

М. Ю. Долوماتов (д.х.н., проф.)<sup>а</sup>, Н. Х. Паймурзина (асп.)<sup>б</sup>,  
Э. А. Ковалева (к.х.н., доц.)<sup>в</sup>, Т. Д. Хлебникова (д.х.н., проф.)<sup>г</sup>

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОДОНОРНЫХ СВОЙСТВ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ ПО ИНТЕГРАЛЬНЫМ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИМ И СТРУКТУРНЫМ ДЕСКРИПТОРАМ

Уфимский государственный нефтяной технический университет,

<sup>а</sup> кафедра технологии нефти и газа, <sup>б</sup> кафедра прикладных и естественнонаучных дисциплин,

<sup>в</sup> кафедра математики, <sup>г</sup> кафедра прикладной экологии

450062, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1; e-mail: mdolomatov@bk.ru, kovaleva-ugntu@yandex.ru, paimurzina@inbox.ru

M. Yu. Dolomatov, N. H. Paymurzina, E. A. Kovaleva, T. D. Khlebnikova

## DETERMINATION OF ELECTRON-DONATING PROPERTIES FOR POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBONS BY INTEGRAL SPECTROSCOPIC AND STRUCTURAL DESCRIPTORS

Ufa State Petroleum Technological University

1, Kosmonavtov Str., 450062, Ufa, Russia; e-mail: mdolomatov@bk.ru, kovaleva-ugntu@yandex.ru, paimurzina@inbox.ru

Предложен подход, позволяющий прогнозировать электронодонорные свойства по первым вертикальным потенциалам ионизации на основе структурных и интегральных спектроскопических дескрипторов полициклических ароматических углеводородов (ПАУ). В качестве спектрального интегрального дескриптора использован относительный эмпирический автокорреляционный параметр  $\mu$ , характеризующий отношение энергии спектра в УФ-области к энергии всего электронного спектра, а в качестве структурного дескриптора – сумма зарядовых чисел молекул полициклических ароматических углеводородов (ПАУ), равная общему числу протонов (электронов) молекул ПАУ. Установлена регрессионная нелинейная зависимость между первыми вертикальными потенциалами ионизации и относительным эмпирическим автокорреляционным параметром  $\mu$ , а также числом протонов в молекулах ПАУ. Потенциалы ионизации вычислены методом функционала плотности DFT с гибридным потенциалом B3LYP в базисе 6-31G\*\*. Все расчеты проводились с использованием пакета Gaussian 09. Расчеты хорошо согласуются с экспериментально определенными потенциалами ионизации. Ошибка находится в пределах ожидаемого диапазона для этого метода. Установленные закономерности интерпретируются в рамках моде-

In this paper, a novel approach to predict the electron-donor properties of the first vertical ionization potentials on the basis of structural and integral spectroscopic descriptors for polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) is proposed. As a spectral integral descriptor, the relative empirical autocorrelation parameter  $\mu$  is used which characterizes the ratio of the spectrum energy in the UV region to the energy of the entire electronic spectrum, and as a structural descriptor is the algebraic sum of the electric charges of the polycyclic aromatic hydrocarbons molecules, equal to the total number of protons (electrons) of PAHs molecules. The regression nonlinear relationship between the first vertical ionization potentials and the relative empirical autocorrelation parameter  $\mu$ , as well as the number of protons in PAHs molecules, is established. Ionization potentials (IPs) was calculated using DFT method at the level of hybrid potential B3LYP and 6-31G(d,p) basis set. All calculations were performed using the Gaussian 09 package. The calculations are in good agreement with the experimentally determined IPs. The error is within the expected range for this type of method. The established regularities are interpreted in the framework of the model on the predominant influence of exchange and Coulomb interactions on the energies of highest occupied molecular orbital. The obtained model

Дата поступления 03.06.19

ли о преобладающем влиянии на энергии высших занятых молекулярных орбиталей обменного и кулоновского взаимодействий. Полученная модель позволяет проводить оценки первых потенциалов ионизации органических полициклических молекулярных систем с достаточной для практических приложений точностью определения  $\pm 0.2$  эВ. Результаты исследований могут быть практически использованы в органической химии, молекулярной электронике, фотонике.

**Ключевые слова:** интегральные спектроскопические дескрипторы; оптические спектры; полициклические ароматические углеводороды; потенциал ионизации; структура-свойства; число протонов; число электронов; электронная структура; электронодонорная способность.

Значительный интерес для науки и техники представляют полициклические ароматические углеводороды (ПАУ), которые применяются при синтезе химических соединений, создании молекулярных устройств и сырья для синтеза графеноподобных структур<sup>1,2</sup>.

