

Оригинальные статьи

Научная статья

УДК 544.18

<https://doi.org/10.17308/kcmf.2024.26/11811>

Исследование электронной структуры и оптоэлектронных свойств 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида

Д. М. Маманд¹, Д. М. Азиз², Х. М. Квадр^{1✉}

¹Университет Рапарин, Колледж естественных наук, кафедра физики, Сулеймания, Ирак

²Университет Рапарин, Колледж естественных наук, кафедра химии, Сулеймания, Ирак

Аннотация

Изучены молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в различных концентрациях в диметилсульфоксиде (ДМСО). Определены ширина запрещенной зоны, координаты Тауца, показатели преломления, оптические и электрические свойства, диэлектрическая проницаемость при различных температурах. Показатель преломления рассчитывался по простой модели, основанной на данных о ширине запрещенной зоны, и сравнивался с экспериментальными значениями. Оптические свойства материалов изучались с учетом отражения и потерь на отражение на плазменных частотах, поскольку данные показатели имеют существенное значение. Расчеты проводились с использованием программы Gaussian гибридным методом функционала плотности (DFT) B3LYP с базисом 6-311G++ (d, p). Рассчитаны параметры химической активности и селективности, в том числе НОМО-LUMO, глобальная жесткость, мягкость, электроотрицательность, электрофильность, нуклеофильность, химический потенциал, ширина запрещенной зоны и сродство к электрону. Для оптимизации геометрии титальной молекулы использовали гибридный метод функционала плотности (B3LYP).

Ключевые слова: оптоэлектроника, УФ-спектроскопия, НОМО-LUMO, теория функционала плотности

Для цитирования: Маманд Д. М., Азиз Д. М., Квадр Х. М. Исследование электронной структуры и оптоэлектронных свойств 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2024;26(1): 88–103. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2024.26/11811>

For citation: Mamand D. M., Aziz D. M., Qadr H. M. An investigation of the electronic structure and optoelectronic properties of 4-((2-hydroxy-3-methoxybenzylidene) amino)-N-(thiazol-2-yl) benzene sulfonamide. *Condensed Matter and Interphases*. 2024;26(1): 88–103. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2024.26/11811>

✉ Квадр Хива Мохаммад, e-mail: hiwa.physics@uor.edu.krd

© Маманд Д. М., Азиз Д. М., Квадр Х. М., 2024



1. Введение

При изготовлении электронных устройств возможно применение разнообразных биоразлагаемых материалов. Данные об оптоэлектронных свойствах таких биоматериалов, а именно энергетических диаграммах и ширине запрещенных зон, получают методом оптической абсорбционной спектроскопии [1–3]. Ширина запрещенной зоны большинства биоматериалов превышает 2.5 эВ. Например, в научной литературе описаны такие биоматериалы, как желатин, глицерин и фибриноген, ширина запрещенной зоны которых составляет 3, 3.54 и 3.02 эВ соответственно [4–7]. У полупроводниковых материалов ширина запрещенной зоны лежит в пределах от 1 до 1.5 эВ. Наиболее типичными примерами подобных классических проводников является арсенид галлия и кремний [8]. Широкозонные (WBG) полупроводники, для которых характерна запрещенная зона в пределах от 2 до 4 эВ, обладают особыми свойствами, позволяющими устройствам работать при более высоких напряжениях, частотах и температурах по сравнению с обычными полупроводниками [9, 10]. При изучении оптоэлектронных свойств материалов основными параметрами являются ширина запрещенной зоны, координаты Тауца, показатель преломления, пропускание света молекулами и диэлектрические свойства [11, 12]. Показатель преломления описывает оптические свойства материала и характеризует относительную скорость света в нем. Значение показателя преломления зависит от кристаллической структуры и плотности материала. Таким образом, он дает представление о физических и химических характеристиках материала [13, 14]. Показатель преломления важен для различных областей применения, например, для фармацевтической промышленности. Настоящее исследование посвящено теоретическому и экспериментальному исследованию молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в диметилсульфоксиде (ДМСО). Цель исследования состоит в определении сферы применения новой синтезированной молекулы путем определения ее физико-химических свойств, в частности, свойств сольватации, характеризующих взаимодействие вещества с различными средами, а также внутренней химической активности [15–18]. В последнее время широко исследуются физико-химические характеристики лекарственных препаратов, поскольку они влияют на способность химическо-

го соединения вызывать фармакологический и терапевтический эффект. Действие и чувствительность лекарственного препарата зависят от таких физико-химических свойств, как нейтрализация, хелатирование, окисление и внеклеточные реакции [19, 20]. Благодаря достижениям фотоники в различных областях, например, в области оптической связи, хранения данных и обработки изображений, в последние годы существенно возрос интерес к исследованиям нелинейно-оптических эффектов в разнообразных веществах [21].

Основной целью данного исследования является всестороннее изучение физико-химических и оптоэлектронных свойств новой синтезированной молекулы с полностью оптимизированной геометрической структурой (см. рис. 1 и 2) [22]. Для определения электронной структуры и ряда количественных химических параметров использовались количественные расчеты на основе теории функциональной плотности (DFT).

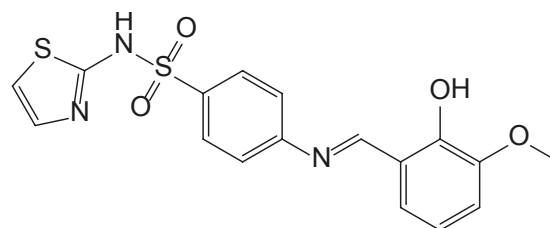


Рис. 1. Химическая структура 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида

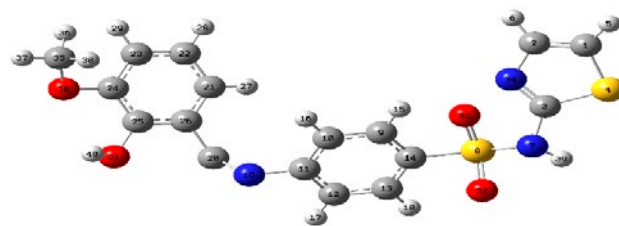


Рис. 2. Оптимизированная структура

2. УФ-спектроскопия

УФ-спектроскопия является одним из наиболее информативных и простых оптических методов исследования оптических и электрических свойств наноматериалов. Этот метод был использован в многочисленных исследованиях для определения поведения разнообразных наноматериалов, от полимеров и органических светоизлучающих материалов до комбинаций органических материалов и неорганических полупроводников [23, 24]. Отраженные спект-

ры, полученные с помощью этого метода, дают представление о фундаментальных электронных свойствах исследуемых образцов. Ширина запрещенной зоны является важным параметром, позволяющими определять различные оптические свойства соединений, например, показатель преломления, угловая частота рассеяния, электроотрицательность и диэлектрическая проницаемость. Этот параметр позволил создавать новые полупроводниковые приборы, например, 2D электронный газ и светодиоды [25]. Примечательно, что в последнее время ширина запрещенной зоны считается важным параметром не только в области передовых полупроводниковых технологий, но и в области производства современного строительного оборудования. Она также лежит в основе передовой технологии, позволяющей создавать новые инновационные приборы, например батареи большой емкости и сверхэффективные солнечные элементы [25]. В случае встроенных электрических полей эта методика имеет важное значение для ионизации дырок из глубоких акцепторных примесей. Ионизационному процессу способствует несбалансированный поляризационный заряд, коррелирующий с градиентным слоем, что позволяет создавать электрические поля. 4-((2-гидрокси-

3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамид и материалы на его основе можно наносить на любые полупроводниковые кристаллы с достаточной пьезоэлектрической поляризацией и сильным спонтанным излучением. Благодаря этим свойствам они являются универсальными материалами для широкого применения в области нанoeлектроники и современных полупроводниковых приборов.

Установлено, что поглощение света при заданной частоте прямо пропорционально концентрации молекул (см. табл. 1). Более подробно эта зависимость показана на рис. 3, из которого видно, что увеличение поглощения энергии фотонов приводит к изменению концентрации, а также длины пути. Начальная концентрация раствора является самой высокой, поэтому при прохождении через среду падающий свет взаимодействует с большим количеством молекул. Следовательно, более высокая концентрация приводит к более сильному поглощению света и указывает на присутствие большего количества молекул в растворе. В соответствии с законом Бугера–Ламберта–Бера поглощение и концентрация прямо пропорциональны. Таким образом, увеличение начальной концентрации приводит к увеличению поглощения.

