

**ТЕХНОЛОГИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ
TECHNOLOGY OF ORGANIC SUBSTANCES**

Научная статья

УДК 544.43:547-316

DOI: 10.26730/1999-4125-2023-3-44-51

**РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗАРЯДОВ НА АТОМАХ СПИРТОВ
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ****Пучков Сергей Вениаминович,
Непомнящих Юлия Викторовна**

Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева

*для корреспонденции: psv.toos@kuzstu.ru

**Информация о статье**

Поступила:

25 января 2023 г.

Одобрена после
рецензирования:

15 июня 2023 г.

Принята к публикации:

20 июня 2023 г.

Опубликована:

30 июня 2023 г.

Ключевые слова:спирты, квантово-химические
расчеты, заряды, химический
сдвиг, конформации, «кресло»,
«ванна».**Аннотация.**

Для предельных одноатомных спиртов метанола, этанола, 1-пропанола, 2-пропанола, 1-бутанола, 2-метил-2-пропанола, 1-пентанола, 2,2-диметил-1-пропанола, 1-гексанола, 2-гексанола, 3-гексанола, а также циклогексанола в конформациях кресло и ванна методом теории функционала плотности (DFT) с гибридным функционалом B3LYP в базисе 6-311+G (d, p) были рассчитаны эффективные заряды на всех типах атомов углерода. Анализ заселенности проводили методом натуральных валентных орбиталей (NBO) по схемам Малликена (MPA) и по натуральной схеме (NPA). Показано, что при расчете по схеме NPA наблюдается хорошая корреляция в изменениях заряда и химического сдвига на α -углеродном атоме при увеличении длины углеводородного скелета в ряду метанол, этанол, 1-пропанол. Так же и для вторичных неразветвленных спиртов с увеличением длины углеводородного скелета заместителей при α -углеродном атоме в ряду 2-пропанол, 2-гексанол, 3-гексанол увеличиваются заряд и величина химического сдвига на α -углеродном атоме. По мере замещения атомов водорода при α -углеродном атоме в ряду метанол, этанол, 2-пропанол, трет-бутиловый спирт на метильные радикалы увеличивается заряд и величина химического сдвига. Хорошая корреляция между величинами зарядов и химическим сдвигом наблюдается для конформаций «кресло» и «ванна» циклогексанола. Расчеты по схеме MPA дают заметно большие расхождения между расчетными величинами зарядов на углеродных атомах перечисленных спиртов и экспериментальными значениями химических сдвигов.

Для цитирования: Пучков С.В., Непомнящих Ю.В. Расчет распределения зарядов на атомах спиртов квантово-химическими методами // Вестник Кузбасского государственного технического университета. 2023. № 3 (157). С. 44-51. DOI: 10.26730/1999-4125-2023-3-44-51, EDN: LAMDVМ

Одноатомные предельные спирты – одни из важнейших продуктов или полупродуктов промышленного органического синтеза и биотехнологии. Области использования спиртов чрезвычайно обширны: растворители, моторные топлива или высокооктановые добавки к ним, пищевая промышленность, медицина, парфюмерия и бытовая химия, промышленные синтезы органических продуктов. Так метанол, например, используется как сырье в производстве

формальдегида [1], используемого в лакокрасочной промышленности, и получения фенолформальдегидных смол [2], в производстве биотоплив [3-5], в производстве важнейшей высокооктановой добавки к бензинам – метил трет-бутилового эфира [6, 7]. Этанол – как антисептик, компонент лекарственных препаратов в пищевой промышленности, производстве сложных эфиров и противообледенительных жидкостей [8]. 2-Пропанол – в производстве антифризов и как добавка, улучшающая технические характеристики бензинов [9]. 1-Бутанол и 2-Бутанол используют в качестве биотоплив или высокооктановой добавки к моторным топливам [10, 11], в синтезах душистых веществ, в бытовой химии. 2-Метил-2-пропанол (трет-бутиловый спирт) в производстве трет-бутилхлорида, трет-бутил фенола [12]. Циклогексанол – важнейший полупродукт в производствах капролактама и адипиновой кислоты [13, 14].

