

**ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ЭЛЕКТРОННОГО СРОДСТВА
ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ¹****Хатымов Р.В., Панкратьев Е.Ю.***Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН, rustem@anrb.ru.*

Полициклические ароматические углеводороды (ПАУ) представляют интерес как с практической, так теоретической точки зрения. Строение и термодинамические свойства ПАУ изучены экспериментальными и теоретическими методами, однако полученные значения электронного сродства (ЕА) демонстрируют существенный разброс. В настоящей работе для ряда из 10 ката- и пери-конденсированных молекул ПАУ, содержащих от 2 до 5 бензольных колец, проведена оценка ЕА с помощью расчетов в приближениях RBE/ Λ_n , где $n = 2, 22, 3, 33$, реализованных в квантово-химическом пакете ПРИРОДА 11. Адиабатическое ЕА оценивалось как разница между полными энергиями оптимизированных нейтральной молекулы и аниона в основном состоянии. Установлено, что в целом методы дают результаты, близкие к доверенным экспериментальным значениям и сравнимые с таковыми популярного метода B3LYP/6-311G(d,p). Повышение гибкости базисного набора от Λ_2 до Λ_3 не приводит к улучшению точности, хотя значительно увеличивает время расчетов, тем не менее, оставаясь менее затратным, чем B3LYP.

Второй метод оценки ЕА был основан на теореме Купманса. С помощью процедуры линеаризации энергий граничных орбиталей ϵ_{HOMO} и ϵ_{VMO} , вычисленных методом RBE/ Λ_2 , и экспериментальных данных об ЕА, энергиях ионизации (IE) установлены следующие корреляционные зависимости:

$$\text{ЕА} = -1.0225 \cdot \epsilon_{\text{HOMO}} - 1.9992 \text{ и } \text{IE} = -1.2148 \cdot \epsilon_{\text{VMO}} + 1.2082.$$

Данные зависимости пригодны для быстрой оценки ЕА и IE, а также оказались применимы и для оценки вторых, третьих ЕА, IE и их сопоставления с данными электронно-трансмиссионной, фотоэлектронной спектроскопии

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 14-02-97028.