

УДК 541.1+665.7.085(07)

Взаимосвязь цветовых характеристик и первых потенциалов ионизации молекул органических веществ

М. Ю. Доломатов, Г. У. Ярмухаметова

Уфимская государственная академия сервиса, г. Уфа, Россия

E-mail: muhagu@rambler.ru

Определены и изучены цветовые характеристики (ЦХ) ароматических и гетероароматических углеводов в колориметрической системе RGB. Установлены линейные зависимости между цветовыми характеристиками и потенциалами ионизации (ПИ) исследуемых веществ. Выводы подтверждены статистической обработкой данных.

PACS: 81.05.-t

Введение

Первые ПИ молекул являются важной физической характеристикой, отражающей электронное строение вещества. Потенциал ионизации имеет особое значение для количественной оценки энергетического состояния молекул при различных фотохимических, химико-технологических, радиохимических, биофизических процессах, а также в молекулярной и атомной физике, физике твердого тела и электронике.

Наиболее распространенным методом определения ПИ молекул является фотоэлектронная спектроскопия (ФЭС), которая использует эмиссию электронов под влиянием жесткого рентгеновского излучения [1]. Известны методы определения ПИ, основанные на исследовании спектров комплексов с переносом заряда [2], а также на исследовании интегральных характеристик спектров поглощения молекул в оптически прозрачных растворителях [3]. В теории цветности органических соединений имеются косвенные данные, свидетельствующие о том, что ПИ связаны с цветом [4]. Так, в рядах ароматических веществ с уменьшением ПИ цвет соединений смещается в синефиолетовую область спектра, что связано с уменьшением энергии возбуждения электронов при переходе с низшей занятой на высшую свободную молекулярную орбиталь [4].

Но несмотря на многочисленные эмпирические наблюдения, до сих пор не изучена количественная взаимосвязь ПИ и ЦХ молекул.

Цель данной работы — исследование взаимосвязей ЦХ молекул органических соединений и их ПИ.

Эксперимент

В качестве объектов исследования были выбраны молекулы конденсированных ароматических соединений, обладающих цветностью: 4 углеводорода, содержащих два линейно-аннелированных бензольных кольца; 13 углеводов, содержащих три линейно-аннелированных бензольных кольца; 4 углеводорода ряда дифенила; 20 углеводов ряда перилена; 7 углеводов ряда бисантена; 27 углеводов ряда пирена; 4 углеводорода ряда антрантрена; 14 серы и кислорода, содержащих конденсированные, гетероароматические соединения.

Эмпирические первые ПИ были выбраны авторами из источников [2, 3], первые ПИ отдельных соединений определялись по методике [3], по электронным абсорбционным спектрам поглощения соединений, в растворах оптически прозрачных растворителей. Спектры органических соединений в видимой области (380—780 нм) были выбраны из баз данных (БД) [5] и справочников [6—8]. Спектры отдельных ароматических соединений ряда антрацена и бензпирена были исследованы на спектрометре Specord по стандартной методике Клара [6].

Измерение ЦХ проводили в оптически прозрачных разбавленных растворителях в видимой и ближней УФ-областях, например в бензоле или толуоле. Определены ЦХ по стандарту МКО-64, по электронным абсорбционным спектрам поглощения в видимой области, для оптически прозрачных сред. Расчет цветовых координат проводили по соотношениям 1:5 [9, 10].

$$\begin{aligned} X &= \sum_{380}^{780} E(\lambda)\tau(\lambda)\bar{x}(\lambda); \\ Y &= \sum_{380}^{780} E(\lambda)\tau(\lambda)\bar{y}(\lambda); \\ Z &= \sum_{380}^{780} E(\lambda)\tau(\lambda)\bar{z}(\lambda), \end{aligned} \quad (1)$$

где X, Y, Z — координаты цвета системы МКО;

$E(\lambda)$ — ЦХ источника излучения;

$\tau(\lambda)$ — функция спектрального коэффициента пропускания в видимой области спектра;

$\bar{x}(\lambda), \bar{y}(\lambda), \bar{z}(\lambda)$ — функции сложения стандартного наблюдателя системы XYZ.