В связи с этим важно иметь информацию о свойствах молекул ПАУ, таких как потенциалы ионизации (ПИ), характеризующие донорно-акцепторные свойства молекул<sup>3</sup>. Экспериментальное определение ПИ, как правило, сопряжено с техническими трудностями, связанными как с самой техникой измерения, так и с получением вещества, его очисткой, возможной нестойкостью, агрессивностью, токсичностью, летучестью и т.п.

Современные методы оценки ПИ, основанные на фотоэлектронной спектроскопии<sup>4</sup>, характеризуются сложной аппаратурой и трудностью работы с метастабильными и многокомпонентными системами органических молекул. Поэтому актуальными остаются исследования в области масс-спектрометрии в химии, в частности разработка простых способов вычисления ПИ.

В ранее проведенных работах<sup>5–10</sup>, предложены интегральные спектроскопические дескрипторы (ИСД), характеризующие химическую и электронную структуру молекул, которые определяются по интегральным характеристикам спектров в видимом и УФ диапазоне 280–780 нм. В этих работах были обнаружены зависимости физико-химических свойств (ФХС) молекул и сложных веществ с ИСД. В результате проведенных исследований предложены методы оценки ПИ, основанные на определении ИСД.

В работе<sup>9</sup> в качестве спектрального интегрального дескриптора предложен относительный эмпирический автокорреляционный пара-

метр, обуславливающий электронные состояния молекул ПАУ. Этот параметр характеризует отношение энергии спектра в УФ-области к энергии спектра в видимом и УФ диапазонах и определяется по следующей формуле:

**Key words:** electron-donor ability; electronic structure; integral spectroscopic descriptors; ionization potential; number of electrons; number of protons; optical spectra; polycyclic aromatic hydrocarbons; structure-property.

метр, обуславливающий электронные состояния молекул ПАУ. Этот параметр характеризует отношение энергии спектра в УФ-области к энергии спектра в видимом и УФ диапазонах и определяется по следующей формуле:

$$\mu = \frac{\int_{\omega_0}^{\omega_1} \lg \varepsilon(\omega) \cdot \lg \varepsilon(\omega + \Delta\omega) d\omega}{\int_{\omega_0}^{\omega_2} \lg \varepsilon(\omega) \cdot \lg \varepsilon(\omega + \Delta\omega) d\omega} \quad (1)$$

где  $\mu$  — относительный эмпирический автокорреляционный параметр;

числитель — интегральная автокорреляционная функция (ИАКФ) в УФ области;

знаменатель — ИАКФ в УФ- и видимой областях спектра;

$\omega_0, \omega_1, \omega_2$  — границы спектра,  $10^{14}$  Гц;

$\Delta\omega$  — приращение аргумента (шаг),  $1.5 \cdot 10^{16}$  Гц;

$\lg \varepsilon(\omega), \lg \varepsilon(\omega + \Delta\omega)$  — молярные показатели поглощения при определенных частотах.

Известно, что молекулы ПАУ характеризуются корреляционными эффектами обменного и кулоновского взаимодействий электронов, которые влияют на их энергии ионизации<sup>3</sup>. Поэтому следует учитывать влияние на ПИ не только электронного состояния молекул ПАУ, но и кулоновского взаимодействия, которое зависит от зарядов всех атомных ядер. В качестве дескриптора, косвенно отражающего кулоновские взаимодействия в молекулах, можно использовать общее число протонов равное соответствующему числу электронов ( $N_e$ ).

Целью работы является проверка возможности прогнозирования ПИ на основе дескрипторов: относительных спектроскопических автокорреляционных параметров и полного числа протонов (электронов) в молекулах полициклических ароматических углеводородов.

$$\begin{aligned}
\Delta E = E(\mu, N) = E(\mu_0, N_0) &+ \frac{1}{1!} \left( \frac{\partial E(\mu_0, N_0)}{\partial \mu} (\mu - \mu_0) + \frac{\partial E(\mu_0, N_0)}{\partial N} (N - N_0) \right) + \\
&+ \frac{1}{2!} \left( \frac{\partial^2 E(\mu_0, N_0)}{\partial N^2} (N - N_0)^2 + 2 \frac{\partial^2 E(\mu_0, N_0)}{\partial \mu \partial N} (\mu - \mu_0)(N - N_0) + \frac{\partial^2 E(\mu_0, N_0)}{\partial \mu^2} (\mu - \mu_0)^2 \right) + \\
&+ \frac{1}{3!} \left( \frac{\partial^3 E(\mu_0, N_0)}{\partial \mu^3} (\mu - \mu_0)^3 + 3 \frac{\partial^3 E(\mu_0, N_0)}{\partial^2 \mu \partial N} (\mu - \mu_0)^2 (N - N_0) + \right. \\
&\left. + 3 \frac{\partial^3 E(\mu_0, N_0)}{\partial \mu \partial^2 N} (\mu - \mu_0)(N - N_0)^2 + \frac{\partial^3 E(\mu_0, N_0)}{\partial N^3} (N - N_0)^3 \right) + \dots = \quad (2) \\
&= a_0 + a_1 (\mu - \mu_0) + a_2 (N - N_0) + a_3 (N - N_0)^2 + a_4 (\mu - \mu_0)^2 + a_5 (\mu - \mu_0)(N - N_0) + \\
&+ a_6 (N - N_0)^3 + a_7 (\mu - \mu_0)^3 + a_8 (\mu - \mu_0)(N - N_0)^2 + a_9 (\mu - \mu_0)^2 (N - N_0) \dots
\end{aligned}$$