В проектировании промышленных химическо-технологических процессов большое значение имеет прогнозирование реакционной способности органических соединений и, в частности, спиртов в химических реакциях. Одним из основных методов определения реакционной способности соединений при нуклеофильной, электрофильной и радикальной атаках является расчет функций фукуи, также называемых индексами реакционной способности, с применением квантово-химических методов [15]. Определение величин функций фукуи включает анализ заселенности и расчет зарядов на всех атомах молекулы исследуемого соединения [15]. Среди прочих подходов для анализа заселенностей чаще всего используют схему Малликена (MPA) и натуральную схему (NPA). Результаты расчетов с применением указанных схем различаются и, следовательно, в разной степени близки к экспериментальным данным. Целью настоящей работы является выбор наиболее подходящей схемы анализа заселенностей и расчета эффективных зарядов на атомах углерода предельных одноатомных спиртов.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Оптимизацию геометрии всех структур проводили методом функционала плотности (DFT) с гибридным функционалом B3LYP в базисе 6-311+G (d, p), как в работах [16, 17]. Анализ заселенности проводили методом натуральных валентных орбиталей (NBO) как по схеме Малликена (MPA), так и по натуральной схеме (NPA) [18].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для 12 одноатомных спиртов метанола (I), этанола (II), 1-пропанола (III), 2-пропанола (IV), 1-бутанола (V), 2-метил-2-пропанола (VI), 1-пентанола (VII), 2,2-диметил-1-пропанола (VIII), 1-гексанола (IX), 2-гексанола (X), 3-гексанола (XI) и циклогексанола (XII) в конформациях кресло и ванна были рассчитаны эффективные заряды на всех атомах (рис.).

Величины эффективных зарядов на всех типах атомов углерода в этих спиртах представлены в Табл. 1.

