

**ОТЛИЧИТЕЛЬНЫЕ ОСОБЕННОСТИ МОЛЕКУЛ СТРУКТУРНЫХ  
ИЗОМЕРОВ ПОЛИАРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ В СВЕТЕ  
ТЕОРИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ<sup>1</sup>**

Хатымов Р.В., Муфтахов М.В., Щукин П.В.

*Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН, [rustem@anrb.ru](mailto:rustem@anrb.ru)*

Обширный класс соединений полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) имеет фундаментальное значение для изучения химических свойств веществ и практический интерес для органической электроники. Ранее нами было установлено [1], что молекулы большинства ПАУ при взаимодействии с низкоэнергетическими электронами в газофазных условиях образуют долгоживущие молекулярные отрицательные ионы (ДМОИ), и автонейтрализационное время жизни ( $\tau_a$ ) последних тем больше, чем выше электронное сродство молекул (ЕА). Величина ЕА варьируется в широких пределах даже в ряду структурно близких ПАУ. В частности, для линейно-конденсированной трициклической молекулы антрацена зарегистрированы ДМОИ с  $\tau_a = 41$  мкс, а величина ЕА составляет 0.53 эВ. Для фенантрена, "изогнутого" изомера с той же структурной формулой  $C_{14}H_{10}$ , величина ЕА составляет 0.12 эВ, а ДМОИ не обнаружены. В работе рассматриваются причины столь существенного различия ЕА молекул на основе анализа структуры их молекулярных орбиталей (МО). Нижние вакантные  $\pi^*$ -МО (НВМО) антрацена и фенантрена могут быть представлены как комбинация одних и тех же фрагментных  $\pi^*$ -НВМО цис-бутадиена и нафталина в различных ориентациях. Вследствие связывающего характера взаимодействия последних, НВМО антрацена стабилизирована по энергии, а НВМО фенантрена не является результатом такого взаимодействия, и стабилизирована слабо, что и объясняет малую величину ЕА фенантрена в рамках теоремы Купманса.

1. Хатымов Р.В., Туктаров Р.Ф., Муфтахов М.В. // Письма в ЖЭТФ, 2011. – Т. 93. – С. 482.

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