Д. Орлов, Е.А. Мирошниченко // Физико-химические основы кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2025. – Вып. 17. – С. 514-521. DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.514.
11. **Frisch, M.J.** Gaussian 16 (Revision B. 0.1) / M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel et al. – Wallingford CT: Gaussian Inc., 2016.
12. **Keith, T.A.** AIMAll (Version 11.09.18, Professional). – Режим доступа: www.url: http://aim.tkgristmill.com. – 1.06.2026.
13. **Игнатов, С.К.** Квантовохимическое моделирование атомно-молекулярных процессов / С.К. Игнатов. – Нижний Новгород: Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 2019. – 94 с.
14. **Lu, L.** An improved B3LYP method in the calculation of organic thermochemistry and reactivity / L. Lu, H. Hu, H. Hou, B. Wang // Computational and Theoretical Chemistry. – 2013. – V. 1015. – P. 64-71. DOI: 10.1016/j.comptc.2013.04.009.
15. **Маманд, Д.М.** Теоретическое и экспериментальное исследование антрадитиофена в различных растворах / Д.М. Маманд, Х.Х. Расул, П.Х. Омер, Х.М. Квадр // Конденсированные среды и межфазные границы. 2022. – Т. 24. – № 2. – С. 227-242. DOI: 10.17308/kcmf.2022.24/9263.
16. **Kronik, L.** Piecewise linearity, freedom from self-interaction, and a Coulomb asymptotic potential: Three related yet inequivalent properties of the exact density functional / L. Kronik, S. Kümmel // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2020. – V. 22. – I. 29. – P. 16467-16481. DOI: 10.1039/D0CP02564J.
17. **Zhan, C.-G.** Ionization potential, electron affinity, electronegativity, hardness, and electron excitation energy: molecular properties from density functional theory orbital energies / C.-G. Zhan, J.A. Nichols, D.A. Dixon // Journal of Physical Chemistry A. – 2003. – V. 107. – I. 20. – P. 4184-4195. DOI: 10.1021/jp0225774.
18. **Zhang, G.** Comparison of DFT methods for molecular orbital eigenvalue calculations / G. Zhang, C. Musgrave // Journal of Physical Chemistry A. – 2007. – V. 111. – I. 8. – P. 1554-1561. DOI: 10.1021/jp061633o.
19. **Орлов, Ю.Д.** Определение энтальпий образования органических свободных радикалов по энергиям диссоциации связей. Сообщение 4. Алкилзамещенные производные фенила и бензила / Ю.Д. Орлов, В.О. Лавров, Ю.А. Лебедев // Известия Академии наук. Серия химическая. – 2001. – № 6. – С. 923-929. DOI: 10.1023/A:1011392513152.

References:

1. Wang C., Dong H., Hu W., Liu Y., Zhu D. Semiconducting π-conjugated systems in field-effect transistors: a material odyssey of organic electronics, *Chemical Reviews*, 2012, vol. 112, issue 4, pp. 2208-2267. DOI: 10.1021/cr100380z.
2. Gershenson M.E., Podzorov V., Morpurgo A.F. Colloquium: electronic transport in single-crystal organic transistors, *Reviews of Modern Physics*, 2006, vol. 78, issue 3, pp. 973-989. DOI: 10.1103/RevModPhys.78.973.
3. Anthony J.E. Functionalized acenes and heteroacenes for organic electronics, Chemical Reviews, 2006, vol. 106, issue 12, pp. 5028-5048. DOI: 10.1021/cr050966z.
4. Figueira-Duarte T.M., Müllen K. Pyrene-based materials for organic electronics, *Chemical Reviews*, 2011, vol. 111, issue 11, pp. 7260-7314. DOI: 10.1021/cr100428a.

5. Metrangolo P., Resnati G. Halogen versus hydrogen, *Science*, 2008, vol. 321, no. 5891, pp. 918-919. DOI: 10.1126/science.1162215.
6. Bader R.F.W. *Atoms in molecules: a quantum theory, International series of monographs on chemistry*, Oxford, Clarendon Press, 1990, vol. 22, 438 p.
7. Popelier P.L.A. *Atoms in molecules: an introduction*. Essex, Pearson Education, 2000, 164 p.
8. Chernova E.M., Miroshnichenko E.A., Rihmaier M.A., Orlov M.Yu., Orlov Yu.D. Issledovanie e`lektronnogo stroeniya molekuly` naftalina i ego radikalov [Investigation of the electronic structure of the naphthalene molecule and its radicals]. *Vestnik Tverskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya «Khimiya» [Bulletin of Tver State University. Chemistry Series]*, 2022, no. 3(49), pp. 125-129. DOI: 10.26456/vtchem2022.3.15. (In Russian).
9. 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. (In Russian).
10. Chernova E.M., Orlov Yu..D., Miroshnichenko E.A. Elektronnoe stroenie svobodnogo radikala 9-fluorenil v ramkakh QTAIM [The electronic structure of free radical 9-fluorenyl within the framework of QTAIM], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2025, issue 17, pp. 514-521. DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.514. (In Russian).
11. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 16 (Revision B. 0.1), Wallingford CT, Gaussian Inc., 2016.
12. Keith T.A. AIMAll (Version 11.09.18, Professional). Available at: www.url: http://aim.tkgristmill.com. (accessed 1.06.2025).
13. Ignatov S.K. *Kvantovokhimicheskoe modelirovanie atomno-molekulyarnykh protsessov* [Quantum chemical modeling of atomic and molecular processes]. Nizhniy Novgorod, Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod publ., 2019. 94 p. (In Russian).
14. Lu L., Hu H., Hou H., Wang B. An improved B3LYP method in the calculation of organic thermochemistry and reactivity, *Computational and Theoretical Chemistry*, 2013, vol. 1015, pp. 64-71. DOI: 10.1016/j.comptc.2013.04.009.
15. Mamand D. M., Rasul H.H., Omer P.K., Qadr H.M. Theoretical and experimental investigation on ADT organic semiconductor in different solvents, *Kondensirovannye sredy i mezhfaznye granitsy [Condensed Matter and Interphases]*, 2022, vol. 24, no.2, pp. 227-242. DOI: 10.17308/kcmf.2022.24/9263.
16**.** Kronik L., Kümmel S. Piecewise linearity, freedom from self-interaction, and a Coulomb asymptotic potential: Three related yet inequivalent properties of the exact density functional, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2020, vol. 22, issue 29, pp. 16467-16481. DOI: 10.1039/D0CP02564J.
17. Zhan C.-G., Nichols J.A., Dixon D.A. Ionization potential, electron affinity, electronegativity, hardness, and electron excitation energy: molecular properties from density functional theory orbital energies*, Journal of Physical Chemistry A*, 2003, vol. 107, issue 20, pp. 4184-4195. DOI: 10.1021/jp0225774.
18. Zhang G., Musgrave C. Comparison of DFT methods for molecular orbital eigenvalue calculations**,** *Journal of Physical Chemistry A*, 2007, vol. 111, issue 8, pp. 1554-1561. DOI: 10.1021/jp061633o.
19. Orlov Yu.D., Lavrov V.O., Lebedev Yu.A. Determination of enthalpies of formation of organic free radicals based on bond dissociation energies. 4. Alkyl-substituted derivatives of phenyl and benzyl, *Russian Chemical Bulletin*, 2001. vol. 50, issue 6, pp. 963-969. DOI: 10.1023/A:1011392513152.