

Оценка донорно-акцепторных свойств молекул полициклических углеводов по интегральным автокорреляционным характеристикам оптических спектров

© Долломатов^{1,2*} Михаил Юрьевич, Паймурзина²⁺ Наталья Халитовна
и Ковалева Элла Александровна²

¹ Физико-технический институт Башкирского государственного университета. ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия. E-mail: mdolomatov@bk.ru; paimurzina@inbox.ru

² Уфимский государственный нефтяной технический университет. ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450062. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (917) 4062706. E-mail: kovaleva-ugntu@yandex.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: полициклические ароматические углеводороды, оптические спектры, потенциал ионизации, сродство к электрону, параметр донорно-акцепторной способности, относительные интегральные автокорреляционные характеристики.

Аннотация

В данном исследовании установлена связь между относительными интегральными автокорреляционными характеристиками оптических спектров и донорно-акцепторными свойствами молекул полициклических ароматических углеводов (ПАУ). Показано, что установленные закономерности выполняются для углеводов определенной группы симметрии по Шёнфлису. Для регистрации оптических спектров поглощения использовались химически чистые и оптически прозрачные растворители. Энергетические спектры молекул были представлены в виде интегральных автокорреляционных функций (ИАКФ), рассчитанных с шагом интегрирования 1.5 нм по методике принятой в статистической радиофизике для описания случайных процессов. Физический смысл относительных ИАКФ заключается в относительной энергии взаимодействия электронных состояний в ультрафиолетовой области. Относительные ИАКФ равны отношению энергии спектра в УФ-области к энергии всего электронного спектра. Донорно-акцепторные характеристики рассматривались как разность потенциала ионизации (ПИ) и сродства к электрону (СЭ). Значения ПИ и СЭ молекул органических полупроводников определялись методом гибридного функционала плотности с использованием обменного функционала Бекке и корреляционного функционала Ли-Янга-Парра (B3LYP) в базе 6-311+G(d, p). В ходе эксперимента установлена линейная зависимость между относительным ИАКФ и параметром донорно-акцепторной способности молекул ПАУ для каждой группы симметрии. Адекватность модели подтверждена математической статистикой. Так коэффициент детерминации находится в пределах 0.95-0.99, средняя относительная ошибка для молекул группы симметрии C_{1h} составляет 2.93%, для молекул группы симметрии C_{2h} – 0.99%, для молекул групп C_1, C_s соответственно 1.88%, 2.52%. Полученные закономерности свидетельствуют о возможности определения донорно-акцепторных характеристик непосредственно из спектров оптического поглощения, минуя квантовые расчеты и эксперименты с использованием сложной аппаратуры.