Таблица 1. Максимальное поглощение 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в ДМСО при различных концентрациях и температурах

Концентрация (мг/л)	Температура 303.15 К			Температура 313.15 К		
	1.026	0.513	0.2565	1.026	0.513	0.2565
λ_{\max} (нм)	362	331	328	362	353	325.32
Ширина запрещенной зоны (эВ)	3.425	3.746	3.78	3.425	3.512	3.811

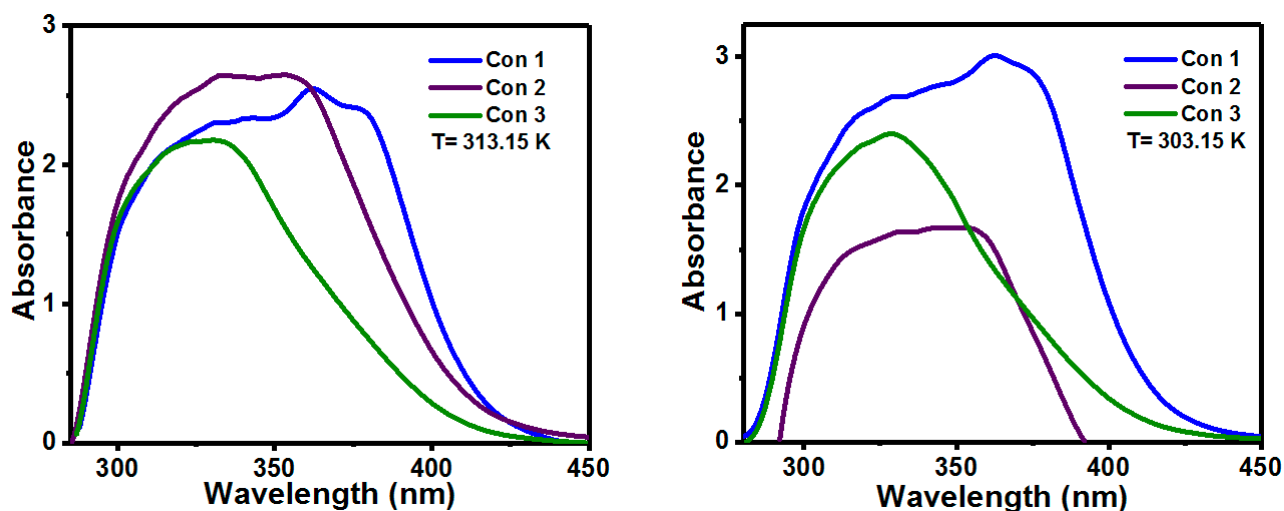


Рис. 3. УФ-спектр 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в ДМСО при различных температурах

Однако для второй концентрации характерно более низкое поглощение. Это отклонение можно объяснить разбавлением раствора, а, следовательно, снижением начальной концентрации. По мере разбавления раствора количество молекул, доступных для взаимодействия со светом, уменьшается, что приводит к пропорциональному уменьшению поглощения. Это наблюдение согласуется с законом Бугера–Ламберта–Бера и указывает на непосредственную взаимосвязь между поглощением и концентрацией. Таким образом, в настоящем исследовании снижение поглощения при второй концентрации связано с разбавлением раствора вследствие пропорционального снижения концентрации.

Оптические и электрические характеристики широкозонных и узкозонных полупроводников существенно отличаются. Молекула 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида обладает широкой запрещенной зоной, превышающей 3 эВ. Широкозонные полупроводники (WBGS) характеризуются более широкой запрещенной зоной по сравнению с классическими полупроводниками. При этом ширина запрещенной зоны последних находится в диапазоне 1–1.5 эВ (например, у германия и кремния), в то время как у последних она лежит в пределах от 2 до 4 эВ. Как правило, WBGS обладают электронными характеристиками, представляющими нечто среднее между характеристиками, свойственными для изоляторов и классических полупроводников. Благодаря своим отличительным свойствам WBGS подходят для широкого спектра применений. При этом приборы с широкозонными полупроводниками могут работать при существенно более высоких напряжениях, частотах и температурах примерно до 300 °С. Это превосходит эксплуатационные пределы классических полупроводниковых материалов, таких как кремний и арсенид галлия. Материалы с широкозонными полупроводниками используются при изготовлении разнообразных приборов, например, радаров, радиочастотных устройств, лазеров и светодиодов, поскольку благодаря повышенной термической стабильности широкозонные полупроводники позволяют таким устройствам функционировать в нормальном режиме в условиях более высокой мощности [26–28]. В электронных спектрах 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида присутствуют две различные полосы. Первая полоса, расположенная при $\lambda_{\max} = 300$ –

312 нм, связана с $\pi \rightarrow \pi^*$ переходом в ароматической системе фенильной группы. Вторая полоса, расположенная при $\lambda_{\max} = 430$ –460 нм, связана с хромофорной группой C=N этих соединений (см. табл. 1). УФ-видимые спектры этого соединения исследовали при различных температурах в диметилсульфоксиде (ДМСО). На рис. 3 показаны УФ-спектры исследуемого соединения при различных температурах. При комнатной температуре выбранное соединение демонстрирует два поглощения в диапазоне 300–600 нм, в частности, при 393 нм для енол-иминной формы и при 453 нм для кето-аминной формы. При охлаждении раствора до 15 °С происходит изменение цвета с оранжевого на желтый, сопровождающееся исчезновением полосы поглощения при 453 нм для кето-формы в УФ-видимых спектрах. При повторном нагревании раствора снова появляется полоса поглощения для кето-формы. Это поведение указывает на существование кето-енольного равновесия, при этом это равновесие зависит от температуры.

Целью настоящего исследования является изучение оптоэлектронных свойств молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида, представляющей особый интерес вследствие ее отличительных оптических характеристик. Ширину запрещенной зоны данной молекулы определяли с помощью расчетов на основе УФ-спектроскопии (см. рис. 2 и 3). При различных концентрациях и температурах в УФ-спектрах наблюдается сингулярный пик (см. табл. 1). Широкая запрещенная зона в данном диапазоне представляет особый интерес для применения в оптоэлектронных устройствах и прозрачных электродах из проводящих оксидов в солнечных элементах. В этом контексте ширина запрещенной зоны имеет принципиально важное значение для извлечения фотогенерируемых носителей в солнечных элементах. При этом в центре внимания – прозрачные проводящие оксидные полупроводники, особенно с плавно изменяющейся шириной запрещенной зоны [29]. Возможность настройки ширины запрещенной зоны за счет непрерывного и независимого манипулирования свойствами дырок и электронов делает такие проводники еще более универсальными. Определение ширины запрещенной зоны является необходимым условием при изготовлении устройств и имеет важное значение для определения их оптических характеристик. Определение ширины запрещенной зоны молекулы 4-((2-гидрокси-

3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида и возможность ее настройки открывают новые перспективы для развития оптоэлектронных технологий, в частности инновационных разработок в области солнечных элементов и сопутствующих устройств.

3. Расчеты по методу Тауца

Коэффициент поглощения (α) по отношению к энергии фотонов ($h\nu$) характеризует светопоглощающие свойства полупроводниковых материалов. Этот коэффициент облегчает вычисление как оптической ширины запрещенной зоны (E_g), так и ширины запрещенной зоны, связанной с оптическими переходами в полупроводниках. Такой подход, позволяющий определить ключевые параметры, важные для понимания реакции полупроводника на поглощение света, также дает понимание об оптических свойствах полупроводника и облегчает расчет оптической ширины запрещенной зоны E_g [30].

$$(\alpha h\nu) = A^* (h\nu - E_g)^m. \quad (1)$$

Здесь A^* – константа, а m – параметр, связанный с характеристикой запрещенных зон на основе типа измерения. При этом для оптических переходов должно соблюдаться условие сохранения квазиимпульса и энергии. В физике полупроводников выделяют два типа полупроводников в зависимости от ширины запрещенной зоны: прямозонные полупроводники и непрямозонные полупроводники. Для валентной зоны и зоны проводимости характерно максимальное энергетическое состояние, а для зоны

Бриллюэна – минимальное энергетическое состояние. Последняя определяется, как правило, квазиимпульсом [31]. Если квазиимпульс электронов или дырок отличается в зоне проводимости и в валентной зоне, речь идет о непрямозонном переходе. Тип запрещенной зоны для 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида определялся путем сопоставления ширины запрещенной зоны в УФ и видимом диапазоне по методу Тауца, которое показало что для данного соединения характерна непрямая запрещенная зона. Параметр m , зависящий от типа ширины запрещенной зоны полупроводника, может принимать четыре разных значения: $3/2$ – запрещенный переход, 3 – запрещенный непрямой переход, 2 – непрямой разрешенный переход [32]:

$$(\alpha h\nu) = A^* (h\nu - E_g)^2. \quad (2)$$

Ширину запрещенной зоны можно определять различными способами, в том числе методом Тауца, по первой производной полосы поглощения и спектрам отражения. Для молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида метод Тауца является наиболее эффективным методом расчета ширины запрещенной зоны (E_g). Значения E_g , полученные методом Тауца, согласуются со значениями, полученными на основе УФ-видимых спектров. В частности, по методу Тауца E_g составляет: 3.03, 3.18, 3.23 эВ при одном наборе условий и 3.02, 3.15, 3.16 эВ при другом наборе условий, соответствующих температурам 30 и 40 °C (см. рис. 4).

