

**ДОЛГОЖИВУЩИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ ИОНЫ  
АРОМАТИЧЕСКИХ ИМИДОВ<sup>1</sup>**

Хатымов Р.В., Муфтахов М.В.

*Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН, rustem@anrb.ru.*

Благодаря своим физико-химическим свойствам, имидпроизводные ароматических соединений используются в солнечных элементах, органических светодиодах и лазерах, в качестве флуоресцентных маркеров в молекулярной биологии и др. В настоящей работе методом масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов исследованы процессы взаимодействия низкоэнергетических электронов с молекулами малеимида, фталимида, индиго и двух изомеров нафталимида. Для всего ряда соединений обнаружены долгоживущие молекулярные отрицательные ионы (МОИ), что говорит о положительном адиабатическом электронном сродстве (ЕА) молекул. Измеренные величины времени жизни относительно автоотщепления в области тепловой энергии захватываемых электронов составили от 82 пкс (для фталимида) до 12 нс (индиго), и коррелируют с величинами ЕА молекул. В отсутствие литературных данных, последние были оценены с помощью квантово-химических расчетов B3LYP/6-311+G(d,p) по разнице полных энергий молекулы и МОИ, а также на основе теоремы Купманса по энергетическому положению нижних вакантных молекулярных орбиталей (НВМО), рассчитанных методом HF/6-31G. Из анализа построенных корреляционных диаграмм МО предложено объяснение причин различия величин ЕА для изомерных молекул 2,3- и 1,8-нафталимида (ЕА = 1.08 и 1.45 эВ, соответственно). В отличие от первой, НВМО второй молекулы представляет собой связывающую комбинацию НВМО нафталина и НВМО диформилимида. Близкое совпадение их энергий приводит к более значительной стабилизации энергии результирующей НВМО 1,8-нафталимида, что эквивалентно более высокому значению ЕА в рамках теоремы Купманса.

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке АН РБ и РФФИ, грант № 14-02-97028р\_поволжье\_a