Поглощение света описывается законом Бугера, который гласит, что ослабление света прямо пропорционально его интенсивности и концентрации поглощающего вещества

$$\lg\left(\frac{1}{\tau(\lambda)}\right) = k(\lambda)cl = D,$$

где $\tau(\lambda)$ — коэффициент пропускания, безразмерная величина;

c — концентрация раствора вещества, г/л;

l — толщина поглощающего слоя раствора, см;

$k(\lambda)$ — коэффициент поглощения, л/(г·см);

D — оптическая плотность, безразмерная величина [11].

$$D = k(\lambda)cl; \quad \lg(\tau(\lambda)) = -k(\lambda)cl; \quad \tau(\lambda) = 10^{-k(\lambda)cl}.$$

В нашем случае толщина поглощающего слоя раствора равна 1 см, а коэффициент пропускания

$$\tau(\lambda) = 10^{-k(\lambda)c}.$$

Расчеты ЦХ проводили для концентрации 0,002 г/л, так как ранее эмпирически было установлено [12, 13], что при этой концентрации получали статистически наиболее адекватные результаты линейной аппроксимации ЦХ и ПИ.

Соотношения (1) в матричной форме выражаются следующим образом:

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E(\lambda_1)\bar{x}(\lambda_1) & E(\lambda_2)\bar{x}(\lambda_2) & \dots & E(\lambda_i)\bar{x}(\lambda_i) \\ E(\lambda_1)\bar{y}(\lambda_1) & E(\lambda_2)\bar{y}(\lambda_2) & \dots & E(\lambda_i)\bar{y}(\lambda_i) \\ E(\lambda_1)\bar{z}(\lambda_1) & E(\lambda_2)\bar{z}(\lambda_2) & \dots & E(\lambda_i)\bar{z}(\lambda_i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau(\lambda_1) \\ \tau(\lambda_2) \\ \dots \\ \tau(\lambda_{i-1}) \\ \tau(\lambda_i) \end{pmatrix}$$

или

$$\Phi_{XYZ} = \mathbf{E}_{XYZ}\mathbf{T},$$

где Φ_{XYZ} — вектор-столбец координат цвета исследуемого объекта в системе XYZ;

\mathbf{E}_{XYZ} — матрица произведений спектра стандартного источника излучения на функцию сложения стандартного колориметрического наблюдателя в системе XYZ;

\mathbf{T} — вектор-столбец соответствующих коэффициентов пропускания.

Вычисление координат цветности в системе МКО проводился по формулам [9, 10]:

$$x = \frac{X}{X+Y+Z}; \quad y = \frac{Y}{X+Y+Z}; \quad z = \frac{Z}{X+Y+Z}.$$

Для расчета цветовых координат в системе RGB использовали известные соотношения:

$$X = 0,4185R + 0,0912G + 0,0009B;$$

$$Y = 0,1588R + 0,2524G + 0,0025B;$$

$$Z = 0,0829R + 0,0157G + 0,1786B.$$

Нетрудно показать, что выполнимо следующее матричное уравнение:

$$\Phi_{XYZ} = \Phi \times \Phi_{RGB} \Rightarrow \Phi_{RGB} = \Phi^{-1} \times \Phi_{XYZ};$$

где $\Phi_{XYZ} = \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}$ — вектор-столбец, элементами которого являются цветовые координаты X, Y, Z ;

того же являются цветовые координаты X, Y, Z ;

$\Phi_{RGB} = \begin{pmatrix} R \\ G \\ B \end{pmatrix}$ — вектор-столбец, элементами которого являются цветовые координаты в системе RGB, скорректированные для определенного источника излучения;

того же являются цветовые координаты в системе RGB, скорректированные для определенного источника излучения;

$$\Phi = \begin{pmatrix} 0,4185 & 0,0912 & 0,0009 \\ 0,1588 & 0,2524 & 0,0025 \\ 0,0829 & 0,0157 & 0,1786 \end{pmatrix} \text{ — матрица переходных коэффициентов от системы RGB к системе XYZ;}$$

обратная матрица коэффициентов перехода от системы XYZ к системе RGB.

$$\Phi^{-1} = \begin{pmatrix} 2,769148 & -1,00058 & 0,0000516455 \\ -1,73101 & 4,590889 & -0,055539252 \\ -1,13318 & 0,06087 & 5,603962401 \end{pmatrix} \text{ —}$$

обратная матрица коэффициентов перехода от системы XYZ к системе RGB.

Вычисление цветового модуля $m = R + G + B$ и трехцветных координат цветности в системе RGB:

$$r = R/m; \quad g = G/m; \quad b = B/m.$$

Таким образом, цветовые характеристики системы RGB получили путем стандартного алгебраического преобразования ЦХ системы XYZ. Поэтому в данной методике расчета координаты RGB получаются зависящими от стандартных источников излучения и обозначаются соответствующими индексами:

$R_A, R_B, R_C, R_D, G_A, G_B, G_C, G_D, B_A, B_B, B_C, B_D$ — координаты цвета;

$r_A, r_B, r_C, r_D, g_A, g_B, g_C, g_D, b_A, b_B, b_C, b_D$ — координаты цветности;

R, G, B — координаты красного, зеленого, синего излучений, соответственно.

