

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННООБМЕННЫХ СВОЙСТВ В АРОМАТИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛАХ

А.В. Бервено, В.П. Бервено, С.Е. Когодеев

*Кемеровский государственный университет, г. Кемерово, ул. Красная 6
Институт Химии Твёрдого Тела и Механохимии, СО РАН
e-mail: bav53@list.ru, sadas@kemcity.ru*

Эффективность разделения газов в углеродных молекулярных ситах определяется шириной щелевых пор, размером молекул аренов, боковые поверхности которых являются стенками пор в элементарных нанотекстурных фрагментах. Элементарные нанотекстурные фрагменты углеродных молекулярных сит являются ассоциатами молекул аренов. Их электронно-обменные свойства оказывают большое влияние на эффективность разделения газов. В настоящее время доступным методом оценки электронно-обменных свойств является метод компьютерного квантово-химического расчёта.

Целью работы был выбор квантово-химических методов компьютерного моделирования, оптимальных для расчётов электронообменных свойств ароматических молекул. Требовалось сравнить экспериментально полученные библиографические данные с расчётными значениями потенциалов ионизации.

Ход работы: В программах Hyperchem и Chemoffice, при постоянной температуре, рассчитывали энергии образования ароматических молекул - нейтральных и их ионов (антрацен, тетрацен, нафталин, пицен, пирен, коронен и др.). Из их сравнения определяли потенциал ионизации и сродство к электрону. Полученные значения сопоставляли со справочными, экспериментальными данными[1].

В результате работы выяснили, что полуэмпирический метод расчёта PM3 (Hyperchem) и Gamess (в Chemoffice) позволяет точно оценивать значения потенциалов ионизации ароматических молекул (пирен, трифенилен, пицен, антрацен, нафталин и т.д.). Определили, что методом полуэмпирического расчёта TNDO можно рассчитывать сродство к электрону для большинства ароматических молекул.

Определили, что значения энергии образования модельных молекул и их ионов, рассчитанные методами INDO, AM1 и PM3, близки. Разница значений, полученных методами молекулярной и Ланжевеновской динамики, незначительна.

Литература:

1. Л.В. Гурвич и др. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. М.: Наука, 1974.- 351 с.