## Материалы и методы исследования

Исследованы химически чистые вещества из классов полициклических ароматических соединений гомологических рядов таких как: углеводороды, содержащие от одного до пяти линейно-аннелированных колец, перилены, пирены.

Спектры поглощения ПАУ регистрировались в химически чистых и оптически прозрачных растворах в диапазоне поглощения от 280 до 750 нм ( $15 \cdot 10^{14} - 4 \cdot 10^{14}$  Гц) с шагом 2 нм на спектрофотометре СФ-2000 с выходом на программы обработки спектров и базу данных на ЭВМ. Концентрации растворов не превышали  $10^{-3}$  моль/л. Спектры отдельных соединений были взяты из баз данных<sup>11</sup>. По спектрам молекул, согласно зависимости (1), были рассчитаны относительные эмпирические автокорреляционные параметры  $\mu$  спектров оптического поглощения молекул ПАУ.

Число протонов в молекуле ( $N_e$ ) соответствует суммарному числу протонов (электронов) всех входящих в нее атомов.

С помощью программы Gaussian-09 методом Флетчера-Пауэлла была проведена оптимизация геометрических параметров молекул ПАУ. Значения первых вертикальных ПИ проводились методом функционала электронной плотности DFT с гибридным потенциалом B3LYP с использованием валентно-расщепленной базисной функции 6-31G\*\*<sup>12,13</sup>.

Известно, что каждой молекулярной орбитали соответствует определенная энергия, приближенно характеризующая энергией удаления электрона с данной молекулярной орбитали — энергией ионизации молекулы. В молекулах, близких по химической природе, одного гомологического ряда значения потенциалов ионизации

электромагнитного взаимодействия колеблются в нешироких пределах<sup>14</sup>. В силу различия структурных формул и неодинаковости электронных спектров все соединения различаются по числу протонов  $N_e$  и по  $\mu$ -параметру. Рассмотрим функционал энергии молекулярных орбиталей молекул  $\Delta E$ , который может быть представлен непрерывной функцией от двух переменных —  $\mu$ -параметра и числа протонов. Будем считать, что  $\Delta E$  имеет непрерывные производные по  $(n + 1)$ -ый порядок включительно в окрестности точки  $(\mu_0, N_0)$ . Разложим его в окрестностях точки  $(\mu_0, N_0)$  в ряд Тейлора по степеням  $(\mu - \mu_0)$ ,  $(N - N_0)$ . Получим формулу (2), где коэффициенты  $a_i$ ,  $i = 0, 1, \dots$  не зависят от  $\mu$  и  $N_e$ .

Следовательно, можно предположить, что отклонение функционала энергии молекулярной орбитали  $\Delta E$  от некоторого начального значения  $(\mu_0, N_0)$  для определенного класса соединений будет характеризовать возмущение молекулярных орбиталей, и как следствие, оценивать значения соответствующих энергий ионизации.

Пусть  $\mu = 0$ ,  $N_0 = 0$ , т.е.  $\Delta E = IP$ . Тогда формула (2) примет следующий вид:

$$\begin{aligned}
IP = a_0 + a_1 \mu + a_2 N + a_3 N^2 + \\
+ a_4 \mu^2 + a_5 \mu N + a_6 \mu N^2 \quad (3)
\end{aligned}$$

Физический смысл коэффициентов (3) заключается, по нашему мнению, в характеристике возмущения функционала высших занятых молекулярных орбиталей (ВЗМО) различных порядков под влиянием структурных факторов обменного и кулоновского взаимодействий. Для прогноза значений ПИ в данной работе предлагается использовать феноменологическую полуэмпирическую модель (3).

## Результаты и их обсуждение

Энергия молекулы зависит не только от движения электронов, но и от относительного движения ядер входящих в нее атомов, и от вращения молекулы как целого. Сложный контур полосы свидетельствует, что она включает несколько электронных переходов. Сплошной характер может быть вызван диссоциацией и ионизацией.