В табл. 1 приведены данные по определению ЦХ ароматических веществ, обладающих цветностью.

Результаты и их обсуждение

В ходе исследований было установлено, что для различных классов ароматических углеводов и гетероароматических соединений данная зависимость удовлетворительно выполняется при определенных ЦХ и источниках излучения. В табл. 2 приведены соответствующие значения

Таблица 1

Диапазоны ЦХ ароматических соединений (колориметрическая система RGB, источники излучения A, C)

Описание системы	Координаты цветности системы RGB, источник излучения A*			Координаты цвета системы RGB, источник излучения A*			Координаты цветности системы RGB, источник излучения C*			Координаты цвета системы RGB, источник излучения C*		
	r_A	g_A	b_A	R_A	G_A	B_A	r_C	g_C	b_C	R_C	G_C	B_C
Углеводороды, содержащие два линейно-аннелированных бензольных кольца	0,10— 0,11	-0,06— -0,06	0,95— 0,96	0,01— 1,43	-0,81— 0,00	0,06— 13,51	0,10— 0,11	-0,06— -0,06	0,95— 0,96	0,03— 6,39	-3,63— -0,01	0,23— 60,51
Углеводороды, содержащие три линейно-аннелированных бензольных кольца	0,05— 0,11	-0,06— 0,05	0,90— 0,96	0,01— 8,73	-2,99— 8,43	0,06— 149,76	0,06— 0,11	-0,06— 0,02	0,91— 0,96	0,03— 35,35	-12,85— 13,35	0,23— 513,30
Углеводороды ряда дифенила	0,10— 0,11	-0,06— -0,05	0,95— 0,96	0,07— 2,94	-1,63— -0,04	0,66— 28,8	0,10— 0,11	-0,06— -0,05	0,95— 0,96	0,30— 13,06	-7,23— -0,17	2,72— 127,84
Углеводороды ряда перилена	0,01— 0,35	-0,06— 0,51	0,19— 0,96	0,42— 174,11	-3,97— 233,13	3,86— 158,63	0,04— 0,15	-0,06— 0,27	0,58— 0,96	1,83— 146,89	-16,42— 253,65	16,88— 581,52
Углеводороды ряда бисантена	0,02— 0,39	-0,01— 0,49	0,13— 0,94	7,21— 197,85	-2,24— 248,14	65,26— 168,66	0,05— 0,17	-0,02— 0,29	0,54— 0,94	34,89— 159,79	-11,31— 270,42	447,85— 580,73
Углеводороды ряда пирена	-0,01— 0,39	-0,06— 0,53	0,12— 0,96	-2,49— 202,12	-4,08— 258,55	0,06— 177,27	0,02— 0,18	-0,06— 0,32	0,53— 0,96	0,03— 162,8	-16,78— 280,14	0,24— 600,82
Углеводороды ряда антантрена	0,01— 0,23	-0,05— 0,50	0,27— 0,95	1,95— 106,8	-1,79— 228,1	35,45— 162,07	0,04— 0,12	-0,05— 0,27	0,61— 0,95	14,72— 109,05	-7,63— 252,58	150,11— 564,96
Гетероароматические соединения	0,00— 0,17	-0,06— 0,55	0,28— 0,96	0,04— 70,65	-4,11— 233,75	13,51— 183,38	0,03— 0,10	-0,06— 0,31	0,59— 0,96	6,39— 82,9	-16,91— 263,57	60,52— 617,9

Примечание. Знак "*" — безразмерные величины.

Ранее была обнаружена линейная связь между физико-химическими свойствами углеводородных многокомпонентных систем и ЦХ [12], поэтому в первом приближении авторами рассмотрена линейная зависимость. Существование данной взаимосвязи подтверждено исследованием корреляции между ЦХ и ПИ стандартным методом наименьших квадратов в виде

$$PI = A_0 + A_1 q, \tag{2}$$

где ПИ — первые потенциалы ионизации;

A_0, A_1 — числовые коэффициенты, постоянные для данного класса органических соединений, ЦХ и типов источников;

q — ЦХ стандартных растворов в оптически прозрачных растворителях в системе XYZ.