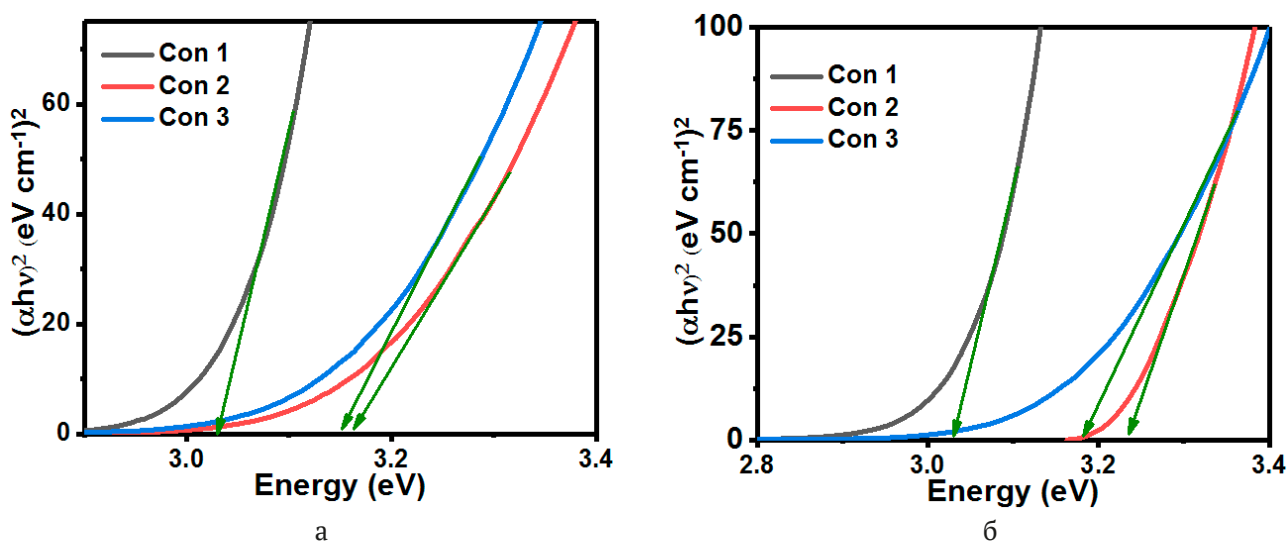


Рис. 4. График Тауца для 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в ДМСО (а) при 303,15 К и (б) при 313,15 К

3.1. Показатель преломления

Показатель преломления полупроводниковых материалов имеет большое значение для определения ряда параметров, в том числе электроотрицательности, ширины запрещенной зоны, электро- и фотопроводимости, а также диэлектрической проницаемости. От показателя преломления зависит производительность приборов. Таким образом, показатель преломления – важная характеристика для оптоэлектроники. Показатель преломления, обозначенный как n , можно найти из следующего выражения [33]:

$$n = \left\{ \left[\frac{4R}{(R-1)^2} - k^2 \right]^{\frac{1}{2}} - \frac{R+1}{R-1} \right\}. \quad (3)$$

В основе характеристики оптических и электрических свойств полупроводниковых материалов лежат два ключевых параметра: ширина запрещенной зоны и показатель преломления. Показатель преломления (n) является мерой прозрачности, а ширина запрещенной зоны (E_g) определяется пороговым значением поглощения. Соотношение между E_g и n представлены рядом формул: Мосса, Равиндры, Херве–Вандамма, а также Редди и Кумара–Синга. Полуэмпирические корреляции, установленные Моссом еще в 1950-х годах, были предметом интенсивного изучения в последующие годы. Эти соотношения играют решающую роль для понимания и характеристики оптических и электрических свойств полупроводниковых материалов [34–37].

Уравнение Редди:

$$n^4 (E_g - 0.365) = 154. \quad (4)$$

Уравнение Мосса:

$$n^4 E_g = 95 \text{ eV}. \quad (5)$$

Уравнение Равиндры:

$$n = 4.084 - 0.62 E_g. \quad (6)$$

Из следующего уравнения Трипати можно рассчитать показатель преломления:

$$n = n_0 \left[1 + \alpha e^{-\beta E_g} \right]. \quad (7)$$

где α , β и n_0 – константы, равные 1.9017, 0.539 эВ⁻¹ и 1.37 соответственно.

Уравнение Херве–Вандамма:

$$n^2 = 1 + \left(\frac{A}{E_g + B} \right)^2. \quad (8)$$

Уравнение Кумара–Синга:

$$n = K E_g^c, \quad (9)$$

где K и C – константы, равные 3.3668 и -0.32234 .

Показатель преломления (n) является важнейшим параметром для характеристики физико-химических свойств материалов и мерой прозрачности. Точный расчет n имеет важное значение для проектирования оптоэлектронных устройств, поскольку этот показатель влияет на электронные характеристики и зонную структуру материалов. Показатель преломления для молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензильден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида показан на рис. 5. Экспериментальные значения n имеют самые низкие значения по сравнению с другими соотношениями. Изначально изменения показателя преломления представлены в виде почти линейного тренда. Затем n увеличивается при величине запрещенной зоны от 3.3 до 4.25 эВ, а потом вновь уменьшается до своего первоначального значения. При 6.19 эВ n равен 0.18, это значение совпадает с экспериментальным значением и значением из уравнения Равиндры. Хотя каждое уравнение имеет свои уникальные характеристики, уравнение Редди обычно демонстрирует лучшую совместимость с показателем преломления. Однако, поскольку запрещенная зона превышает 4 эВ, уравнение Мосса демонстрирует более точное соответствие экспериментальным значениями показателя преломления. Например, при 6.2 эВ, оно обеспечивает более близкое соответствие экспериментальным данным в диапазоне от средней до умеренно большой ширины запрещенной зоны. Тем не менее, следует отметить, что уравнение Мосса является неточным для материалов с запрещенной зоной менее 0.365 эВ [38]. Применимость этого уравнения зависит от типа материала и ширины запрещенной зоны. Например, уравнение Кумара–Синга больше подходит для бинарных полупроводниковых соединений.

Из уравнения Мосса видно, что энергетические уровни электронов понижаются за счет эффективной диэлектрической проницаемости материала, обусловленной фотопроводимостью [39]. Диэлектрическая проницаемость материалов приблизительно пропорциональна квадрату показателя преломления. Уравнение Равиндры, используемое для расчета показателя преломления полупроводников, предполагает наличие линейной зависимости, при этом валентная зона и зона проводимости более или

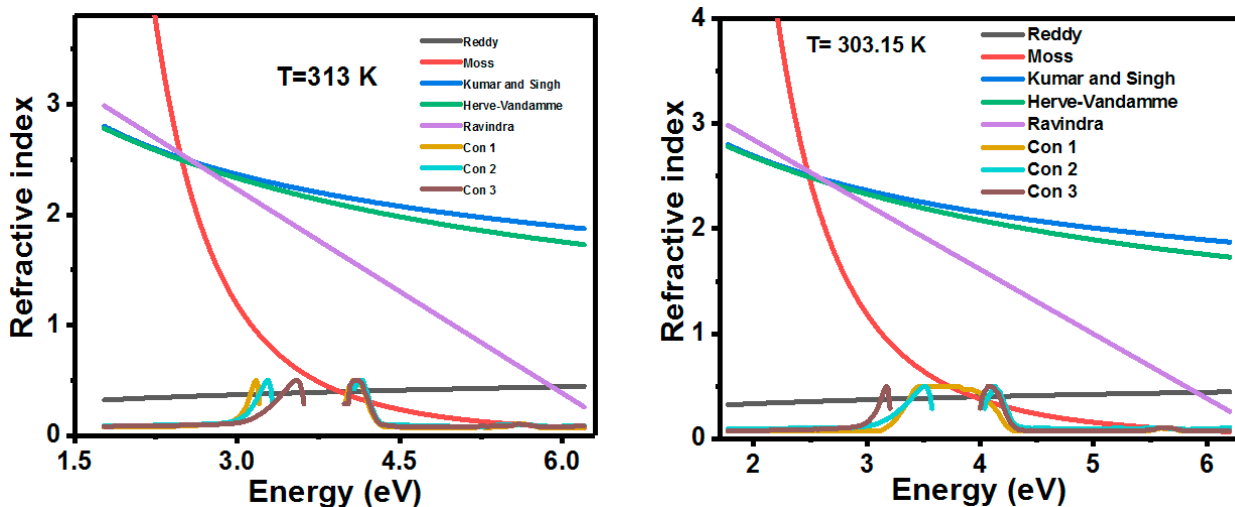


Рис. 5. Изменение показателя преломления в зависимости от ширины запрещенной зоны молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в растворителе ДМСО

менее параллельны друг другу по направлениям симметрии [40]. Согласно этой модели, на основании теории колебаний разница между энергией УФ резонанса и шириной запрещенной зоны является постоянной. В контексте молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в ДМСО уравнение Кумара–Синга дает значение показателя преломления (n) равное 2.33. Согласно этой модели, поведение n определяется законом сохранения энергии применительно к ширине запрещенной зоны, при этом параметры модели согласуются с экспериментальной шириной запрещенной зоны и данными показателя преломления. Расчет n в ДМСО по уравнению Мосса дает самые высокие значения данного параметра в рамках настоящего исследования, а именно 4.856 (см табл. 2). На показатель преломления оказывают влияние длина волны света и концентрация в растворе. Что касается связи между температурой и показателем преломления молекул, то сами изменения температуры не оказывают влияния на показатель преломления, однако, он меняется вследствие изменения плотности. Обычно повышение температуры приводит к расширению вещества, а

следовательно, к снижению плотности. Однако под воздействием сжатия плотность остается постоянной, несмотря на изменения температуры. Примечательно, что изменение давления не вызывает изменений показателя преломления [41–43].