Значения ПИ, полученные в результате квантово-химических расчетов, приведены в табл. 1.

Коэффициенты феноменологической полумпирической модели (3) для молекул ПАУ (51 соединение) рассчитывали методом наименьших квадратов. Статистическую обработку спектров поглощения проводили методом многофакторного регрессионного анализа с оценкой множественного коэффициента корреляции  $R$ , коэффициента детерминации  $R_2$ . Данные приведены в табл. 2.

Для оценки достоверности коэффициента корреляции была вычислена его средняя ошибка <sup>15</sup>:

при числе наблюдений от 30 до 100

$$S_r = \pm \sqrt{\frac{1-R^2}{n-1}}; \quad (4)$$

при числе наблюдений менее 30

$$S_r = \pm \sqrt{\frac{1-R^2}{n-2}}. \quad (5)$$

Для оценки величины полученной ошибки использовали статистический критерий достоверности  $t$

$$t = \frac{R}{S_r}. \quad (6)$$

Для нахождения табличного значения критерия Стьюдента при доверительной вероятности 0.95 число степеней свободы определяли по формуле

$$f = n - m - 1,$$

где  $n$  – число соединений;

$m$  – число параметров (без свободного члена) при переменных уравнения регрессии.

В нашем случае при числе соединений менее 30 и уровне значимости 0.05% критерий  $t$  достоверен, если он больше табличного значения при числе степеней свободы  $f = n - 7$ . Табличные значения критерия находили из таблицы Стьюдента. Если же число соединений более 30, то коэффициент корреляции достоверен, если критерий  $t$  больше или равен 3.

В нашем случае величина коэффициента корреляции более чем в 7 раз превышает табличное значение ошибки коэффициента корреляции, следовательно, он может считаться достоверным.

Подставляя в уравнение (3) значения  $\mu$  и  $N_e$  из табл. 1, получим нелинейную регрессионную модель, позволяющую прогнозировать значения ПИ. Результаты смоделированных ПИ приведены в табл. 2.

Адекватность модели подтверждена расчетной оценкой погрешностей (ошибок): абсолютная и относительная погрешности для углеводородов, содержащих от одного до пяти линейно-аннелированных колец, находятся в диапазоне от 0 до 0.17 эВ и от 0 до 2.45 %, соответственно; для периленов от 0 до 0.13 эВ и от 0 до 1.93 %, соответственно; для пиренов от 0 до 0.11 эВ и от 0 до 1.70 %, соответственно.

Поскольку предложенная модель является математическим отображением взаимосвязей между значениями ПИ,  $\mu$ -параметром и общим числом электронов с точностью, не превышающей 3%, можно говорить о возможности ее использования с целью повышения эффективности экспериментальных исследований, а именно повышения достоверности результатов ПИ, сокращения времени и средств на проведение реального эксперимента.




















Таким образом, установлены закономерности, связывающие ПИ, относительный автокорреляционный параметр  $\mu$  и общее число протонов (электронов) в диапазоне 280–780 нм для молекул полициклических ароматических соединений.














Построенная нами нелинейная регрессионная модель позволяет прогнозировать значения ПИ для ПАУ с достаточной для практических приложений точностью определения.

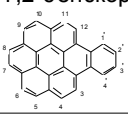
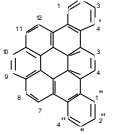
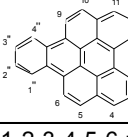
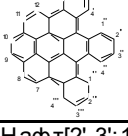
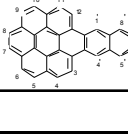
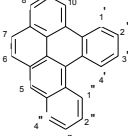
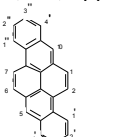
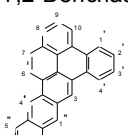
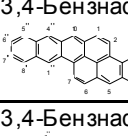
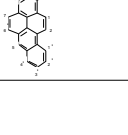
Погрешность определения электронодонорных свойств составляет 0.94–1.11 %, что допустимо для количественной оценки электронодонорных свойств ПАУ.

Модель может применяться для неизученных или мало изученных экспериментально соединений ПАУ. Результаты исследований могут быть практически использованы в химии, фотохимии, фотонике и для приблизительной оценки характеристик электронодонорной способности молекул.