коэффициентов зависимости (2) и результаты их статистической достоверности. Например, для углеводородов, содержащих два линейно-аннелированных бензольных кольца, соотношение (2) лучше выполняется для координат красного, синего и зеленого цветов в различных источниках излучения и при этом стандартное отклонение имеет наименьшее значение, представленное в табл. 2. Однако для некоторых классов соединений, таких как углеводороды ряда дифенила, антантрена и гетероароматических соединений наилучшим образом коррелируют с первыми ПИ координаты цветности g и b . Для углеводородов ряда пирена соотношение (2) хорошо выполняется для координат красного цвета во всех источниках излучения.

Таблица 2

Оптимальные зависимости (2) для определения первых ПИ молекул ароматических и гетероароматических соединений по ЦХ в системе RGB

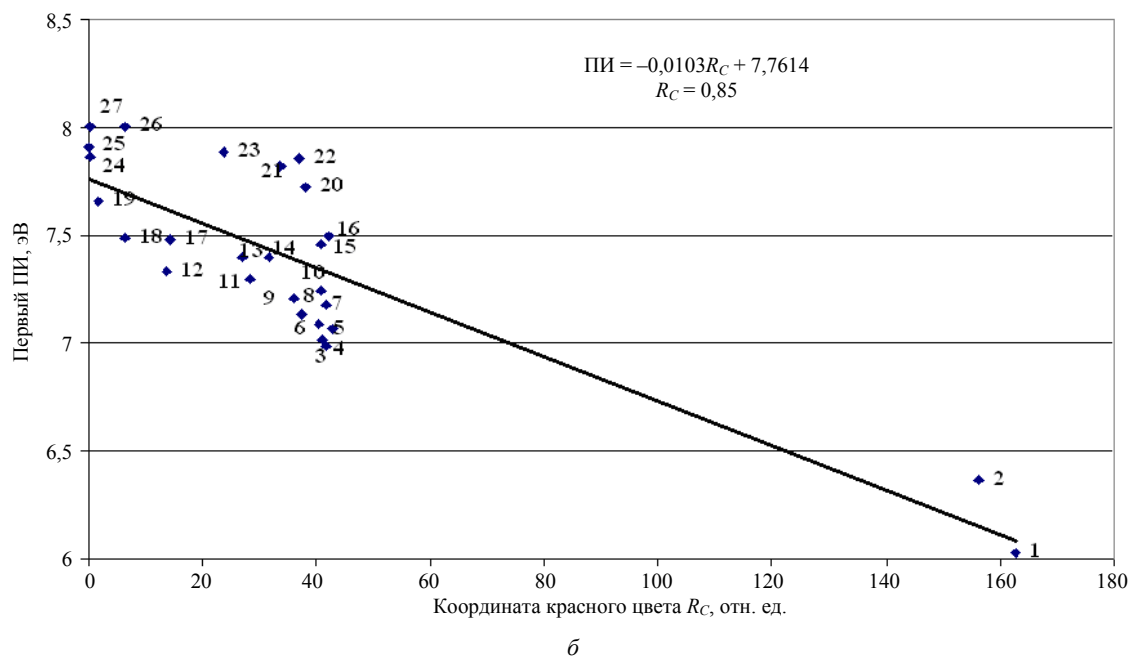
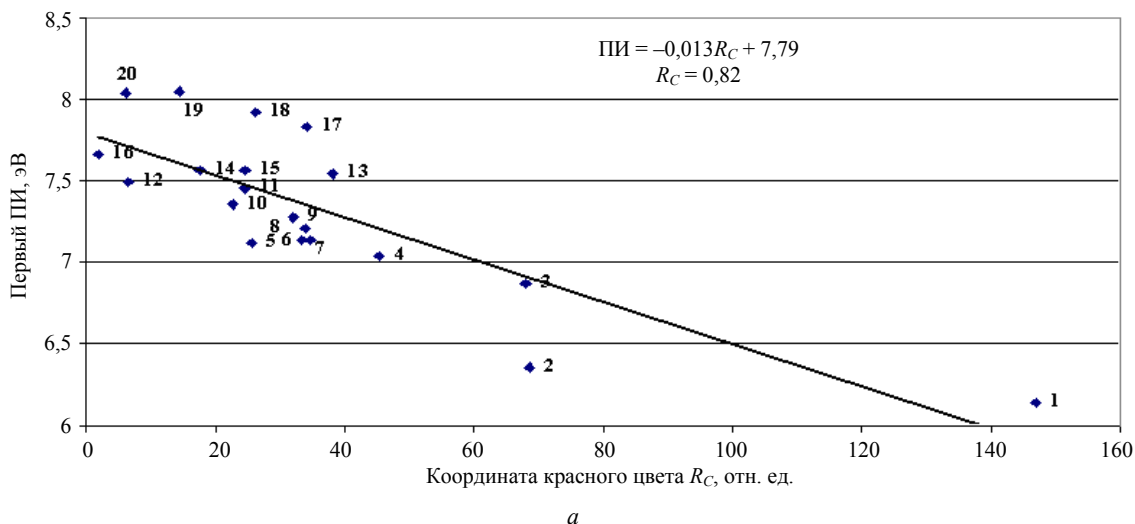
Описание системы	ЦХ	Коэффициент зависимостей (1) для потенциала ионизации $PI = A_0 + A_1 q$		Коэффициент корреляции	Коэффициент вариации, %	Стандартное отклонение
		A_1 , эВ	A_0 , эВ			
Углеводороды, содержащие два линейно-аннелированных бензольных кольца	R_A	-0,204	7,881	0,97	0,54	0,04
	B_A	-0,022	7,881	0,97	0,54	0,04