Чтобы определить физические свойства материала, в частности, преломление света при различных значениях длины волны, необходимо рассмотреть такой параметр, как дисперсия. Как видно из рис. 6, область нормальной дисперсии молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в ДМСО рассчитывалась с учетом зависимости между показателем преломления и угловой частотой. Для создания оптических пигментов одним из важнейших свойств является площадь рассеяния. При увеличении угловой частоты показатель преломления меняется, в результате чего растет площадь рассеяния. Показатель преломления и область нормальной дисперсии крайне важны при построении многоэлементных систем, поскольку они позволяют точно предсказывать преломление света на протяжении всего оптического пути.

Таблица 2. Среднее значение показателей преломления молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в ДМСО для различных соотношений и экспериментальных расчетов

Мосс	Редди	Херве-Вандамм	Равиндра	Кумара-Синга	T = 303.15 K			T = 313.15 K		
					Концентрация					
					1	2	3	1	2	3
4.856	0.3831	2.25505	1.62242	2.336455	0.0866	0.0706	0.0918	0.0738	0.0856	0.082

3.2. Отражательная способность и потери на отражение

Оптический отклик поверхности материала можно оценить с помощью коэффициента отражения. Коэффициент отражения равен отношению потока излучения, отраженного телом, к потоку, упавшему на тело. От данного коэффициента зависят оптические свойства материала. Отражательную способность можно рассчитать через зависимость коэффициента молярной экстинкции и показателя преломления, которая представлена следующим образом [44, 45]:

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \tag{10}$$

Где k – частотнозависимый коэффициент молярной экстинкции. Для слабых поглотителей значения k слишком малы и сходят на нет при высоких частотах. Отражательная способность

при более высоких частотах рассчитывается по следующему уравнению:

$$R = \left(\frac{n-1}{n+1} \right)^2 \tag{11}$$

Коэффициент отражения рассчитывается в соответствии со следующим уравнением:

$$r = \sqrt{R} \tag{12}$$

Самые высокие значения отражательной способности проявляются как при самой малой, так и при самой большой ширине запрещенной зоны (см. рис. 6 и 7). При максимальном поглощении света в диапазоне от 3.2 до 3.9 эВ в обоих температурных режимах отражательная способность достигает самых низких значений, что свидетельствует о минимальном отражении света. Отражательная способность ниже при более низких температурах, что может быть связано с внутренним расширением частиц в молеку-

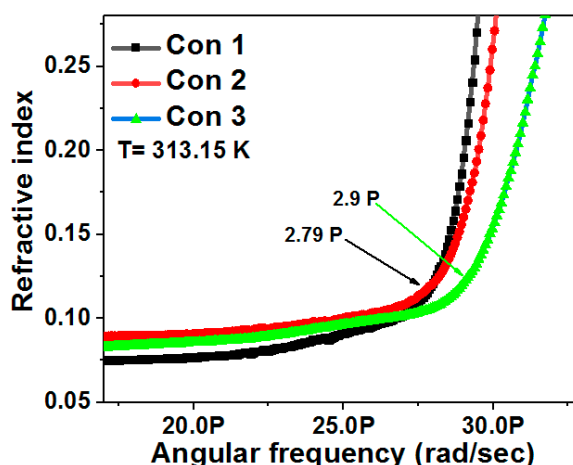
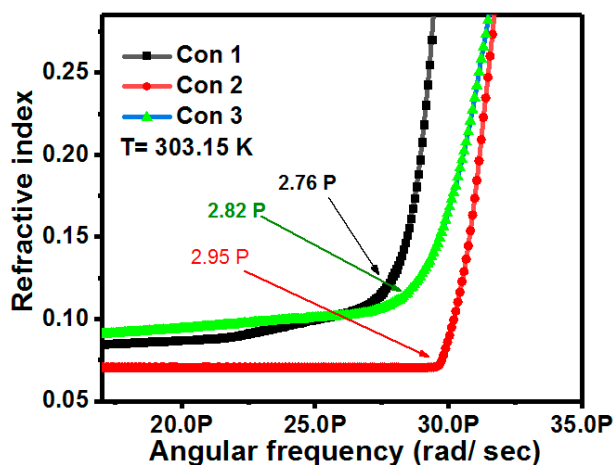


Рис. 6. Область нормальной дисперсии молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в ДМСО

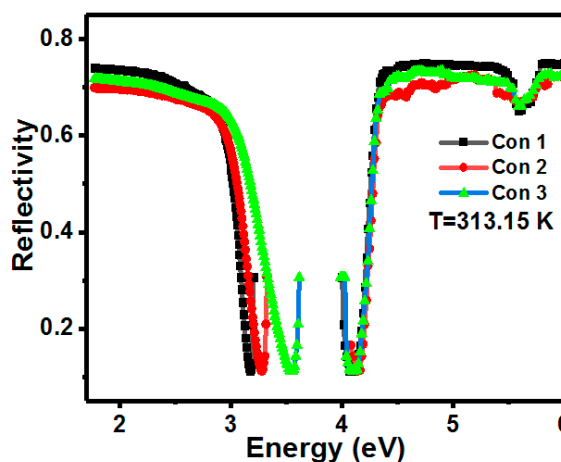
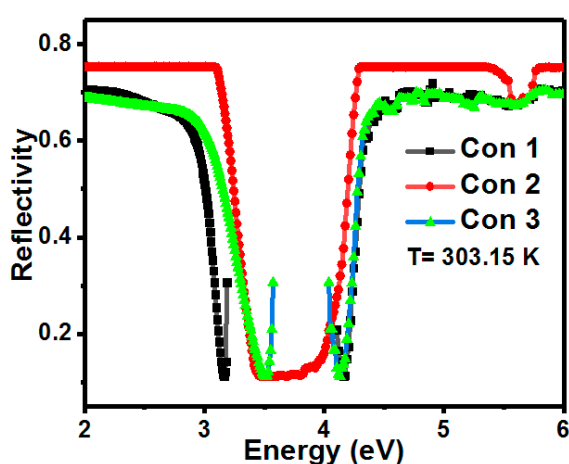


Рис. 7. Изменение отражательной способности в зависимости от ширины запрещенной зоны молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в ДМСО

ле и колебательным движением атомов. В процессе агрегации среда становится более мутной, что приводит к увеличению поглощения света.

На очень низких частотах полупроводниковые материалы обладают оптическими свойствами, характерными для металлов, а на высоких – для изоляторов. Переход от металлического к диэлектрическому отклику материала происходит на плазменной частоте [46]. Согласно модели Друде, плазменная частота – это частота, при которой исчезает реальная часть диэлектрической функции $\epsilon_r(\omega_p) = 0$.

Показатель преломления и коэффициент поглощения (k) равны при низкой частоте и высоких значениях k и n . Нормальную отражательную способность можно описать следующим уравнением [47]:

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} = \frac{n^2 + k^2 - 2n}{n^2 + k^2 + 2n} = 1 - \frac{4n}{n^2 + k^2} \approx 1 - \frac{2}{n}. \quad (13)$$

Материал с большой концентрацией при низкой частоте проявляет себя как идеальный отражатель. Существует зависимость времени релаксации от плазменной частоты. Более резкий рост плазменной частоты соответствует увеличению времени релаксации. Поглощение является еще одним важным свойством, связанным с соотношением электрических и оптических характеристик материалов. Оно описывается тензором проводимости. Высокая электропроводность материала указывает на высокую отражательную способность. Однако прозрачные материалы ожидаемо обладают низкой электропроводностью [48].