## Характеристики молекул ПАУ

№	Название соединения	ПИ, эВ	$\mu$	N	ПИ по модели, эВ	$\Delta$ ПИ, эВ	$\delta$ , %
1	2	3	4	5	6	7	8
<b>Углеводороды, содержащие от одного до пяти линейно-аннелированных кольца</b>							
1	Гексагелицен (C <sub>26</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.97	0.901	172	6.99	0.02	0.35
2	Пентафен (C <sub>22</sub> H <sub>14</sub> ) 	7.01	0.875	146	6.94	0.07	1.01
3	3,4-Бензпентафен (C <sub>26</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.95	0.815	172	6.83	0.12	1.69
4	нафт[2',3':3,4]пентафен (C <sub>30</sub> H <sub>18</sub> ) 	6.80	0.744	198	6.71	0.09	1.36
5	антрацено[2',1':1,2]антрацен (C <sub>26</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.59	0.679	172	6.59	0.00	0.00
6	2,3-Бензпицен (C <sub>26</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.88	0.811	172	6.82	0.06	0.80
7	2,3-8,9-добензпицен (C <sub>30</sub> H <sub>18</sub> ) 	6.78	0.683	198	6.61	0.17	2.45
8	Тетрацен (C <sub>18</sub> H <sub>12</sub> ) 	6.41	0.626	120	6.35	0.06	0.87
9	1,2-бензтетрацен (C <sub>22</sub> H <sub>14</sub> ) 	6.53	0.734	146	6.65	0.12	1.84
10	1,2-3,4-добензтетрацен (C <sub>26</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.63	0.787	172	6.78	0.15	2.28
11	1,2-7,8-добензтетрацен (C <sub>26</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.65	0.655	172	6.55	0.10	1.52
12	1,2-9,10-добензтетрацен (C <sub>26</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.65	0.765	172	6.74	0.09	1.37
13	1,2-3,4-7,8-трибензтетрацен (C <sub>30</sub> H <sub>18</sub> ) 	6.82	0.823	198	6.83	0.01	0.21
14	1,2-3,4-7,8-9,10-тетрабензтетрацен (C <sub>34</sub> H <sub>20</sub> ) 	6.74	0.816	224	6.78	0.04	0.63
15	Гексафен (C <sub>26</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.60	0.745	172	6.71	0.11	1.60
16	Пентацен (C <sub>22</sub> H <sub>14</sub> ) 	6.07	0.404	146	6.05	0.02	0.37
17	1,2-бензпентацен (C <sub>26</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.18	0.503	172	6.30	0.12	1.97
18	1,2-8,9-добензпентацен (C <sub>30</sub> H <sub>18</sub> ) 	6.28	0.428	198	6.26	0.02	0.34
19	1,2-3,4-8,9-10,11-тетрабензпентацен (C <sub>38</sub> H <sub>22</sub> ) 	6.44	0.600	250	6.47	0.03	0.50
Средняя ошибка						0.07	1.11

Перилены							
1	2	3	4	5	6	7	8
1	1,2-бензперилен(C <sub>24</sub> H <sub>14</sub> ) 	6.22	0.485	158	6.25	0.03	0.55
2	1,2-10,11-добензперилен(C <sub>24</sub> H <sub>14</sub> ) 	6.23	0.412	184	6.11	0.12	1.87
3	1,2-11,12-добензперилен (C <sub>28</sub> H <sub>16</sub> ) 	5.98	0.378	184	6.03	0.05	0.85
4	1,2-5,6-добензперилен (C <sub>28</sub> H <sub>16</sub> ) 	5.91	0.359	184	5.98	0.07	1.24
5	2,3-8,9-добензперилен (C <sub>28</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.50	0.538	184	6.39	0.11	1.73
6	2,3-10,11-добензперилен (C <sub>28</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.60	0.650	184	6.59	0.01	0.15
7	1,12-2,3-Дибензперилен (C <sub>30</sub> H <sub>18</sub> ) 	6.81	0.807	172	6.81	0.00	0.00
8	1,12-2,3-8,9-трибензперилен (C <sub>30</sub> H <sub>18</sub> ) 	6.68	0.697	198	6.65	0.03	0.39
9	1,12-2,3-10,11-трибензперилен (C <sub>30</sub> H <sub>18</sub> ) 	6.88	0.903	198	6.89	0.01	0.18
10	антрацено[1',4':1,12]перилен (C <sub>30</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.39	0.530	196	6.37	0.02	0.38
11	1,12-0-Фенилен-2,3-10,11-добензперилен (C <sub>30</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.55	0.711	196	6.68	0.13	1.93
12	1,2-3,4-5,6-10,11-тетрабензантрацен (C <sub>36</sub> H <sub>18</sub> ) 	6.86	0.854	234	6.75	0.11	1.60
13	коронен(C <sub>24</sub> H <sub>12</sub> ) 	6.97	0.879	176	6.88	0.09	1.22