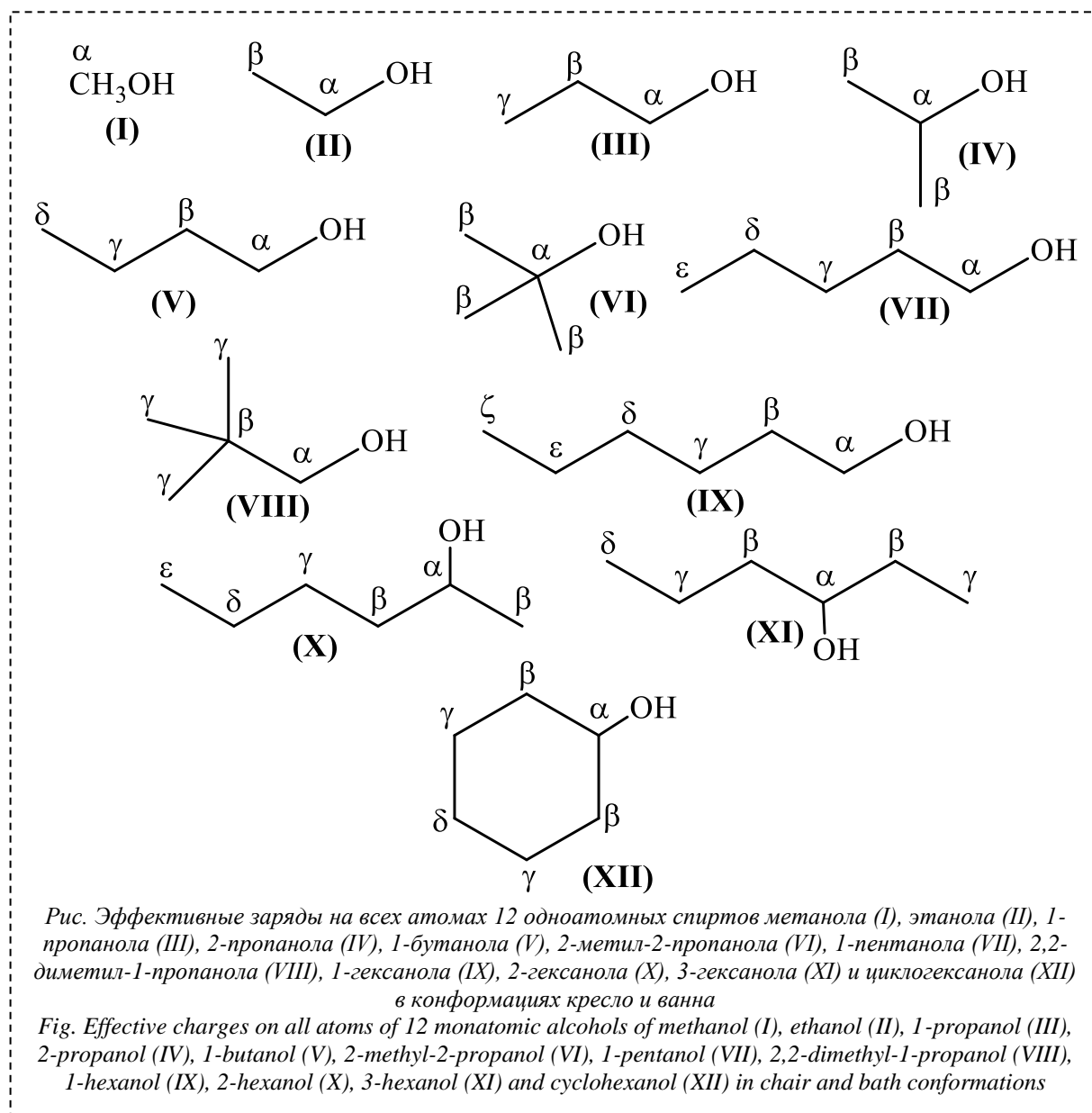
В качестве критерия правильности результатов расчета приняли величину химического сдвига ядер ^{13}C (δ в м.д. относительно ТМС) [19] (Табл. 1). Чем выше значение химического сдвига, тем меньше заселенность атома углерода и тем выше должен быть его заряд.

Из Табл. 1 видно, что расчеты по схеме NPA для неразветвленных первичных спиртов показывают, как можно было ожидать, увеличение заряда и химического сдвига на α -углеродном атоме при увеличении длины углеводородного скелета в ряду метанол, этанол, 1-пропанол. Дальнейшее увеличение числа атомов углерода в ряду 1-бутанол, 1-пентанол, 1-гексанол практически не сказывается на величинах заряда и химического сдвига на α -углеродном атоме.

Такая же зависимость наблюдается и для вторичных неразветвленных спиртов, т.е. увеличение длины углеводородного скелета заместителей при α -углеродном атоме в ряду 2-пропанол, 2-гексанол, 3-гексанол приводит к увеличению заряда и химического сдвига на α -углеродном атоме.

В ряду метанол, этанол, 2-пропанол, трет-бутиловый спирт по мере замещения атомов водорода при α -углеродном атоме на метильные радикалы увеличивается заряд и величина химического сдвига.

Расчеты по схеме MPA показывают, что при переходе от метанола к этанолу, происходит увеличение заряда на α -углеродном атоме также, как и при расчетах по схеме NPA. В ряду 1-пропанол, 1-бутанол, 1-пентанол наоборот заряд на α -углеродном атоме снижается с ростом углеводородной цепи. В молекуле 1-гексанола заряд на α -углеродном атоме выше, чем на



соответствующем атоме углерода 1-пентанола. Такое изменение заряда на α -углеродных атомах перечисленных спиртов плохо коррелирует с экспериментальными значениями величин химического сдвига. Заряды на α -углеродном атоме 2-пропанола и 2-гексанола равны, а при переходе к 3-гексанолу заряд на α -углеродном атоме снижается. Такое изменение зарядов плохо согласуется с изменением (увеличением) химического сдвига на α -углеродном атоме в ряду 2-пропанол, 2-гексанол, 3-гексанол.

