

Параметризация модели Аррениуса для оценки сродства к электрону молекул из данных о временах жизни отрицательных ионов

Маркова Ангелина Вячеславовна

Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы

Асфандиаров Наиль Лутфурахманович, д.ф.-м.н.

login.markova@yandex.ru

Методом масс-спектрометрии отрицательных ионов были исследованы молекулы NTCDА (C₁₄H₄O₆) и Indacenopicene (C₂₆H₁₂), являющиеся основой для синтеза элементов органической электроники. Измерено среднее время жизни (τ_a) отрицательных молекулярных ионов из экспериментальных данных:

$$\tau_a = -5,95 * \sqrt{\frac{M_n}{M_{SF6}}} * \ln\left(1 - \frac{I_0}{I}\right) \quad (1)$$

Энергия сродства к электрону нейтральной молекулы была оценена в приближении Аррениуса:

$$EA_a = \frac{-N + \ln\left(\frac{\tau_a}{t_0}\right) NkT + \ln\left(\frac{\tau_a}{t_0}\right) \varepsilon}{N - \ln\left(\frac{\tau_a}{t_0}\right)} \quad (2)$$

Результаты расчётов зависимости (τ_a) от энергии захваченного электрона (ε) воспроизводят экспериментальные зависимости, как показано на рис. 1 и 2.

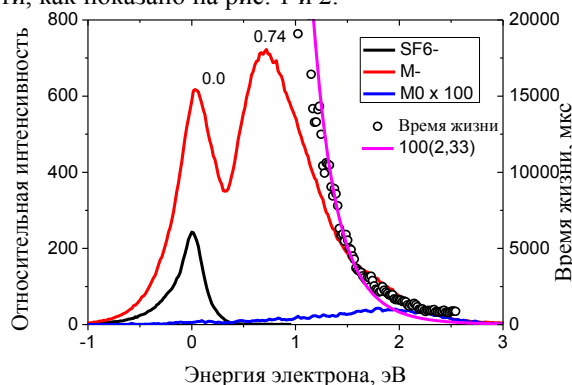


рис.1 Кривые эффективного выхода отрицательных ионов для NTCDА.

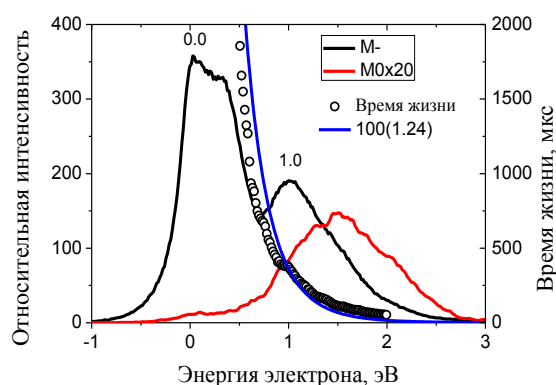


рис.2 Кривые эффективного выхода отрицательных ионов для Indacenopicene.

Зависимости $\tau_a(\varepsilon)$ (рис. 1 и 2) демонстрируют, что оценка времен жизни в рамках статистической модели Аррениуса для данных соединений дает значения сродства к электрону EA_a близкие к расчетным значениям, полученным методом DFT B3LYP/6-31+G(d).

Работа поддержана Российским научным фондом (грант № 19-13-00021).