

## **Оценка донорно-акцепторных свойств кислородсодержащих соединений и ширины запрещённой зоны в нанокластерах антрахинона по интегральным характеристикам сигналов оптических спектров поглощения**

© Доломатов<sup>1,2\*</sup> Михаил Юрьевич, Латыпов<sup>1+</sup> Камил Фаридович  
и Бахтизин<sup>1</sup> Рауф Загидович

<sup>1</sup> Кафедра физической электроники и нанофизики. Физико-технический институт.  
Башкирский государственный университет. Ул. З. Валиди, 32. г. Уфа, 450074.  
Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 229-96-47.

E-mail: [latypovkf@rambler.ru](mailto:latypovkf@rambler.ru)

<sup>2</sup> Кафедра технологии нефти и газа. Технологический факультет. Уфимский государственный  
нефтяной технический университет. Ул. Космонавтов, 1. г. Уфа, 450074.  
Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 243-15-35.

E-mail: [dolomatov@mail.ru](mailto:dolomatov@mail.ru)

\*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** потенциал ионизации, сродство к электрону, ширина запрещённой зоны, интегральный параметр автокорреляционной функции, электронные спектры, кислородсодержащие соединения, электронная абсорбционная спектроскопия.

### **Аннотация**

Как известно, в химии существуют орбитально-контролируемые реакции, которые связаны с переносом заряда между реагентами. Это относится к процессам образования молекулярных донорно-акцепторных комплексов. Поэтому на константы равновесия и скорости соответствующих реакций влияют потенциалы ионизации (IP) и сродство к электрону (EA) реагентов, которые характеризуют способность отдавать и принимать электроны, соответственно. Кроме того, IP и EA являются важнейшими факторами, определяющими ширину запрещённой зоны в полупроводниках.

Установлена линейная зависимость между первым вертикальным IP и EA молекул кислородсодержащих природных соединений от интегральных характеристик поглощения в УФ и видимой областях спектра. IP и EA калибровались методом RHF-6-31G\*\*.

Для оценки ширины запрещённой зоны темновой проводимости  $E_g$  в нанокластерах органических полупроводников ряда антрахинона предложен полуэмпирический подход, который заключается в построении зависимости между расчётными значениями  $E_g$  и автокорреляционными интегральными характеристиками сигнала. Ширина запрещённой зоны в нанокластере оценивалась через ширину запрещённой зоны  $E_{g0}$  изолированной молекулы и поправку на межмолекулярное и электронно-дырочное взаимодействие.  $E_{g0}$  рассчитывали методом RHF-6-31G\*\* как разность между потенциалом ионизации и сродством к электрону. Энергия межмолекулярного взаимодействия учитывалась методом MM2 из условий минимума межчастичных потенциалов.

Установленные закономерности позволяют проводить оценки потенциалов ионизации, сродства к электрону кислородсодержащих соединений, а также ширины запрещённой зоны темновой проводимости нанокластеров полупроводников на их основе, используя экспериментальные данные по интегральным характеристикам поглощения, которые определяются непосредственно из оптических спектров в УФ и видимой областях, а также сравнительно простых молекулярных моделей без применения квантовых методов.

Результаты исследований могут быть практически использованы в органической химии и молекулярной электронике для изучения процессов переноса электронов. Полученные зависимости обоснованы расчетами и подтверждены статистической обработкой данных по специально разработанным алгоритмам и программам.