Так же, как и при расчетах методом NPA результаты, полученные с применением метода МРА, показывают, что в ряду метанол, этанол, 2-пропанол, трет-бутиловый спирт по мере замещения атомов водорода при α -углеродном атоме на метильные радикалы увеличивается заряд, что хорошо коррелирует с изменением (увеличением) величины химического сдвига.

В молекуле этанола по мере удаления от гидроксильной группы при переходе от α -углеродного к β -углеродному атому наблюдается согласованное снижение как величины химического сдвига, так и величин зарядов, рассчитанных по схемам NPA и МРА.

В молекуле 1-пропанола по мере удаления от гидроксильной группы при переходе от α -углеродного к γ -углеродному атому наблюдается согласованное снижение как величины химического сдвига, так и величин зарядов, рассчитанных по схеме NPA.

Таблица 1. Величины эффективных зарядов на атомах углерода одноатомных спиртов. (Метод функционала плотности (DFT) с гибридным функционалом B3LYP в базисе 6-311+G (d, p) по схеме Малликена (MPA) и по натуральной схеме (NPA))
 Table 1. Values of effective charges on carbon atoms of monoatomic alcohols. (Density Functional Method (DFT) with Hybrid Functionality B3LYP in Basis 6-311 + G (d, p) by Malliken population analysis (MPA) and Natural population analysis (NPA))

Спирт	Атом С	Заряд		Химический сдвиг ядер ^{13}C (δ в м.д. относительно ТМС) [19].
		MPA	NPA	
Метанол	1	-0.279	-0.203	50.2
Этанол	1	-0.189	-0.025	57.8
	2	-0.445	-0.605	18.2
1-Пропанол	1	-0.316	-0.019	64.2
	2	-0.112	-0.410	25.9
	3	-0.495	-0.576	10.3
2-Пропанол	1*	-0.489	-0.598	25.3
	2	-0.021	0.118	64.0
1-Бутанол	1	-0.353	-0.016	62.9
	2	-0.145	-0.407	36.0
	3	-0.135	-0.383	20.3
	4	-0.540	-0.568	15.2
2-Метил-2-пропанол	1	0.037	0.247	68.9
	2*	-0.465	-0.590	31.2
1-Пентанол	1	-0.370	-0.015	63.2
	2	-0.204	-0.404	33.6
	3	-0.133	-0.379	29.4
	4	-0.129	-0.377	23.8
	5	-0.595	-0.570	15.3
2,2-Диметил-1-Пропанол	1	-0.365	-0.012	73.3
	2	0.247	-0.110	32.7
	3*	-0.475	-0.572	26.2
1-Гексанол	1	-0.362	-0.015	62.1
	2	-0.277	-0.404	32.9
	3	-0.112	-0.377	25.8
	4	-0.165	-0.373	31.9
	5	-0.145	-0.377	23.0
	6	-0.631	-0.569	14.2
2-Гексанол	1	-0.521	-0.588	23.5
	2	-0.021	0.131	67.2
	3	-0.267	-0.397	39.2
	4	-0.152	-0.381	28.2
	5	-0.208	-0.376	23.2
	6	-0.601	-0.570	14.3
3-Гексанол	1	-0.603	-0.577	10.1
	2	-0.081	-0.400	30.5
	3	-0.178	0.135	72.2
	4	-0.209	-0.394	39.4
	5	-0.130	-0.382	19.2
	6	-0.604	-0.569	14.3
Циклогексанол (кресло)	1	-0.306	0.130	70.4
	2,4	-0.235	-0.401	35.8
	3,5	-0.312	-0.383	25.1
	6	-0.307	-0.381	26.3
Циклогексанол (ванна)	1	-0.343	0.121	70.4
	2,4	-0.232	-0.410	35.8
	3,5	-0.328	-0.391	25.1
	6	-0.249	-0.392	26.3

Результаты расчета зарядов методом МРА для 1-пропанола в меньшей степени соответствуют величинам химического сдвига, на β -углеродном атоме 1-пропанола оказывается максимальный заряд, тогда как величина химического сдвига равномерно снижается от α -углеродного к γ -углеродному атому.

