

**ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЗОНАНСНОГО ПРИСОЕДИНЕНИЯ
НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ МОЛЕКУЛАМИ
ОРОТОВОЙ КИСЛОТЫ ¹**

Щукин П.В., Муфтахов М.В.

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

В работе были изучены процессы образования и распада отрицательных ионов оротовой кислоты (витамин В13), представляющей собой производное урацила и, благодаря своей биологической активности, находящей широкое применение в медицине, фармакологии и косметологии. В результате было установлено, что специфические особенности процессов ионообразования в рассматриваемом соединении главным образом обусловлены присутствием в нем карбоксильной группы. Во-первых, в масс-спектре оротовой кислоты были зарегистрированы долгоживущие молекулярные отрицательные ионы, что обусловлено значительным положительным сродством к электрону нейтральной молекулы, что в свою очередь вызвано стабилизацией низшей вакантной молекулярной орбитали гетероцикла при ее взаимодействии с вакантной орбиталью заместителя соответствующей симметрии. Во-вторых, большинство диссоциативных процессов в оротовой кислоте происходит в области низких энергий. Причина этого заключается, с одной стороны, в возможности образования низкоэнтальпийных ионов с карбоксильной структурой и, с другой стороны, в генерации дополнительного π^* -состояния молекулярных ионов в области низких энергий с максимумом при 2.4 эВ, продуктами распада которого в основном и являются выше названные осколочные ионы. В-третьих, абсолютное суммарное сечение образования осколочных ионов в оротовой кислоте на порядок больше, чем в урациле. Вероятная причина этого факта кроется в акцепторной природе заместителя, который в составе молекулы способствует эффективному захвату и длительному удержанию добавочного электрона во всех резонансных состояниях.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 16-08-00384_a