4. Оптическая проводимость и электропроводность

Оптическая проводимость и электропроводность полупроводниковых материалов являются важными параметрами для изучения изменений проводимости. Оптическая проводимость и электропроводность определяются согласно следующему выражению [49]:

$$\sigma_{\text{opt}} = \frac{\alpha n c}{4\pi}, \quad (13)$$

$$\sigma_{\text{ele}} = \frac{2\lambda\sigma_{\text{opt}}}{\alpha}. \quad (14)$$

Здесь λ – длина волны падающего света, c – скорость света и α – коэффициент поглощения.

На рис. 8 а и б показано изменение фотопроводимости при 303.15 и 313.15 К для трех различных концентраций в диапазоне от 3.4 до 3.8 эВ. Оптическая проводимость имеет наименьшее значение из-за отсутствия поглощения света. При 3.2 и 3.9 эВ она принимает наибольшее значение, соответствующее максимальному поглощению (см. рис. 3). Как видно из рис. 8с и d, повышение температуры приводит к увеличению проводимости и снижению сопротивления. В случае полупроводников повышение температуры приводит к переходу возбужденных электронов из валентной зоны в зону проводимости, из НОМО (высшая занятая молекулярная орбиталь) к LUMO (низшая незанятая молекулярная орбиталь), что приводит к уменьшению сопротивления и росту проводимости. При увеличении удельного сопротивления и проводимости величина, обратная проводимости, уменьшается.

5. Диэлектрическая проницаемость

Диэлектрическая проницаемость соединений играет важную роль при определении проводящих свойств материала. На электрические свойства материала влияют различные факторы, в том числе такие параметры роста пленок, как скорость осаждения, температура подложки, толщина и состав пленки. Возможность использования тонких пленок в фотоэлектрических материалах определяется их электрическими свойствами. Диэлектрическая проницаемость рассчитывается по следующему уравнению [50]:

$$\epsilon^* = \epsilon' + j\epsilon''. \quad (16)$$

Где параметры ϵ' и ϵ'' представляют соответственно диэлектрическую проницаемость и диэлектрические потери. Диэлектрическая спектроскопия крайне важна, так как связана со многими параметрами, включая такие, как межзеренные границы, структура химических соединений, транспортные свойства и способность диэлектрического материала к накоплению заряда. На межзеренных границах образуется потенциальный барьер, что приводит к увеличению диэлектрической проницаемости с ростом частоты, что, в свою очередь, связано с высокочастотной поляризацией [51].

На заданной частоте диэлектрическая проницаемость представляет собой соотношение между вектором электрического поля и вектором электрического смещения. Примечательно, что диэлектрическая проницаемость может принимать отрицательные значения на определен-

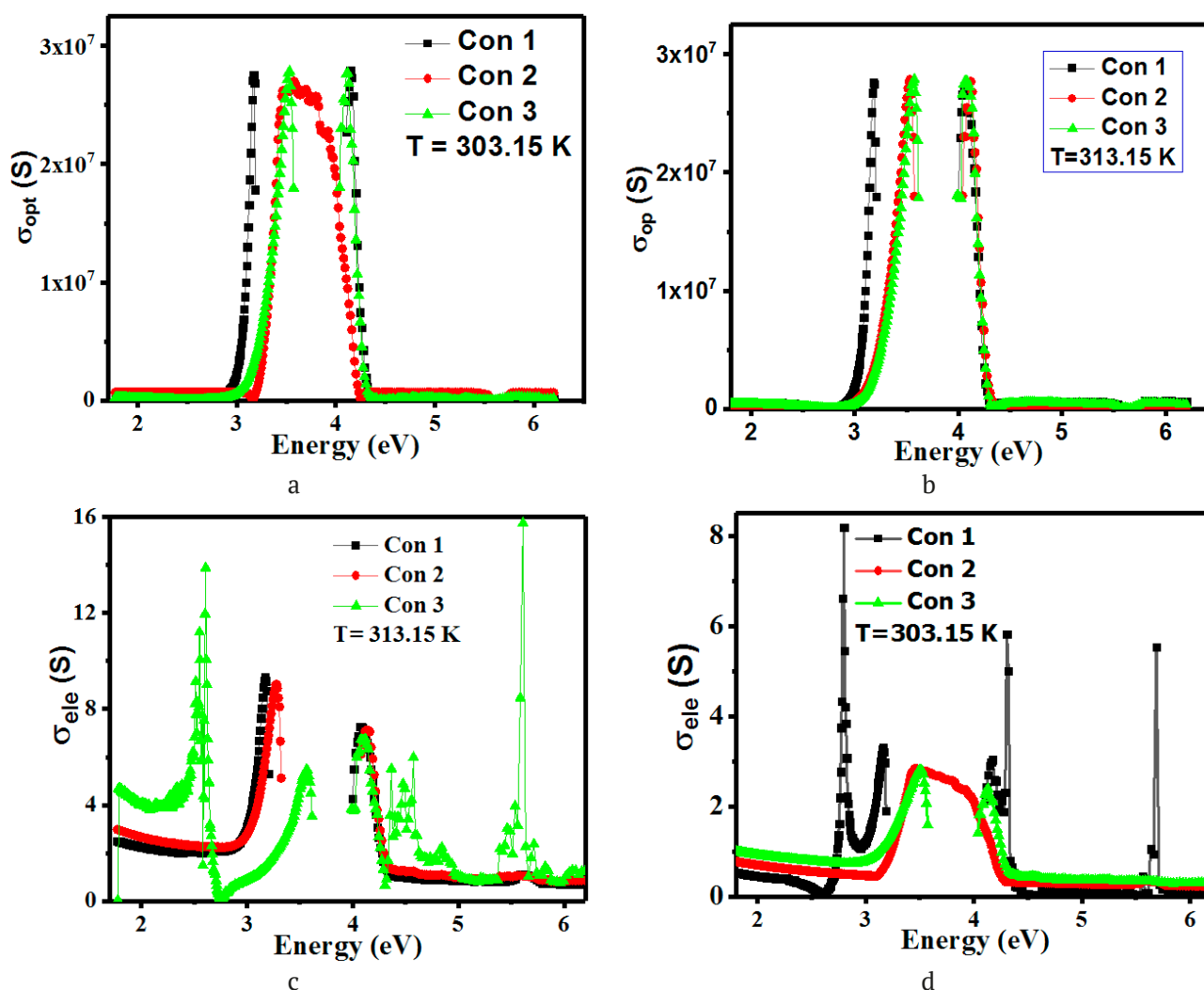


Рис. 8. Оптическая проводимость и электропроводность молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в ДМСО

ных диапазонах частот, например, в плазме на радиочастотах или металлах на инфракрасных частотах. На рис. 9 диэлектрическая проницаемость имеет отрицательное значение, что указывает на отрицательную диэлектрическую проницаемость, при которой вектор электрического смещения и вектор электрического поля направлены в противоположные стороны. Однако отрицательное значение диэлектрической проницаемости не обязательно означает, что электрическая энергия в среде является отрицательной. Диэлектрическая проницаемость материалов зависит от молекулярной структуры. Увеличение или уменьшение диэлектрической проницаемости во время изменения фазы зависит от конкретных фаз, при этом на границах фаз могут происходить резкие изменения диэлектрической проницаемости, сопровождающиеся изменениями температуры (см. рис. 9).

6. Электронная структура

Квантово-химические расчеты с полной оптимизацией геометрии выбранной молекулы проводились методом B3LYP, основанным на теории функционала плотности с базисом 6-311G++ (d,p) [52]. Были выполнены расчеты квантово-химических параметров НОМО и LUMO. В рамках настоящего исследования изучались молекулярные свойства соединений, в первую очередь, реакционная способность и селективность, которые оценивались с применением теории Купмана, основанной на энергиях НОМО ($E_{\text{НОМО}}$) и LUMO (E_{LUMO}) [53, 54].