	R_C	-0,045	7,880	0,97	0,54	0,04
	G_B	0,120	7,880	0,97	0,54	0,04
Углеводороды, содержащие три линейно-аннелированных бензольных кольца	b_A	11,542	-3,182	0,75	2,18	0,17
	b_C	16,036	-7,471	0,75	2,17	0,17
	b_B	14,523	-6,027	0,75	2,17	0,17
	b_D	15,867	-7,310	0,75	2,17	0,17
Углеводороды ряда дифенила	b_D	-160,104	160,642	0,95	0,96	0,07
	b_B	-154,451	155,246	0,95	0,95	0,07
	b_C	-154,623	155,410	0,95	0,95	0,07
	b_A	-153,415	154,254	0,95	0,95	0,07
Углеводороды ряда перилена	R_C	-0,013	7,793	0,82	3,96	0,29
	R_D	-0,014	7,773	0,82	4,01	0,29
	b_A	1,668	5,936	0,80	4,15	0,30
	b_D	3,126	4,550	0,80	4,18	0,31
Углеводороды ряда бисантена	b_D	5,712	2,423	0,98	3,70	0,26
	b_B	4,806	3,268	0,98	3,49	0,24
	R_D	-0,019	8,191	0,96	4,96	0,34
	R_A	-0,012	7,644	0,97	4,55	0,31
Углеводороды ряда пирена	R_A	-0,007	7,529	0,77	4,15	0,31
	R_C	-0,010	7,761	0,85	3,42	0,25
	R_B	-0,009	7,662	0,82	3,67	0,27
	R_D	-0,011	7,745	0,84	3,47	0,26
Углеводороды ряда антантрена	g_A	-1,825	7,360	0,94	3,08	0,21
	g_D	-2,939	7,309	0,92	3,51	0,24
	g_C	-3,127	7,299	0,91	3,74	0,26
	g_B	-2,622	7,320	0,91	3,58	0,25
Гетероароматические соединения	g_B	-2,176	7,522	0,82	2,91	0,21
	g_D	-2,423	7,515	0,83	2,88	0,21
	g_A	-1,458	7,542	0,81	3,03	0,22
	g_C	-2,622	7,510	0,83	2,83	0,21