Результаты расчетов по схеме НРА как для конформации «кресло», так и для конформации «ванна» показывают максимальный заряд на α -углеродном атоме, что соответствует максимальному химическому сдвигу. Заряды на γ - и δ -углеродных близки в обеих конформациях, как и величины химических сдвигов для углеродных атомов в этих положениях. В конформации «кресло» заряд на γ -углеродных атомах немного меньше заряда на δ -углеродных атомах циклогексанола, что хорошо соответствует величинам химических сдвигов на этих атомах. Для конформации «ванна» напротив заряд на γ -углеродных атомах немного больше заряда на δ -углеродных атомах спирта, что не согласуется с экспериментальными значениями химических сдвигов. Величина заряда на β -углеродных атомах циклогексанола в обеих конформациях минимальна, что не подтверждается величиной химического сдвига.

Расчетные величины зарядов на всех типах атомов углерода циклогексанола конформаций «кресло» и «ванна», полученные с применением схемы МРА, плохо согласуются с величинами химических сдвигов. Не наблюдается никакой определенной зависимости величины заряда углеродного атома от его расположения в молекуле циклогексанола по отношению к гидроксильной группе.

Таким образом, результаты расчетов зарядов на атомах углерода предельных одноатомных спиртов, наиболее приближенные к экспериментальным данным, получаются с использованием метода НРА.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мамалиев Р. А. [и др.] Анализ способа получения формальдегида на железомолибденовых катализаторах и пути его интенсификации // Вестник технологического университета. 2015. Т. 18. № 24. С. 38-40.
2. Хасин А. А., Минюкова Т. П. Современные направления переработки метанола // Катализ в химической и нефтехимической промышленности. 2021. Т. 21. № 4. С. 247-258. (doi: 10.18412/1816-0387-2021-4-247-258)
3. Gupta R. [et al.] Life cycle assessment of biodiesel production from rapeseed oil: Influence of process parameters and scale // Bioresource Technology. 2022. № 360. 127532. (doi: 10.1016/j.biortech.2022.127532).
4. Rezki B. [et al.] Biodiesel production from rapeseed oil and low free fatty acid waste cooking oil using a cesium modified natural phosphate catalyst // RSC Adv. 2020. № 10. P. 41065–41077. (doi: 10.1039/d0ra07711a).
5. Dworakowska S., Bednarski S., Bogdal D. Production of biodiesel from rapeseed oil // 1st World Sustainability Forum, 1-30 November 2011. URL: <https://wsforum.org/> (дата обращения: 09.03.2023).
6. Харалдина П. С. Землянский Е. О. Перспективы производства и использования метил-трет-бутилового эфира // Инновационная траектория развития современной науки: становление, развитие, прогнозы: сборник статей V Международной научно-практической конференции. Петрозаводск. 2021. С. 67-71.
7. Тарасенко Р. Ю., Бурляева Е. В. Функциональное моделирование производства метил-трет-бутилового эфира // Вестник МИТХТ. 2013. Т. 8. № 5. С. 136-140.
8. Vimmerstedt L. J., Bush B., Peterson S. Ethanol Distribution, Dispensing, and Use: Analysis of a Portion of the Biomass-to-Biofuels Supply Chain Using System Dynamics // PLoS ONE. 2012. V. 7. № 5. e35082. (doi:10.1371/journal.pone.0035082).
9. Le H. T. Q., Lee E. Y. Biological production of 2-propanol from propane using a metabolically engineered type I methanotrophic bacterium // Bioresource Technology. 2022. № 362. 127532. (doi: 10.1016/j.biortech.2022.127532).
10. Zheng J., Oyedepo G., Truhlar D. G. Kinetics of the hydrogen abstraction reaction from 2-butanol by OH radical // J. Phys. Chem. A. 2015. V. 119. № 50. P. 12182-12192. (doi: 10.1021/acs.jpca.5b06121).
11. Ерсайн С. Б., Алмагамбетова М. Ж. Влияние бутанола на показатели дизельного топлива // Наукосфера. 2021. Т. 1. № 3. С. 93-95. (doi: 10.5281/zenodo.4575144).
12. Алкилирование фенола трет-бутанолом в реакторе со стекающей пленкой / Терехов А. В. [и др.] // Журнал прикладной химии. 2021. Т. 94. № 5. С. 562-569. (doi: 10.31857/S0044461821050030).
13. Перкель А. Л., Воронина С. Г. Жидкофазное окисление циклогексана. Циклогексилгидропероксид, циклогексанол и циклогексанон, механизмы образования и превращения // Известия Академии наук. Серия химическая. 2019. № 3. С. 480-492.
14. Пучков С. В., Непомнящих Ю. В. Оценка реакционной способности СН-связей циклогексанона в реакциях с трет-бутилпероксирадикалом квантово-химическими методами // Кинетика и катализ. 2021. Т. 62.