Данная теория может быть использована для оценки многих количественных химических параметров, например, энергии ионизации (I) и сродства к электрону (A). В квантовой химии энергия ионизации представляет собой энергию, необходимую для удаления электронов хи-

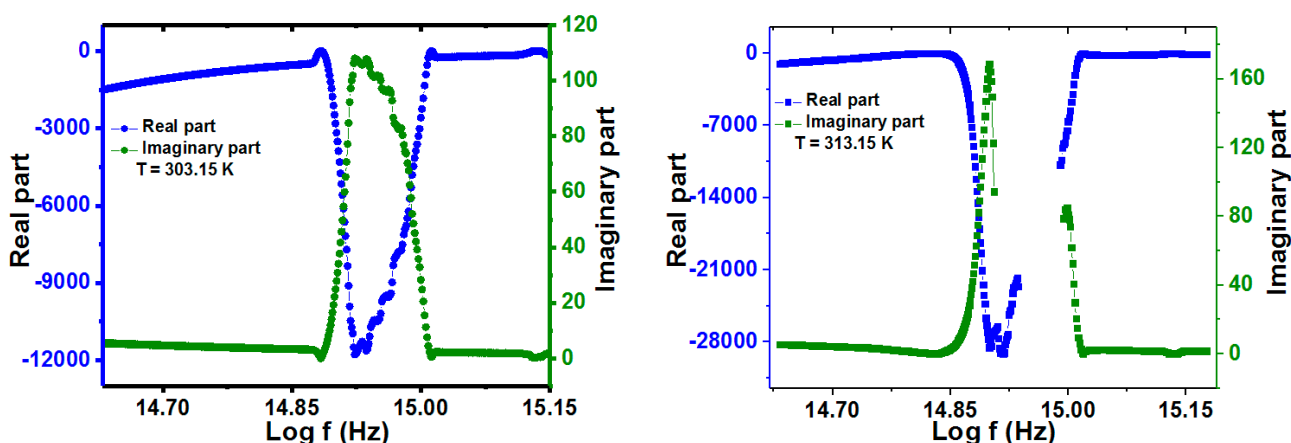


Рис. 9. Диэлектрическая проницаемость и диэлектрические потери молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксифенилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в ДМСО при второй концентрации (см. табл. 1)

мического соединения в газовой фазе или в изолированном состоянии. Согласно теории Купмана, энергия НОМО может быть использована для описания процесса ионизации химического соединения, а именно, энергия НОМО соответствует энергии, необходимой для удаления электрона из молекулы. Энергию ионизации можно рассчитать на основе следующего уравнения, при этом энергия ионизации противоположна энергии НОМО [55]:

$$I = -E_{\text{НОМО}} \quad (17)$$

В газовой фазе и изолированном состоянии изменение энергии, выделяемой или поглощаемой при присоединении электрона, можно описать сродством к электрону. Сродство к электрону рассчитывается на основе энергии LUMO, поскольку энергия LUMO указывает на сродство к присоединенному электрону, который займет низшую вакантную молекулярную орбиталь. Используя теорему Купмана, можно вычислить сродство к электрону, которое противоположно энергии LUMO:

$$A = -E_{\text{LUMO}} \quad (18)$$

Следующее уравнение позволяет рассчитать ширину запрещенной зоны, которая равна разности между E_{LUMO} и $E_{\text{НОМО}}$:

$$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{НОМО}} \quad (19)$$

Существует большой разброс значений ширины запрещенной зоны для молекул с межмолекулярными связями, или, например, при сильном ионном взаимодействии между молекулами, ширина запрещенной зоны которых сильно различается. Молекулы с прочными ковалент-

ными связями имеют близкие значения ширины запрещенной зоны. Важным параметром для описания химической активности является твердость и мягкость молекул. Данное свойство имеет большое значение для обеспечения эффективных методов ингибирования коррозии. При этом мягкая молекула обладает более высокой эффективностью ингибирования, чем твердая молекула. Химическую твердость (η) и мягкость (σ) можно рассчитать с помощью следующего соотношения:

$$\eta = \frac{I - A}{2}, \quad (20)$$

$$\sigma = \frac{1}{\eta} \quad (21)$$

Абсолютная электроотрицательность (по шкале Милликена) – одна из важнейших характеристик, которую можно определить посредством квантово-химических расчетов. Абсолютная электроотрицательность представляет собой энергию, равную полусумме потенциала ионизации атома и сродства к электрону. Молекулы с высокой электроотрицательностью являются мощными акцепторами электронов или электрофилами. Молекулы, со способностью отдавать электроны, т. е. нуклеофилы, обладают более низкой электроотрицательностью. Электроотрицательность (по шкале Милликена) (χ) можно записать следующим образом [56]:

$$\chi = \frac{I + A}{2} \quad (22)$$

Рассчитанные параметры энергии НОМО, энергии LUMO, энергии ионизации (I), сродства к

электрону (A), ширины запрещенной зоны (ΔE), твердости (η), мягкости (σ), электроотрицательности (χ), химического потенциала (CP), индекса электрофильности (w), нуклеофильности (N), энергии обратной донорно-акцепторной связи (ΔE_{B-d}) и переноса электронов (ΔN) для растворителя ДМСО приведены в табл. 3. На рис. 10 показаны НОМО и LUMO молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в ДМСО с оптимизацией геометрии с использованием расчетной модели теории функционала плотности (DFT) B3LYP с базисом 6-311G++ (d, p).

Теоретические и экспериментальные значения ширины запрещенной зоны согласуются между собой. Экспериментальные значения E_g при разных концентрациях и температурах несколько отличаются от теоретических значений. Исследуемая молекула имеет высокое значение индекса электрофильности, а молекула с высоким индексом электрофильности имеет более мощный поток электронов и, как следствие, более низкую энергию.

7. Карта распределения электростатического потенциала

Распределение заряда по поверхности молекулы анализировалось в трех измерениях (X , Y , Z) с помощью электрического потенциала поверхности молекулы [57]. Молекулярный электростатический потенциал (МЭП) позволяет визуализировать переменные заряженные области молекулы и создавать карту, которая позволяет определять химические реакции и взаимодействия с другими молекулами [58, 59]. Такая карта особенно полезна при описании химических

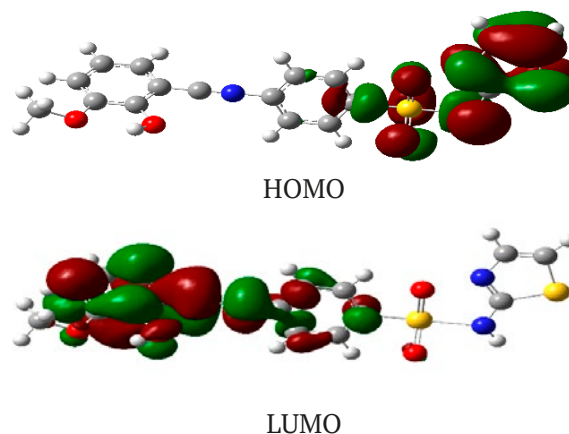


Рис. 10. НОМО и LUMO молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в ДМСО с оптимизацией геометрии с использованием расчетной модели теории функционала плотности (DFT) B3LYP с базисом 6-311G++ (d, p)

связей. Цветовая разметка карты позволяет наглядно продемонстрировать распределение заряда на поверхности антрацена. Оптимизация геометрии проводилась методом функционала плотности (DFT) B3LYP с базисом 6-311G++ (d, p). Как видно из карты, красный цвет, указывающий на присутствие электронов, преимущественно окружающих связи серы с атомами O32 и O33, сменяется желтыми областями, расположенными между углеродными и водородными связями. Водород обозначен зеленым цветом, что указывает на его более низкую электроотрицательность по сравнению с красной и желтой областями (см. рис. 11). МЭП дает представле-

Таблица 3. Параметры квантовых вычислений НОМО и LUMO молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в ДМСО с оптимизацией геометрии с использованием расчетной модели теории функционала плотности (DFT) B3LYP с базисом 6-311G++ (d, p)

$E_{НОМО}$ (эВ)	E_{LUMO} (эВ)	ΔE (эВ)	I	A	η	σ	χ	CP	w	N	ΔE_{B-d}	ΔN
-5.40	-2.54	2.86	5.40	2.54	1.43	0.69	3.97	-3.9	5.51	0.18	-0.358	1.05

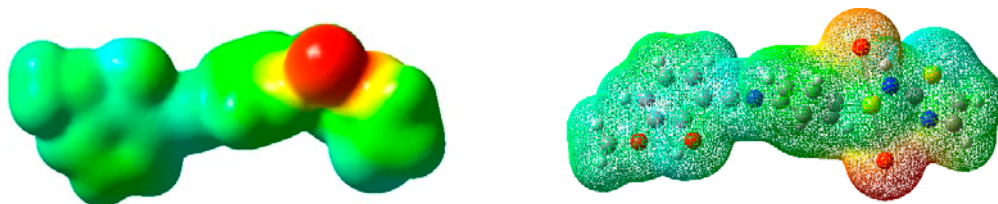


Рис. 11. Карта распределения электростатического потенциала молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в ДМСО на основе модели теории функционала плотности (DFT) B3LYP с базисом 6-311G++ (d, p)

ние о диапазоне поляризации, причем электроотрицательность молекулы играет значительную роль в определении поляризации зарядов. Области, в которых цвета не пересекаются, помогают эффективно идентифицировать области с высокими отрицательными или положительными зарядами. Примечательно, что области отрицательного потенциала сосредоточены вокруг углеродных резонансных связей бензольных колец. Карта молекулярного электростатического потенциала подчеркивает устойчивое отталкивание в областях положительного потенциала атомов водорода с дислокациями на краях материала, в то время как для углеродных связей характерно притяжение.