Из результатов исследования корреляций установлены неизвестные ранее линейные зависимости первых ПИ и ЦХ в системе RGB, характер которых уточнен. Такие выводы подтверждаются статистической обработкой данных. Так, коэффициент вариации лежит в интервале 0,54—4,96 %, стандартное отклонение попадает в диапазон от 0,04 до 0,34, коэффициенты корреляции находятся в диапазоне 0,75—0,98. Это свидетельствует об адекватности линейной зависимости (2).

Соответствующие корреляции для отдельных классов органических соединений изображены на

рисунке *a* и *б*, на котором виден линейный характер зависимостей для исследуемых диапазонов первых ПИ и ЦХ.

В табл. 3 приведены результаты сопоставления первых ПИ для 92 различных индивидуальных ароматических соединений, определенных известными методами и на основе данных табл. 2. Погрешность определения первых ПИ по абсолютному отклонению составляет 0,001—0,446 эВ, а по относительному отклонению 0,011—5,935 %.



Взаимосвязь первых ПИ с красной координатой цвета (источник излучения С) углеводородов ряда:

а — перилена:

- 1 — 1,2-5,6-добензперилен; 2 — 1,2-7,8-добензперилен; 3 — 1,2-11,12-добензперилен; 4 — 1,2-3,4-5,6-трибензкоронен;
 5 — 1,2-10,11-добензперилен; 6 — 2,3-10,11-добензперилен; 7 — 2,3-бензперилен; 8 — нафт[2',3':1,2]коронен;
 9 — 1,12-0-фенилен-2,3-10,11-добензперилен; 10 — 1,12-0-фениленперилен; 11 — 1,2-3,4-5,6-10,11-тетрабензантрацен;
 12 — 1,12-2,3-10,11-трибензперилен; 13 — антрацено[1',4':1,12]перилен; 14 — перилен; 15 — 1,2-бензкоронен;
 16 — 1,12-бензперилен; 17 — 1,2-7,8-добензкоронен; 18 — 2,3-8,9-добензперилен;
 19 — 1,12-2,3-8,9-трибензперилен; 20 — коронен;

б — пирена:

- 1 — динафт[1',7':2,18]-[7'',1'':9,11]гептацен; 2 — нафт[1',7':2,16]гексацен; 3 — нафт[1',7':2,14]пентацен;
 4 — 1,2-бензфенантрено[9',10':6,7]пирен; 5 — 1,2-3,4-добензпирен; 6 — 1,14-4,5-добензпентацен;
 7 — нафт[2',3':3,4]пирен; 8 — 1,2-3,4-9,10-трибензпирен; 9 — 3,4-8,9-добензпирен; 10 — 5,6-15,16-добензгексацен;
 11 — 3,4-бензнафт[2'',3'':8,9]пирен; 12 — 3,4-9,10-добензпирен; 13 — 3,4-бензнафт[2'',3'':9,10]пирен;
 14 — 1,18-4,5-9,10-13,14-тетрабензгептацен; 15 — 5,6-8,9-14,15-17,18-тетрабензгептацен;
 16 — динзнафт[2',3':3,4]-[2'',3'':9,10]пирен; 17 — 1,2-4,5-8,9-трибензпирен; 18 — динзнафт[2',3':1,2]-[2'',3'':4,5]пирен;
 19 — 3,4-бензпирен; 20 — фенантрено[2',3':3,4]пирен; 21 — 7,8-17,18-добензоктацен; 22 — 1,2-бензнафт[2'',3'':4,5]пирен;
 23 — 1,2-бензнафт[2',3':6,7]пирен; 24 — 6,7-16,17-добензгептацен; 25 — 1,2-6,7-добензпирен;
 26 — динзнафт[2',3':1,2]-[2'',3'':6,7]пирен; 27 — нафт[2',3':1,2]пирен