№ 4. С. 426-436. (doi: 10.31857/S0453881121040122).

15. Крылов Е. Н. [и др.] Функция Фукуи как индекс реакционной способности монозамещенных бензола в реакции ароматического нитрования // Химия и химическая технология. 2012. Т. 55. № 2. С. 37-43.

16. De Vleeschouwer F. [et al.] Electrophilicity and Nucleophilicity Index for Radicals // Org. Lett. 2007. V. 9. № 14. P. 2721-2724. (doi: 10.1021/ol071038k).

17. Sun X.-H. [et al.] Calculation of the rate constants for concerted elimination reaction class of hydroperoxyl-alkyl-peroxyl radicals // Theor. Chem. Acc. 2017. 136:64. P. 1-12. (doi: 10.1007/s00214-017-2086-y).

18. Gangadharan R., Sampath K. First Order Hyperpolarizabilities, NPA and Fukui Functions of Cyclohexanone by Density Functional Theory Method // Acta Physica Polonica A. 2015. V. 127. № 3. P. 748-752. (doi:10.12693/APhysPolA.127.748).

19. Преч Э., Бюльманн Ф., Аффольтер К. Определение строения органических соединений. Таблицы спектральных данных. М. : Мир; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. 438 с.

© 2023 Авторы. Эта статья доступна по лицензии Creative Commons «Attribution» («Атрибуция») 4.0 Всемирная (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Об авторах:

Пучков Сергей Вениаминович, кандидат хим. наук, доцент, Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева, (650000, Россия, г. Кемерово, ул. Весенняя, 28), psv.toos@kuzstu.ru
Непомнящих Юлия Викторовна, кандидат хим. наук, доцент, Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева, (650000, Россия, г. Кемерово, ул. Весенняя, 28), nyuv.toos@kuzstu.ru

Заявленный вклад авторов:

Пучков Сергей Вениаминович – постановка исследовательской задачи, обзор соответствующей литературы, проведение квантово-химических расчетов, анализ данных, выводы, написание текста.
Непомнящих Юлия Викторовна – обзор соответствующей литературы, проведение квантово-химических расчетов, анализ данных, выводы, написание текста.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

Original article

CHARGE DISTRIBUTION FOR ALCOHOL ATOMS CALCULATED BY QUANTUM CHEMICAL METHODS

Sergey V. Puchkov,
Yulia V. Nepomnyashchikh

T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University

*for correspondence: psv.toos@kuzstu.ru



Article info

Received:
25 January 2023

Accepted for publication:
15 June 2023

Accepted:
20 June 2023

Published:

Abstract.

