

Прогнозирование вертикальных потенциалов ионизации органических соединений по интегральным характеристикам оптических спектров и числу протонов в молекулах

© Доломатов^{1,2*} Михаил Юрьевич, Латыпов¹ Камил Фаридович
и Ковалева²⁺ Элла Александровна

¹ Физико-технический институт. Башкирский государственный университет.
ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450076. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: (917) 453-85-16. E-mail: milana.1992@mail.ru

² Уфимский государственный нефтяной технический университет.

ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450062. Республика Башкортостан. Россия.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: оптические спектры, интегральная сила осцилляторов, дескрипторы, спектр-свойства, электронная структура, число протонов, число электронов, потенциал ионизации, азотсодержащие соединения, кислородсодержащие соединения.

Аннотация

Авторами обобщены результаты по изучению взаимосвязи первых вертикальных потенциалов ионизации со структурными и спектральными интегральными дескрипторами органических соединений – интегральными силами осцилляторов, определенных в видимой и (или) УФ-областях спектра и общим числом протонов (электронов) в органических соединениях, которая равна суммарному заряду всех атомов в составе молекул. Получены адекватные нелинейные регрессионные модели, связывающие потенциалы ионизации как функции от интегральных сил осцилляторов в диапазоне 190-760 нм и общего числа протонов (электронов) в органических молекулах. Установлены закономерности, позволяющие проводить оценки первых потенциалов ионизации органических кислород- и азотсодержащих соединений. Установленные закономерности интерпретируются как влияние на энергии высших занятых молекулярных орбиталей обменного и электростатического взаимодействий. Потенциалы ионизации откалиброваны по методу Хартри-Фока RHF-6-31G** на основе теоремы Купманса. Полученные модели позволяют проводить оценки первых потенциалов ионизации органических кислород- и азотсодержащих молекулярных систем по интегральным силам осцилляторов и числу протонов с достаточной для практических приложений точностью определения 0.4-9%. Результаты исследований могут быть практически использованы в химии, фотохимии, молекулярной электронике, фотонике и физической химии для изучения процессов переноса электронов, характеристик зонной структуры наночастиц. В работе приведены примеры, подтвержденные статистической обработкой данных.