8. Заключение

В данной работе были исследованы оптические характеристики молекулы 4-((2-гидрокси-3-метоксибензилиден)амино)-N-(тиазол-2-ил)бензолсульфонамида в ДМСО. Отмечено, что возможна настройка ширины запрещенной зоны молекулы за счет изменения ее концентрации. Примечательно, что показатель преломления, который определяли в сравнении с другими зависимостями, показал самое низкое значение. Исследование также показало, что температура оказывает влияние на пространственное расположение атомов, образующих молекулярную структуру. По мере повышения температуры оптическая плотность среды образца уменьшается из-за увеличения колебаний атомов, что приводит к увеличению межатомных расстояний. Таким образом, при повышенных температурах оптическая плотность среды уменьшается, что приводит к увеличению скорости света и уменьшению показателя преломления, а следовательно, изменению угла отклонения. Если оптическая проводимость показала незначительные расхождения при повышенных температурах, то электропроводность продемонстрировала более высокие значения и вариации. Кроме того, согласно расчетам в рамках теории функционала плотности (DFT), в растворителе ДМСО молекула имеет более низкое значение мягкости и более высокое значение твердости. Изучение таких параметров, как электрофильность и нуклеофильность, имеющих большое значение для описания электронодефицитных (электрофильных) соединений и соединений богатых электронами (нуклеофильных), показало, что для данной молекулы характерно высокое значение индекса электрофильности и низкое значение нуклеофильности.

Вклад авторов

Все авторы внесли эквивалентный вклад в подготовку публикации.

Конфликт интересов

Авторы подтвердили отсутствие конфликта интересов.

References

1. Shafiee A., Ghadiri E., Kassis J., Williams D., Atala A. Energy band gap investigation of biomaterials: A comprehensive material approach for biocompatibility of medical electronic devices. *Micromachines*. 2020;11(1): 105. <https://doi.org/10.3390/mi11010105>
2. Mamand D. M., Qadr H. M. Density functional theory and computational simulation of the molecular structure on corrosion of carbon steel in acidic media of some amino acids. *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 2022;96: 2155–2165. <https://doi.org/10.1134/s0036024422100193>
3. Qadr H. M., Mamand D. Measuring energy loss of alpha particles in hydrogen gas. *El-Cezeri Fen ve Mühendislik Dergisi*. 2023;10: 433–438. <https://doi.org/10.31202/ecjse.1195041>
4. Vieira D. F., Avellaneda C. O., Pawlicka A. Conductivity study of a gelatin-based polymer electrolyte. *Electrochimica Acta*. 2007;53: 1404–1408. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2007.04.034>
5. Fujita S.-I., Kawamori H., Honda D., Yoshida H., Arai M. Photocatalytic hydrogen production from aqueous glycerol solution using NiO/TiO₂ catalysts: Effects of preparation and reaction conditions. *Applied Catalysis B: Environmental*. 2016;181: 818–824. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2015.08.048>
6. Nan H., Ping Y., Xuan C., ... Tingfei, X. Blood compatibility of amorphous titanium oxide films synthesized by ion beam enhanced deposition. *Biomaterials*. 1998;19(7-9): 771–776. [https://doi.org/10.1016/s0142-9612\(98\)00212-9](https://doi.org/10.1016/s0142-9612(98)00212-9)
7. Qadr H. M. A Molecular dynamics study of temperature dependence of the primary state of cascade damage processes. *Russian Journal of Non-Ferrous Metals*. 2021;62: 561–567. <https://doi.org/10.3103/s1067821221050096>
8. Abram R. A., Childs G. N., Saunderson P. A. Band gap narrowing due to many-body effects in silicon and gallium arsenide. *Journal Of Physics C: Solid State Physics*. 1984;17: 6105. <https://doi.org/10.1088/0022-3719/17/34/012>
9. Hudgins J. L., Simin G. S., Santi E., Khan M. A. An assessment of wide bandgap semiconductors for power devices. *Ieee Transactions On Power Electronics*. 2003;18: 907–914. <https://doi.org/10.1109/tpel.2003.810840>

10. Rawal S. B., Bera S., Lee D., Jang D.-J., Lee W. I. Design of visible-light photocatalysts by coupling of narrow bandgap semiconductors and TiO₂: Effect of their relative energy band positions on the photocatalytic efficiency. *Catalysis Science & Technology*. 2013;3: 1822–1830. <https://doi.org/10.1039/c3cy00004d>
11. Örek C., Arslan F., Gündüz B., Kaygili O., Bulut N. Comparison of experimental photonic and refractive index characteristics of the TBADN films with their theoretical counterparts. *Chemical Physics Letters*. 2018;696: 12–18. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2018.02.035>
12. Örek C., Gündüz B., Kaygili O., Bulut N. Electronic, optical, and spectroscopic analysis of TBADN organic semiconductor: Experiment and theory. *Chemical Physics Letters*. 2017;678: 130–138. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2017.04.050>
13. Mohan S., Kato E., Drennen Iii J. K., Anderson C. A. Refractive index measurement of pharmaceutical solids: A review of measurement methods and pharmaceutical applications. *Journal of Pharmaceutical Sciences*. 2019;108: 3478–3495. <https://doi.org/10.1016/j.xphs.2019.06.029>
14. Qadr H. M. Investigation of gamma ray buildup factor for some shielding absorber. *Cumhuriyet Science Journal*. 2022;43: 520–525. <https://doi.org/10.17776/csj.1098571>
15. Chaudhary A., Nagaich U., Gulati N., Sharma V. K., Khosa R. L., Partapur M. U. Enhancement of solubilization and bioavailability of poorly soluble drugs by physical and chemical modifications: A recent review. *Journal of Advanced Pharmacy Education and Research*. 2012;2: 32–67.
16. Al-Otaibi J. S., Mary Y. S., Thomas R., Kaya S. Detailed electronic structure, physico-chemical properties, excited state properties, virtual bioactivity screening and sers analysis of three guanine based antiviral drugs valacyclovir HCl hydrate, acyclovir and ganciclovir. *Polycyclic Aromatic Compounds*. 2022;42: 1260–1270. <https://doi.org/10.1080/10406638.2020.1773876>
17. Mamand D. M., Awla A. H., Anwer T. M. K., Qadr H. M. Quantum chemical study of heterocyclic organic compounds on the corrosion inhibition. *Chimica Techno Acta*. 2022;9: 20229203. <https://doi.org/10.15826/chimtech.2022.9.2.03>
18. Qadr H. M. Effect of γ irradiation on the mechanical properties of high and low copper. *Atom Indonesia*. 2020;46: 47–51. <https://doi.org/10.17146/aij.2020.923>
19. Zhang J., Tang H., Liu Z., Chen B. Effects of major parameters of nanoparticles on their physical and chemical properties and recent application of nanodrug delivery system in targeted chemotherapy. *International Journal of Nanomedicine*. 2017;12: 8483. <https://doi.org/10.2147/ijn.s148359>
20. Qadr H. M. A molecular dynamics calculation to cascade damage processes. *The Annals of “Dunarea de Jos” University of Galati. Fascicle IX, Metallurgy and Materials Science*. 2020;43: 13–16. <https://doi.org/10.35219/mms.2020.4.02>
21. Sechadri S., Rasheed M. P., Sangeetha R. Molecular structure, spectroscopic (FTIR, FT-Raman, ¹³C and ¹H NMR, UV), polarizability and first-order hyperpolarizability, HOMO–LUMO analysis of 2,4-difluoroacetophenone. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 2015;7: 56–70. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2014.09.069>
22. Aziz D. M., Azeez H. J. Synthesis of new β -lactam-N-(thiazol-2-yl)benzene sulfonamide hybrids: Their in vitro antimicrobial and in silico molecular docking studies. *Journal of Molecular Structure*. 2020;1222: 128904. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.128904>
23. Brisdon A. K. *Inorganic spectroscopic methods*. New York: Oxford University Press; 1998. <https://doi.org/10.1093/hesc/9780198559498.001.0001>
24. Coskun D., Gunduz B., Coskun M. F. Synthesis, characterization and significant optoelectronic parameters of 1-(7-methoxy-1-benzofuran-2-yl) substituted chalcone derivatives. *Journal of Molecular Structure*. 2019;1178: 261–267. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2018.10.043>
25. Choi W. S., Yoon J.-G. Optical characterization of band gap graded ZnMgO films. *Solid State Communications*. 2012;152: 345–348. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2011.12.019>
26. Tsukazaki A., Akasaka S., Nakahara K., ... Kawasaki M. Observation of the fractional quantum Hall effect in an oxide. *Nature Materials*. 2010;9: 889–893. <https://doi.org/10.1038/nmat2874>
27. Garimella S. V., Persoons T., Weibel J. A., Gektin V. Electronics thermal management in information and communications technologies: Challenges and future directions. *IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology*. 2016;7: 1191–1205. <https://doi.org/10.1109/tcpmt.2016.2603600>
28. Trew R. J. Wide bandgap semiconductor transistors for microwave power amplifiers. *IEEE Microwave Magazine*. 2000;1: 46–54. <https://doi.org/10.1109/6668.823827>
29. Neudeck P. G., Okojie R. S., Chen L.-Y. High-temperature electronics - a role for wide bandgap semiconductors? *Proceedings of The Ieee*. 2002;90: 1065–1076. <https://doi.org/10.1109/jproc.2002.1021571>
30. Mamand D. M., Anwer T. M. K., Qadr H. M. Theoretical investigation on corrosion inhibition

