

УДК 519.19

**МАГНЕТИЗМ И БИРАДИКАЛОИДНЫЙ ХАРАКТЕР  $\pi$ -АРОМАТИЧЕСКИХ И АНТИАРОМАТИЧЕСКИХ СИСТЕМ В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ****А.В. Лузанов***НТК "Институт монокристаллов" НАН Украины, Харьков*

E-mail: luzanov@xray.isc.kharkov.com

*Статья поступила 26 мая 2012 г.*

Развитая ранее схема полного конфигурационного взаимодействия для магнитных возмущений  $\pi$ -систем преобразована в схему вычислений в конечном поле. С ее помощью строятся "магнитные портреты" молекул, отражающие существенно нелинейное поведение сопряженных систем в сильном поле. В частности, легко фиксируется возможный скрытый парамагнетизм ароматических систем и соответственно скрытый диамагнетизм антиароматических. Оценена степень открытости  $\pi$ -электронной оболочки, а также синглет-триплетное расщепление в поле. Из полученных данных следует, что в сильном магнитном поле ароматическая молекула, как правило, становится бирадикалоидной и неароматической. Соответственно, антиароматическая система резко снижает свой первоначально бирадикалоидный характер и тем самым утрачивает свою антиароматичность.

**Ключевые слова:** диамагнетизм, парамагнетизм,  $\pi$ -электронная корреляция, число эффективно распаренных электронов, ароматичность.

**ВВЕДЕНИЕ**

Молекулярные магнитные свойства играли фундаментальную роль с самого начала зарождения электронной теории ароматичности [1, 2]. В последнее время эта тенденция особенно усилилась благодаря оригинальному (хотя и спорному [3, 4]) подходу Шляйера [5] описывать локальную ароматичность с помощью так называемых индексов NICS. Изучение кольцевых токов в ароматических структурах также не потеряло своего значения. И хотя эта техника подвергается критике [6], тем не менее кольцевые токи — важный элемент теории ароматичности [7, 8] и общей теории химических сдвигов (относительно достижений неэмпирической квантовой химии см. обзоры [9, 10]). Существует, однако, и иной подход, в котором выходят за пределы привычных квадратичных по полю эффектов (магнитные восприимчивости) и описывают более общий нелинейный магнетизм молекулы. На такую возможность давно указали Лабзовский и Лозовик, изучившие простыми методами поведение модельных  $\pi$ -систем в конечном магнитном поле [11]. Из последующих работ в этой области ограничимся лишь цитированием недавних статей [12—14]. В частности, в [14] методом конечного поля в рамках теории Хартри—Фока—Рутана изучена реальная энергетика сравнительно небольших ароматических систем в очень сильных магнитных полях.

Для больших ароматических структур подобные исследования даже на хартри-фоковском уровне крайне трудны, и не стоит сбрасывать со счетов классическую теорию Паризера—Парра—Попла (PPP), которая наряду с методом Хюккеля дает достаточно содержательные модели электронных свойств  $\pi$ -систем [15]. Цель данной заметки — выяснить, какую картину