1	2	3	4	5	6	7	8
14	1,2-бензкоронен (C <sub>28</sub> H <sub>14</sub> ) 	6.76	0.845	182	6.85	0.09	1.35
15	1,2-5,6-добензкоронен (C <sub>32</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.76	0.760	208	6.72	0.04	0.53
16	1,2-7,8-добензкоронен (C <sub>32</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.59	0.695	208	6.63	0.04	0.68
17	1,2-3,4-5,6-трибензкоронен (C <sub>36</sub> H <sub>20</sub> ) 	6.66	0.751	236	6.63	0.03	0.48
18	Нафт[2',3':1,2]коронен (C <sub>36</sub> H <sub>20</sub> ) 	6.56	0.795	236	6.68	0.12	1.84
Средняя ошибка						0.06	0.94
<b>Пирены</b>							
1	1,2-3,4-Дибензпирен (C <sub>24</sub> H <sub>14</sub> ) 	6.70	0.692	158	6.59	0.11	1.70
2	3,4-8,9-Дибензпирен (C <sub>24</sub> H <sub>14</sub> ) 	6.43	0.669	158	6.54	0.11	1.66
3	1,2-Бензнафт[2'',3'':4,5]пирен (C <sub>28</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.51	0.581	184	6.43	0.08	1.26
4	3,4-Бензнафт[2'',3'':8,9]пирен (C <sub>28</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.12	0.472	184	6.21	0.09	1.42
5	3,4-Бензнафт[2'',3'':9,10]пирен (C <sub>28</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.41	0.531	184	6.33	0.08	1.24

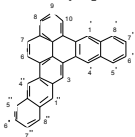
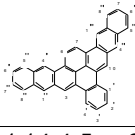
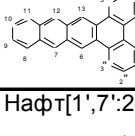
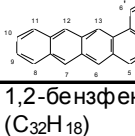
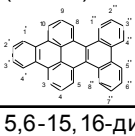
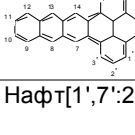
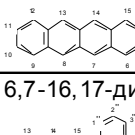
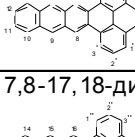
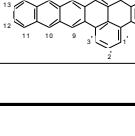
1	2	3	4	5	6	7	8
6	Динафт[2',3':1,2]-[2'',3'':4,5]пирен (C <sub>32</sub> H <sub>18</sub> ) 	6.57	0.653	210	6.58	0.01	0.23
7	1,2-бензнафт[2'',3'':4,5]-[2''',3''':8,9]пирен (C <sub>36</sub> H <sub>20</sub> ) 	6.48	0.534	236	6.51	0.03	0.42
8	1,14-4,5-добензпентацен (C <sub>28</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.66	0.765	184	6.72	0.06	0.94
9	Нафт[1',7':2,14]пентацен (C <sub>28</sub> H <sub>16</sub> ) 	6.15	0.460	184	6.18	0.03	0.50
10	1,2-бензфенантрено[9',10':6,7]пирен (C <sub>32</sub> H <sub>18</sub> ) 	6.73	0.775	210	6.70	0.03	0.48
11	5,6-15,16-добензгексацен (C <sub>32</sub> H <sub>20</sub> ) 	6.65	0.753	212	6.68	0.03	0.42
12	Нафт[1',7':2,16]гексацен (C <sub>32</sub> H <sub>18</sub> ) 	5.94	0.256	210	5.92	0.02	0.33
13	6,7-16,17-добензгептацен (C <sub>36</sub> H <sub>20</sub> ) 	6.65	0.707	236	6.62	0.03	0.50
14	7,8-17,18-добензоктацен (C <sub>40</sub> H <sub>22</sub> ) 	6.57	0.686	262	6.57	0.00	0.00
Средняя ошибка						0.05	0.79

Таблица 2

## Коэффициенты нелинейной регрессионной модели (3) для классов соединений ПАУ

Соединения	Коэффициенты модели (3)						R <sup>2</sup>	R	t	t <sub>таб</sub> (0.95; n-7)	Объем выборки
	a <sub>0</sub>	a <sub>1</sub>	a <sub>2</sub>	a <sub>3</sub>	a <sub>4</sub>	a <sub>5</sub>					
Все классы ПАУ	3.337	4.373	0.013	-1.5·10 <sup>-5</sup>	-0.656	-0.010	0.91	0.95	22.7	2.015	51
Углеводороды, содержащие от трех до пяти линейно- аннелированных колец	3.835	2.482	0.014	-2.2·10 <sup>-5</sup>	0.465	-0.008	0.88	0.93	11.2	2.179	19
Перилены	3.561	3.833	0.014	-3.6·10 <sup>-5</sup>	-1.547	-0.001	0.94	0.97	15.9	2.201	18
Пирены	1.401	7.502	0.022	-1.7·10 <sup>-5</sup>	-1.443	-0.022	0.93	0.96	12.7	2.365	14