For saturated monoatomic alcohols of methanol, ethanol, 1-propanol, 2-propanol, 1-butanol, 2-methyl-2-propanol, 1-pentanol, 2,2-dimethyl-1-propanol, 1-hexanol, 2-hexanol, 3-hexanol, as well as cyclohexanol in conformations, "chair" and "boat" by the method of density functional theory (DFT) with hybrid functionality B3LYP in basis 6-311 + G (d, p), effective charges were calculated for all types of carbon atoms. Orbital occupation analysis was performed by natural valence orbitals (NBO) using Mulliken schemes (MPA) and natural scheme (NPA). It was shown that when calculated according to the NPA scheme, there is a good correlation in charge changes and chemical shift on the α -carbon atom with an increase in the length of the hydrocarbon skeleton in the methanol, ethanol, 1-propanol row. Also, for secondary unbranched alcohols, with an increase in the length of the

30 June 2023

Keywords: alcohols, quantum chemical calculation, charges, chemical shift, conformation, "chair", "boat"

hydrocarbon skeleton of substituents at a α -carbon atom in the series 2-propanol, 2-hexanol, 3-hexanol, the charge and the value of chemical shift on the α -carbon atom increase. As hydrogen atoms are replaced at a α -carbon atom in the methanol, ethanol, 2-propanol, tert-butyl alcohol row for methyl radicals, the charge and the amount of chemical shift increases. A good correlation between charge values and chemical shift is observed for the "chair" and "boat" cyclohexanol conformation. Calculations according to the MPA scheme give a noticeably greater discrepancy between the calculated values of charges on carbon atoms of the listed alcohols and experimental values of chemical shifts.

For citation: Puchkov S.V., Nepomnyashchikh Yu.V. Charge distribution for alcohol atoms calculated by quantum chemical methods. *Vestnik Kuzbasskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*=Bulletin of the Kuzbass State Technical University. 2023; 3(157):44-51. (In Russ., abstract in Eng.). DOI: 10.26730/1999-4125-2023-3-44-51, EDN: LAMDMV