Таблица 3

Результаты определения первых ПИ различных углеводородов

Описание системы	Наименование соединения	Потенциал ионизации, эВ		Погрешность	
		обычные методы	по ЦХ	абсолютная, эВ	относительная, %
Углеводороды, содержащие два линейно-аннелированных бензольных кольца	5,6-бензхризен	7,896	7,867	0,029	0,369
	3,4-5,6-добензфенантрен	7,818	7,867	0,049	0,624
	Гексагелицен	7,591	7,590	0,001	0,011
	1,2-7,8-добензхризен	7,898	7,879	0,019	0,238
Углеводороды, содержащие три линейно-аннелированных бензольных кольца	Тетрафен	7,745	7,862	0,117	1,505
	1,2-5,6-добензантрацен	7,809	7,859	0,050	0,637
	1,2-3,4-5,6-7,8-тетрабензантрацен	7,838	7,859	0,021	0,264
	1,2-бензтетрафен	7,915	7,843	0,072	0,910
	3,4-бензтетрафен	7,664	7,843	0,179	2,335
	Пентафен	7,582	7,716	0,134	1,764
	1,2-5,6-добензтетрафен	7,903	7,859	0,044	0,560
	6,7-бензпентафен	7,769	7,859	0,090	1,155
	Нафт[2',3':6,7]пентафен	7,616	7,859	0,243	3,187
	Нафт[2',3':3,4]пентафен	7,931	7,609	0,322	4,061
	Антрацено[2',1':1,2]антрацен	8,013	7,723	0,290	3,621
	2,3-бензпицен	8,181	7,844	0,337	4,125
	Антрацено[2',1':1,2]тетрафен	7,178	7,412	0,234	3,258
	Углеводороды ряда дифенила	Бифенилен	8,002	7,847	0,155
1,2-бензбифенилен		7,778	7,811	0,033	0,423
1,2-7,8-добензбифенилен		7,555	7,534	0,021	0,273
2,3-6,7-добензбифенилен		7,667	7,810	0,143	1,865
Углеводороды ряда перилена	Перилен	7,558	7,570	0,012	0,156
	2,3-бензперилен	7,134	7,426	0,292	4,092
	1,2-7,8-добензперилен	6,358	6,720	0,362	5,687
	1,2-10,11-добензперилен	7,117	7,225	0,108	1,518
	1,2-11,12-добензперилен	6,866	6,670	0,196	2,861
	1,2-5,6-добензперилен	6,138	5,959	0,179	2,921
	2,3-8,9-добензперилен	7,913	7,501	0,412	5,207
	2,3-10,11-добензперилен	7,132	7,438	0,306	4,288
	1,12-бензперилен	7,658	7,693	0,035	0,458
	1,12-2,3-8,9-трибензперилен	8,035	7,661	0,374	4,658
	1,12-2,3-10,11-трибензперилен	7,488	7,658	0,170	2,270
	1,12-0-фениленперилен	7,356	7,530	0,174	2,367
	Антрацено[1',4':1,12]перилен	7,545	7,369	0,176	2,337
	1,12-0-фенилен-2,3-10,11-добензперилен	7,271	7,455	0,184	2,526
	1,2-3,4-5,6-10,11-тетрабензантрацен	7,454	7,515	0,061	0,818
	Коронен	8,042	7,596	0,446	5,543
	1,2-бензкоронен	7,562	7,515	0,047	0,620
	1,2-7,8-добензкоронен	7,828	7,437	0,391	4,994
	1,2-3,4-5,6-трибензкоронен	7,042	7,331	0,289	4,097
	Нафт[2',3':1,2]коронен	7,209	7,440	0,231	3,198
Углеводороды ряда бисантена	Бисантен	5,717	5,425	0,292	5,107
	1,14-бензбисантен	7,003	7,253	0,250	3,576
	Овален	7,803	7,660	0,143	1,835
	3,4-11,12-добензбисантен	7,653	7,585	0,068	0,885
	3,4-10,11-добензбисантен	7,519	7,620	0,101	1,347
	Циркумантрацен	5,011	5,242	0,231	4,612
	1,2-3,4-8,9-10,11-тетрабензбисантен	7,653	7,573	0,080	1,045
Углеводороды ряда пирена	3,4-бензпирен	7,658	7,703	0,045	0,583
	1,2-3,4-добензпирен	7,069	7,396	0,327	4,620
	1,2-6,7-добензпирен	7,911	7,714	0,197	2,487
	3,4-8,9-добензпирен	7,207	7,459	0,252	3,498
	3,4-9,10-добензпирен	7,332	7,624	0,292	3,976
	1,2-4,5-8,9-трибензпирен	7,491	7,673	0,182	2,426
	1,2-3,4-9,10-трибензпирен	7,179	7,431	0,252	3,504
	Нафт[2',3':1,2]пирен	8,006	7,673	0,333	4,160
	Нафт[2',3':3,4]пирен	7,137	7,450	0,313	4,380
	1,2-бензнафт[2'',3''':4,5]пирен	7,855	7,462	0,393	5,008
	1,2-бензнафт[2',3':6,7]пирен	7,869	7,712	0,157	1,989
	3,4-бензнафт[2'',3''':8,9]пирен	7,298	7,276	0,022	0,296