## Литература

1. Мартинес-Дуарт Дж. М. Мартин-Палма Р. Дж., Агулло-Рueda Ф. Нанотехнологии для микро- и оптоэлектроники / пер. с англ. А. В. Хачояна под ред. Е. Б. Якимова. – М.: Техносфера, 2007. – 367 с.
2. Солнцев Ю.П., Пряхин Е.И., Вологжанина С.А., Петкова А.П. Нанотехнологии и специальные материалы. – СПб.: Химиздат, 2009. – 336 с.
3. Гурвич Л.В., Карачевцев Г.В., Кондратьев В.Н., Лебедев Ю.А., Медведев В.А. и др. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. – М.: Наука, 1974. – 351 с.
4. Вовна В.И. Фотоэлектронная спектроскопия молекул // Соросовский образовательный журнал. – 1999. – №1. – С.86-91.
5. Доломатов М.Ю., Ковалева Э.А., Латыпов К.Ф., Доломатова М.М., Ярмухаметова Г.У., Паймурзина Н.Х. Интегральные характеристики оптических спектров, как новый класс дескрипторов для сложных молекулярных систем // Бутлеровские сообщения. – 2019. – Т.57, №1. – С.1-14.
6. Доломатов М.Ю., Мукаева Г.Р. Способ определения потенциалов ионизации и сродства к электрону атомов и молекул методом электронной спектроскопии // Журнал прикладной спектроскопии. – 1992. – Т.56, №4. – С.570-574.
7. Dolomatov M.Yu., Mukaeva G.R., Shulyakovskaya D.O. Electron Phenomenological Spectroscopy and its Application in Investigating Complex Substances in Chemistry, Nanotechnology and Medicine // Journal of Materials Science and Engineering B. – 2013. – V.3, №3. – Pp.183-199.
8. Dolomatov M.Yu., Shulyakovskaya D.O., Mukaeva G.R., Jarmuhametova G.U., Latypov K.F. Simple characteristics estimation methods of material and molecule electronic structure // Journal of Materials Science and Engineering B. – 2012. – №4. – Pp.261-268.
9. Доломатов, М.Ю., Паймурзина Н.Х., Ковалева Э.А. Оценка донорно-акцепторных свойств молекул полициклических углеводородов по интегральным автокорреляционным параметрам оптических спектров // Бутлеровские сообщения. – 2018. – Т.53, №3. – С.28-37.
10. Доломатов М.Ю., Ковалева Э.А. Феноменологический подход к математическому анализу электронных спектров органических полупроводников // Нанотехнологии: разработка и применение – XXI век. – 2016. – № 4. – С.43-48.
11. Клар Э. Полициклические углеводороды / пер. с англ. В.В. Ершова, М.В. Горелика. – М.: Мир, 1971. – 678 с.
12. Malloci G., Cappellini G., Mattoni A., Mulas G. Electronic and optical properties of families of polycyclic aromatic hydrocarbons: a systematic (time-dependent) density functional theory study // Chemical Physics. – 2011. – V.384, №1-3. – Pp.19-27.