REFERENCES

1. Mamaliev R.A. [i dr.] Analiz sposoba poluchenija formal'degida na zhelo-zomolibdeno-vyh katalizatoroh i puti ego intensivizatsii. *Vestnik tekhnologicheskogo universiteta*. 2015; 18(24):38-40.
2. Hasin A.A., Minjukova T.P. Sovremennye napravlenija pererabotki metanola. *Kataliz v himicheskoy i neftehicheskoy promyshlennosti*. 2021; 21(4):247-258. (doi: 10.18412/1816-0387-2021-4-247-258)
3. Gupta R. [et al.] Life cycle assessment of biodiesel production from rapeseed oil: Influence of process parameters and scale. *Bioresource Technology*. 2022; 360:127532. (doi: 10.1016/j.biortech.2022.127532).
4. Rezki B. [et al.] Biodiesel production from rapeseed oil and low free fatty acid waste cooking oil using a cesium modified natural phosphate catalyst. *RSC Adv*. 2020; 10: 41065–41077. (doi: 10.1039/d0ra07711a).
5. Dworakowska S., Bednarz S., Bogdal D. Production of biodiesel from rapeseed oil. *1st World Sustainability Forum*. 2011. URL: <https://wsforum.org/> (дата обращения: 09.03.2023).
6. Haraldina P.S., Zemljanskij E.O. Perspektivy proizvodstva i ispol'zovaniya metil-tret-butilovogo jefira. *Innovacionnaja traektorija razvitiya sovremennoj nauki: stanovlenie, razvitie, prognozy: sbornik statej V Mezhdunarodnoj nauchno-prakticheskoy konferencii*. Petrozavodsk. 2021. S. 67-71.
7. Tarasenko R.Ju., Burljaeva E.V. Funkcional'noe modelirovanie proizvodstva metil-tret-butilovogo jefira. *Vestnik MITHT*. 2013. T. 8. № 5. S. 136-140.
8. Vimmerstedt L.J., Bush B., Peterson S. Ethanol Distribution, Dispensing, and Use: Analysis of a Portion of the Biomass-to-Biofuels Supply Chain Using System Dynamics. *PLoS ONE*. 2012; 7(5):35082. (doi:10.1371/journal.pone.0035082).
9. Le H.T.Q., Lee E.Y. Biological production of 2-propanol from propane using a metabolically engineered type I methanotrophic bacterium. *Bioresource Technology*. 2022; 362:127532. (doi: 10.1016/j.biortech.2022.127835).
10. Zheng J., Oyedepo G., Truhlar D.G. Kinetics of the hydrogen abstraction reaction from 2-butanol by OH radical. *J. Phys. Chem. A*. 2015; 119(50):12182-12192. (doi: org/10.1021/acs.jpca.5b06121).
11. Ersajn S.B., Almagambetova M.Zh. Vlijanie butanola na pokazateli dizel'nogo topliva. *Naukosfera*. 2021; 1(3):93-95. (doi: 10.5281/zenodo.4575144).
12. Terekhov A.V. [et al.] Alkylation of phenol with tert-butanol in a draining-film reactor. *Russian Journal of Applied Chemistry*. 2021; 94(5):569-575.
13. Perkel A.L., Voronina S.G. Liquid-phase oxidation of cyclohexane. Cyclohexyl hydroperoxide, cyclohexanol, and cyclohexanone, mechanisms of formation and transformation. *Russian Chemical Bulletin*. 2019; 68(3):480-492. doi: 10.1007/s11172-019-2443-1.
14. Puchkov S.V., Nepomnyashchikh Y.V. Evaluation of the reactivity of cyclohexanone C-H bonds in reactions with tert-butylperoxy radical by quantum chemical methods. *Kinetics and Catalysis*. 2021; 62(4):479-487. doi: 10.1134/S0023158421040108.
15. Krylov E.N. [i dr.] Funkcija Fukui kak indeks reakcionnoj sposobnosti monozame-shennyh benzola v reakcii aromatischeskogo nitrovanija. *Himija i himicheskaja tehnologija*. 2012; 55(2):37-43.
16. De Vleeschouwer F. [et al.] Electrophilicity and Nucleophilicity Index for Radicals. *Org. Lett*. 2007; 9(14):2721-2724. (doi: 10.1021/ol071038k).
17. Sun X.-H. [et al.] Calculation of the rate constants for concerted elimination reaction class of hydroperoxyl-alkyl-peroxyl radicals. *Theor. Chem. Acc*. 2017; 136:64:1-12. (doi: 10.1007/s00214-017-2086-y).
18. Gangadharan R., Sampath K. First Order Hyperpolarizabilities, NPA and Fukui Functions of Cyclohexanone by Density Functional Theory Method. *Acta Physica Polonica A*. 2015; 127(3):748-752. (doi:10.12693/APhysPolA.127.748).
19. Badertscher M., Bühlmann P., Pretsch E. Structure Determination of Organic Compounds. Tables of Spectral Data. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 2009. 443 p. doi: 10.1007/978-3-540-93810-1.

© 2023 The Authors. This is an open access article under the CC BY license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

The authors declare no conflict of interest.

About the authors:

Sergey V. Puchkov, C. Sc. in Chemistry, T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University, (28 street Vesennyyaya, Kemerovo, 650000, Russian Federation), e-mail: psv.toos@kuzstu.ru

Yulia V. Nepomnyashchikh, C. Sc. in Chemistry, T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University, (28 street Vesennyyaya, Kemerovo, 650000, Russian Federation), e-mail: nyuv.toos@kuzstu.ru

Contribution of the authors:

Sergey V. Puchkov – formulation of a research problem, review of relevant literature, conducting quantum chemical calculations, data analysis, conclusions, writing a text.

Yulia V. Nepomnyashchikh – review of relevant literature, conducting quantum chemical calculations, data analysis, conclusions, writing text..

All authors have read and approved the final manuscript.