- effect of oxadiazole: Dft calculations. *Oxidation Communications*. 2022;45: 600-267.
31. Mamand D. M., Qadr H. M. Corrosion inhibition efficiency of quinoxalines based on electronic structure and quantum computational analysis. *Revue Roumaine de Chimie*. 2023;68: 435–446.
32. Cassabois G., Valvin P., Gil B. Hexagonal boron nitride is an indirect bandgap semiconductor. *Nature Photonics*. 2016;10: 262–266. <https://doi.org/10.1038/nphoton.2015.277>
33. Mamand D. M., Anwer T. M., Qadr H. M., Mussa C. H. Investigation of spectroscopic and optoelectronic properties of phthalocyanine molecules. *Russian Journal of General Chemistry*. 2022;92: 1827–1838. <https://doi.org/10.1134/s1070363222090249>
34. Schütz A., Günthner M., Motz G., Greißl O., Glatzel U. Characterisation of novel precursor-derived ceramic coatings with glass filler particles on steel substrates. *Surface and Coatings Technology*. 2012;207: 319–327. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2012.07.013>
35. Tripathy S. K. Refractive indices of semiconductors from energy gaps. *Optical Materials*. 2015;46: 240–246. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2015.04.026>
36. Qadr H. M., Mamand D. M. A Computational study of substituent effect 1, 3, 4-thiadiazole on corrosion inhibition. *Azerbaijan Chemical Journal*. 2023; 19–29. <https://doi.org/10.32737/0005-2531-2023-2-19-29>
37. Mamad D. M., Omer P. K., Rasul H. H., Qadr H. M. A Theoretical study of structure and corrosion inhibition of some heterocyclic imidazoles: DFT investigation. *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*. 2023;59: 489–501. <https://doi.org/10.3103/s1068375523040099>
38. Mamad D. M., Qadr H. M. Quantum computations and density functional theory on corrosion inhibition efficiency of BIA, HBT, MBI and PIZ compounds. *Himia, Fizika ta Tehnologija Poverhni*. 2023;14: 159–172. <https://doi.org/10.15407/hftp14.02.159>
39. Herve P., Vandamme L. K. J. General relation between refractive index and energy gap in semiconductors. *Infrared Physics & Technology*. 1994;35: 609–615. [https://doi.org/10.1016/1350-4495\(94\)90026-4](https://doi.org/10.1016/1350-4495(94)90026-4)
40. Reddy R. R., Ahammed Y. N. A study on the Moss relation. *Infrared Physics & Technology*. 1995;36: 825–830. [https://doi.org/10.1016/1350-4495\(95\)00008-m](https://doi.org/10.1016/1350-4495(95)00008-m)
41. Ravindra N. M., Ganapathy P., Choi J. Energy gap–refractive index relations in semiconductors – An overview. *Infrared Physics & Technology*. 2007;50: 21–29. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2006.04.001>
42. Aly K. M., Esmail E. Refractive index of salt water: effect of temperature. *Optical Materials*. 1993;2: 195–199. [https://doi.org/10.1016/0925-3467\(93\)90013-q](https://doi.org/10.1016/0925-3467(93)90013-q)
43. Mamand D. M., Qadr H. M. Corrosion inhibition efficiency and quantum chemical studies of some organic compounds: theoretical evaluation. *Corrosion Reviews*. 2023;41: 427–441. <https://doi.org/10.1515/corrrev-2022-0085>
44. Wesely M. L. The combined effect of temperature and humidity fluctuations on refractive index. *Journal of Applied Meteorology*. 1976; 43–49. [https://doi.org/10.1175/1520-0450\(1976\)015<0043:tceota>2.0.co;2](https://doi.org/10.1175/1520-0450(1976)015<0043:tceota>2.0.co;2)
45. Mamand D. M., Azeez Y. H., Qadr H. M. Monte Carlo and DFT calculations on the corrosion inhibition efficiency of some benzimide molecules. *Mongolian Journal Of Chemistry*. 2023;24: 1–10. <https://doi.org/10.5564/mjc.v24i50.2435>
46. Tripathy S. K., Pattanaik A. Optical and electronic properties of some semiconductors from energy gaps. *Optical Materials*. 2016;53: 123–133. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2016.01.012>
47. Dresselhaus M. S. *Solid State Physics part II Optical properties of solids*. Lecture Notes. Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Ma; 2001;17: 15–16.
48. Patterson J. D., Bailey B. C., Patterson J. D., Bailey B. C. Optical properties of solids. In: *Solid-State Physics*. Springer, Cham.; 2018. 649–704. https://doi.org/10.1007/978-3-319-75322-5_10
49. Dalven R. *Introduction to applied solid state physics: Topics in the applications of semiconductors, superconductors, ferromagnetism, and the nonlinear optical properties of solids*. Springer Science & Business Media; 2012.
50. Dong H. M., Zhang J., Peeters F. M., Xu W. Optical conductance and transmission in bilayer graphene. *Journal of Applied Physics*. 2009;106: 043103. <https://doi.org/10.1063/1.3200959>
51. Yücedağ I., Altındal Ş., Tataroğlu A. On the profile of frequency dependent series resistance and dielectric constant in MIS structure. *Microelectronic Engineering*. 2007;84: 180–186. <https://doi.org/10.1016/j.mee.2006.10.071>
52. Dege N., Gökce H., Doğan O. E., ... Sert Y. Quantum computational, spectroscopic investigations on N-(2-((2-chloro-4,5-dicyanophenyl)amino)ethyl)-4-methylbenzenesulfonamide by DFT/TD-DFT with different solvents, molecular docking and drug-likeness researches. *Colloids And Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. 2022;638: 128311. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2022.128311>
53. Mamand D. M., Qadr H. M. Comprehensive spectroscopic and optoelectronic properties of BBL organic semiconductor. *Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces*. 2021;57: 943–53. <https://doi.org/10.1134/s207020512105018x>

54. Mamand D. M., Qadr H. M. Optoelectronic properties of benzimidazobenzophenanthroline thin film. *Russian Microelectronics*. 2023;52: 325–336. <https://doi.org/10.1134/s1063739723700531>

55. Qadr H. M., Mamand D. M. Molecular structure and density functional theory investigation corrosion inhibitors of some oxadiazoles. *Journal of Bio- and Tribo-Corrosion*. 2021;7: 140. <https://doi.org/10.1007/s40735-021-00566-9>

56. Putz M. V., Russo N., Sicilia E. About the Mulliken electronegativity in DFT. *Theoretical Chemistry Accounts*. 2005;114: 38–45. <https://doi.org/10.1007/s00214-005-0641-4>

57. Medimagh M., Mleh C. B., Issaoui N., ... Bousiakoug L. G.. DFT and molecular docking study of the effect of a green solvent (water and DMSO) on the structure, MEP, and FMOs of the 1-ethylpiperazine-1,4-dium bis(hydrogenoxalate) compound. *Compound. Journal Of Molecular Liquids*. 2023;369: 120851. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.120851>

58. Ramalingam S., Babu P. D. S., Periandy S., Fereyduni E. Vibrational investigation, molecular orbital studies and molecular electrostatic potential map analysis on 3-chlorobenzoic acid using hybrid computational calculations. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 2011;84: 210–220. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2011.09.030>

59. Mamand D. M., Rasul H. H., Omer P. K., Qadr H. M. Theoretical and experimental investigation on ADT organic semiconductor in different solvents. *Condensed Matter And Interphases*. 2022;24(2): 227–42. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/9263>

Информация об авторах статьи

Диарий Мустафа Маманд, магистр по направлению «Физика атомов и молекул», кафедра физики, Университет Рапарин (Сулеймания, Ирак)
<https://orcid.org/0000-0002-1215-7094>
dyari.mustafa@uor.edu.krd

Дара Муххамед Азиз, доктор наук по направлению «Органическая химия», кафедра химии, Университет Рапарин (Сулеймания, Ирак)
<https://orcid.org/0000-0003-3362-6301>
darachem@uor.edu.krd

Хива Мохаммад Квадр, магистр по направлению «Физика», преподаватель кафедры физики, Университет Рапарин (Сулеймания, Ирак)
<https://orcid.org/0000-0001-5585-3260>
hiwa.physics@uor.edu.krd

Поступила в редакцию 24.02.2023; одобрена после рецензирования 24.06.2023; принята к публикации 16.09.2023; опубликована онлайн 25.03.2024.