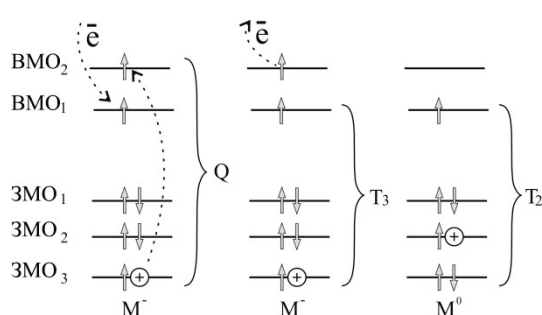


СТАБИЛЬНОСТЬ ИОНОВ ТЕТРАЦИАНОХИНОДИМЕТАНА¹

Хатымова Л.З., Кинзябулатов Р.Р., Хвостенко О.Г.

Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН.

Известно, что молекула тетрацианохинодиметана (TCNQ) легко присоединяет добавочный электрон и образует отрицательные молекулярные ионы (M^-) в резонансных состояниях (РС) при $E_{эл} = 0; 0,5; 1,5$ и $3,3$ эВ [1]. Ионы M^- всех четырех РС имеют большое время жизни (τ_a) относительно автоотщепления электрона ($\tau_a > 10$ мкс), что для последних трех РС является аномалией. В принципе, такая аномалия была объяснена ранее образованием ионов с электронной конфигурацией квартетной мультиплетности ($^4M^-$), которая создает спиновый запрет на быстрый распад иона в молекулу основного состояния. Распад без спинового запрета, а, следовательно, быстрый, возможен только в молекулярный триплет (Т). Но это, как правило, не происходит, поскольку обычно $E(^4M^-) < E(T)$ [2]. Однако, у TCNQ $E(T_1) = 1,85$ эВ, а значит, для РС при $3,3$ эВ неравенство не выполняется. Здесь большое τ_a обусловлено

Рис. 1. Схема распада M^- .

еще одним запретом – динамикой заполнения электронных вакансий иона в процессе его распада (рис. 1). После ухода электрона с VMO_2 при распаде иона остается триплет с дыркой на ZMO_3 , и для его превращения в T_1 необходим переход

электрона: $ZMO_1 \rightarrow ZMO_3$. Но это может происходить только в два шага (каскадом): $ZMO_2 \rightarrow ZMO_3$; $ZMO_1 \rightarrow ZMO_2$, где в результате первого шага возникает триплет T_2 . Однако $E(T_2) > 3,3$ эВ [3], что препятствует процессу. Распад осуществится минуя каскад, а, следовательно, – с задержкой во времени.

1. Хвостенко О. Г., Хатымова Л. З., Лукин В. Г., ... //Бутлеровские Сообщения, 2013 - Т. 35. - №8. - С.9-13.
2. O.G. Khvostenko, G.M. Tuimedov. //Rapid Commun. Mass Spectrom. – 2006. – V. 20, № 24. – P. 3699–3708.
3. Ritsko J.J., Brillson L.J., Sandman D.J.. // Solid State Communications. - 1977. - V. 24, № 1. - P. 109-112.

¹ Работа выполнена при поддержке АН РБ и РФФИ, грант № 14-02-97028р_поволжье_a