Окончание табл. 3

Описание системы	Наименование соединения	Потенциал ионизации, эВ		Погрешность	
		обычные методы	по ЦХ	абсолютная, эВ	относительная, %
Углеводороды ряда пирена	3,4-бензнафт[2'',3':9,10]пирен	7,398	7,448	0,050	0,675
	Динзнафт[2'',3':1,2]-[2'',3':4,5]пирен	7,495	7,416	0,079	1,053
	Динзнафт[2'',3':1,2]-[2'',3':6,7]пирен	8,005	7,712	0,293	3,655
	Динзнафт[2'',3':3,4]-[2'',3':9,10]пирен	7,479	7,414	0,065	0,863
	1,14-4,5-добензпентацен	7,092	7,438	0,346	4,873
	Нафт[1'',7':2,14]пентацен	6,991	7,092	0,101	1,450
	Фенантрено[2'',3':3,4]пирен	7,729	7,444	0,285	3,694
	1,2-бензфенантрено [9',10':6,7]пирен	7,019	7,434	0,415	5,914
	5,6-15,16-добензгексацен	7,243	7,436	0,193	2,663
	Нафт[1'',7':2,16]гексацен	6,366	6,123	0,243	3,814
	6,7-16,17-добензгептацен	7,889	7,557	0,332	4,210
	5,6-8,9-14,15-17,18-тетрабензгептацен	7,459	7,387	0,072	0,963
	1,18-4,5-9,10-13,14-тетрабензгептацен	7,398	7,378	0,020	0,275
	Динафт[1'',7':2,18]-[7'',1'':9,11]гептацен	6,030	6,084	0,054	0,896
	7,8-17,18-добензоктацен	7,818	7,488	0,330	4,217
	Углеводороды ряда антантрена	Антантрено	7,348	7,219	0,129
1,2-7,8-добензантантрено		7,411	7,139	0,272	3,676
2,3-8,9-добензантантрено		6,562	6,441	0,121	1,840
Гетероароматические соединения	9-антрацентиол	7,538	7,384	0,154	2,048
	1,2-бис-(фенилтио)этилен	8,013	7,649	0,364	4,537
	2,2';5',2''-тертиенил	7,744	7,708	0,036	0,469
	4-тиапирантион	7,212	7,165	0,047	0,657
	2-фенил-5,6-бензо-4-тиапирантион	7,007	7,423	0,416	5,935
	2-тиапирантион	6,777	6,610	0,167	2,459
	1,3-дитиолен-2-тион	7,761	7,437	0,324	4,180
	4,5-циклогексено-1,3-дитиолен-2-тион	7,663	7,397	0,266	3,477
	4-фенил-1,3-дитиолен-2-тион	7,570	7,437	0,133	1,760
	Нафто[1,2-b]-1,3-дитиолен-2-тион	7,385	7,437	0,052	0,699
	4,5-диметил-1,2-дитиолен-3-тион	7,099	7,406	0,307	4,319
	4,5-циклопентено-1,2-дитиолен-3-тион	6,948	7,337	0,389	5,605
	4,5-циклогексено-1,2-дитиолен-3-тион	7,089	7,336	0,247	3,478
	Тиолан-3,4-дитион	7,313	7,395	0,082	1,124

Заключение

Определены ЦХ растворов ароматических (углеводородов, содержащих два, три линейно-аннелированных бензольных кольца, углеводородов ряда дифенила, перилена, бисантена, пирена и антантрена) и гетероароматических соединений в колориметрической системе RGB — трехцветные координаты цвета и цветности.

Установлено существование линейной зависимости первых ПИ молекул ароматических и гетероароматических соединений от ЦХ в колориметрической системе RGB. Результаты подтверждены статистической обработкой данных.

Показана возможность приблизительной оценки первых ПИ органических соединений, обладающих цветностью, по их ЦХ в системе RGB.

Литература

1. Грибов Л. А., Муштакова С. П. Энергии разрыва химических связей, потенциалы ионизации и сродства к электрону. — М.: Гардарики, 1999.
2. Справочник/ Под ред. В. Н. Кондратьева. — М., 1974.

3. Доломатов М. Ю., Мукаева Г. Р. // Журн. прикл. спектр. 1992. № 6. С. 950.

4. Бородкин В. Ф. Химия красителей. — М.: Химия, 1991.

5. Доломатов М. Ю., Доломатова Л. А., Маврин А. В. База данных по исследованию свойств и идентификации многокомпонентных органических систем в УФ-видимой и ближней ИК-областях спектра: Свидетельство об официальной регистрации базы данных для ЭВМ №2005620293, 2005.

6. Клар Э. Полициклические углеводороды: Перевод с англ./ В. В. Ершов. — М.: Химия, 1971.

7. Любопытова Н. С. Электронные спектры поглощения органических соединений серы. — М.: Наука, 1977.

8. Большаков Г. Ф., Вагаго В. С., Агрест Ф. Б. Ультрафиолетовые спектры гетероароматических соединений. — М.: Химия, 1969.

9. Mark D. Fairchild. Color appearance models. Second Edition. Munsell Color Science Laboratory/ Rochester Institut of Technology, USA, 2004.

10. Юстова Е. Н. Таблицы основных колориметрических величин. — М.: Просвещение, 1997.

11. Свердлова О. В. Электронные спектры в органической химии. — Л.: Химия, 1985.

12. Доломатов М. Ю., Ярмухаметова Г. У., Доломатова Л. А. // Журн. прикл. физика. 2008. № 4. С. 43.

13. Доломатов М. Ю., Ярмухаметова Г. У. // Журн. прикл. спектр. 2008. № 3. С. 406.

Статья поступила в редакцию 18 февраля 2009 г.

The correlation of the color characteristics and first ionization potentials of organic compounds

M. Yu. Dolomatov, G. U. Jarmuhametova
Ufa State Academy of Economic and Service, Ufa, Russia
E-mail: muhagu@rambler.ru

Color characteristics of organic compounds are defined in colorimetric system RGB. Linear dependences are confirmed between color characteristics and ionization potentials. The conclusions are confirmed by statistical data processing.

PACS: 81.05.-t