## References

1. Martinez-Duart J.M., Martin-Palma R. J., Agullo-Rueda F. [Nanotechnology for microelectronics and optoelectronics]. Amsterdam, Elsevier Publ., 2006, 279 p.
2. Solntsev Yu.P., Pryakhin E. I., Vologzhanina S.A., Petkova A.P. *Nanotekhnologii i spetsialnye materialy* [Nanotechnology and special materials]. St.Petersburg, Khimizdat Publ., 2009, 336 p.
3. Gurvich L.V., Karachevtsev G.V., Kondrat'ev, V.N., Medvedev V.A. et al. *Energii razryva khimicheskikh svyazei. Potentsialy ionizatsii i srodstvo k elektronu* [Chemical Bond Energies: Ionization Potentials and Electron Affinity]. Moscow, Nauka Publ., 1974, 351p.
4. Vovna V. I. *Fotoelektronnaya spektroskopiya molekul* [The photoelectron spectroscopy of molecules]. *Sorosovskii obrazovatelnyi zhurnal* [Soros Educational Journal], 1999, no.1, pp. 86-91.
5. Dolomatov M.Yu., Kovaleva E.A., Latypov K. F., Dolomatova M.M., Yarmuhametova G.U., Paymurzina N.Kh. *Integral'nyye kharakteristiki opticheskikh spektrov, kak novyy klass deskriptorov dlya slozhnykh molekulyarnykh sistem* [Integral characteristics of optical spectra, as a new class of descriptors for complex molecular systems]. *Butlerovskiyе soobshcheniya* [Butlerov Communications], 2019, vol.57, no.1, pp.1-14.
6. Dolomatov M.Yu., Mukaeva G.R. [Method for determining the ionization potential and electron affinity of atoms and molecules using electron spectroscopy]. *Journal of Applied Spectroscopy*, 1992, vol.56, no.4, pp.344-347.
7. Dolomatov M.Yu., Mukaeva G.R., Shulyakovskaya D.O. [Electron Phenomenological Spectroscopy and its Application in Investigating Complex Substances in Chemistry, Nanotechnology and Medicine]. *Journal of Materials Science and Engineering B*, 2013, vol.3, no.3, pp.183-199.
8. Dolomatov M.Yu., Shulyakovskaya D.O., Mukaeva G.R., Jarmuhametova G.U., Latypov K.F. [Simple characteristics estimation methods of material and molecule electronic structure]. *Journal of Materials Science and Engineering B*, 2012, no.4, pp.261-268.
9. Dolomatov M. Yu., Paymurzina N.H., Kovaleva E.A. *Otsenka donorno-akseptornykh svoystv molekul politsiklicheskikh uglevodorodov po integral'nym avtokorrelyatsionnym parametram opticheskikh spektrov* [Evaluation of donor-acceptor properties of polycyclic hydrocarbon molecules by the integral autocorrelation characteristics of the optical spectra]. *Butlerovskiyе soobshcheniya* [Butlerov Communications], 2018, vol.53, no.2, pp.28-37.
10. Dolomatov M. Yu., Kovaleva E.A., Paymurzina N.H. *Fenomenologicheskiiy podkhod k matematicheskomu analizu elektronnykh spektrov organicheskikh poluprovodnikov* [Phenomenological approach to mathematical analysis of the electron spectra of organic semiconductors]. *Nanotekhnologii: razrabotka i primeneniye – XXI vek* [Journal Nanotechnology: development and applications – XXI Century], 2016, no.4, pp.43-48.

13. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G.A., Nakatsuji H., Caricato M., Li X., Hratchian H.P., Izmaylov A.F., Bloino J., Zheng G., Sonnenberg J.L., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Montgomery J.A., Jr., Peralta J.E., Ogliaro F., Bearpark M., Heyd J.J., Brothers E., Kudin K.N., Staroverov V.N., Keith T., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A., Burant J.C., Iyengar S.S., Tomasi J., Cossi M., Rega N., Millam J.M., Klene M., Knox J.E., Cross J.B., Bakken V., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R.E., Yazyev O., Austin A.J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J.W., Martin R.L., Morokuma K., Zakrzewski V.G., Voth G.A., Salvador P., Dannenberg J.J., Dapprich S., Daniels A.D., Farkas O., Foresman J.B., Ortiz J.V., Cioslowski J., Fox D.J. Gaussian 09, Revision D.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2013.
14. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь.— М.: Высшая школа, 1984.— 295 с.
15. Фёрстер Э., Рёнц Б. Методы корреляционного и регрессионного анализа.— М.: Финансы и статистика, 1983.— 304 с.
11. Clar E. [Polycyclic Hydrocarbons]. Scotland, Academic Press Inc., 1964, 678 p.
12. Mallocci G., Cappellini G., Mattoni A., Mulas G. [Electronic and optical properties of families of polycyclic aromatic hydrocarbons: a systematic (time-dependent) density functional theory study]. *Chemical Physics*, 2011, vol.384, no.1-3, pp.19-27.
13. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G.A., Nakatsuji H., Caricato M., Li X., Hratchian H.P., Izmaylov A.F., Bloino J., Zheng G., Sonnenberg J.L., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Montgomery J.A., Jr., Peralta J.E., Ogliaro F., Bearpark M., Heyd J.J., Brothers E., Kudin K.N., Staroverov V.N., Keith T., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A., Burant J.C., Iyengar S.S., Tomasi J., Cossi M., Rega N., Millam J.M., Klene M., Knox J.E., Cross J.B., Bakken V., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R.E., Yazyev O., Austin A.J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J.W., Martin R.L., Morokuma K., Zakrzewski V.G., Voth G.A., Salvador P., Dannenberg J.J., Dapprich S., Daniels A.D., Farkas O., Foresman J.B., Ortiz J.V., Cioslowski J., Fox D.J. Gaussian 09, Revision D.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2013.
14. Krasnov K.S. *Molekuly i khimicheskaya svyaz* [Molecules and chemical bonding]. Moscow, Vysshaya Shkola Publ., 1984, 295 p.
15. Ferster E., Rents B. *Metody korrelyatsionnogo i regressionnogo analiza* [Methods of correlation and regressions analysis: translation from German]. Moscow, Finansy i statistika Publ., 1983, 304 p.