



Оригинальные статьи

Научная статья

УДК 544.18

<https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/9263>

**Теоретическое и экспериментальное исследование антрадитиофена в различных растворах**

Д. М. Маманд<sup>1</sup>, Х. Х. Расул<sup>1</sup>, П. Х. Омер<sup>2</sup>, Х. М. Квадр<sup>1</sup>✉

<sup>1</sup>Университет Рапарин, Колледж естественных наук, кафедра физики, Сулеймания, Ирак

<sup>2</sup>Университет Рапарин, Колледж естественных наук, кафедра химии, Сулеймания, Ирак

**Аннотация**

Целью нашего исследования было изучить свойства органического полупроводника антрадитиофена с использованием теоретических и экспериментальных методов. В статье рассматривается влияние растворителей на оптические и электрические свойства антрадитиофена. В ходе экспериментов рассчитывались следующие оптоэлектронные свойства: ширина запрещённой зоны, график Тауца, прозрачность, электрическая проводимость, оптические и диэлектрические свойства. В теоретических расчётах на основе определения энергии молекулярных орбиталей НОМО и LUMO рассчитывалась ширина запрещённой зоны. Средняя разность между энергиями НОМО и LUMO составила 2.84 эВ для пяти базисных наборов в газовой фазе. Методом Фурье-ИК-спектроскопии определялись функциональные группы вещества и области, в которых не происходит поглощение. Для пяти базисных наборов эта область наблюдалась в среднем диапазоне длин волн в диапазоне от 1650 см<sup>-1</sup> до 3200 см<sup>-1</sup>. Также проводилась УФ-спектроскопия и спектроскопия в видимом диапазоне. Средняя ширина запрещённой зоны составила 2.59 эВ. Исследование показало, что в молекулах антрадитиофена наблюдается непрямой разрешённый переход.

**Ключевые слова:** оптическая спектроскопия в УФ и видимой области, Фурье-ИК-спектроскопия, НОМО, LUMO, метод Хартри-Фока, теория функционала плотности

**Для цитирования:** Маманд Д. М., Расул Х. Х., Омер П. Х., Квадр Х. М. Теоретическое и экспериментальное исследование антрадитиофена в различных растворах. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2022;24(2): 227–242. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/9263>

**For citation:** 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): 227–242. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/9263>

✉ Хива Мохаммад Квадр, e-mail: [hiwa.physics@uor.edu.krd](mailto:hiwa.physics@uor.edu.krd)

© Маманд Д. М., Расул Х. Х., Омер П. Х., Квадр Х. М., 2022



## 1. Введение

В статье рассматриваются органические полупроводники – материалы, отличающиеся от традиционных неорганических полупроводников более низкой стоимостью и простотой производства. Органические полупроводники применяются для создания тонкоплёночных транзисторов, светодиодов, солнечных элементов и фоторефракционных устройств. Малая молекулярная масса данных растворимых материалов позволяет получать высококачественные токопроводящие тонкие плёнки методом осаждения из растворов [1–6]. Органические тонкоплёночные транзисторы, полученные на основе пентацена или олиготиофена, демонстрируют подвижность носителей заряда в диапазоне  $0.1–1 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$  с большими отношениями токов включения/выключения [1]. Наиболее значимыми характеристиками полупроводников в тонкоплёночном состоянии являются высокая подвижность носителей заряда, низкая проводимость, стабильность и технологичность [7, 8].

Антрадитиофен (АДТ) показал лучшую стабильность, чем пентацен, а ширина его запрещённой зоны примерно на 0.6 эВ меньше. Потенциал ионизации антрадитиофена составляет 6.15 эВ, а энергия реорганизации составляет 0.094 эВ, что соответствует значению энергии реорганизации, полученному для пентацена [9–17]. Небольшая химическая модификация боковых групп как антрадитиофена, так и производных пентацена приводит к значительным отличиям в молекулярной упаковке, что сказывается на электронных и оптических свойствах тонкоплёночных транзисторов [1]. Монокристалл, модифицированный Н. Katz и др., наиболее часто используется в качестве основы как для низко-

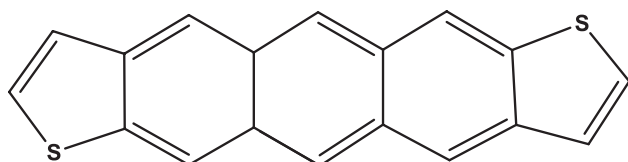


Рис. 1. Химическое строение антрадитиофена

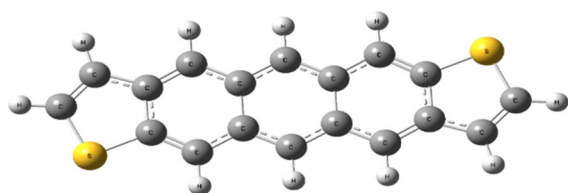


Рис. 2. Оптимизированный органический полупроводник на основе антрадитиофена

молекулярных проводников, так и для полимерных систем [7]. Антрадитиофены используются для полевых транзисторов с дырочной подвижностью порядка  $0.1 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$  [12, 13]. Однако разница в подвижности для антиизомеров антрадитиофена составляет  $0.12 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$  [8]. Дырочная подвижность монокристаллов антрадитиофена возрастает при уменьшении температуры в соответствии со степенным законом ( $\mu \propto T^{-n}$ ) [13, 14].

О. Kwon et al. изучили антрадитиофен и пришли к выводу, что его электронная структура, межмолекулярные взаимодействия, а также внутримолекулярные колебательные моды схожи с таковыми для пентацена [15]. Авторы также продемонстрировали, что после первой ионизации антра[2, 3-b: 6, 7-b']дитиофена вертикальный потенциал ионизации составляет около 6.6996 эВ, при этом антиизомеры антрадитиофена устойчивее синизомеров примерно на 0.2 ккал/моль. Изогнутые молекулы антрадитиофена имеют значение энергии уровня НОМО (–4.81 эВ), а значение энергии LUMO составляет –2.02 эВ. Ширина запрещённой зоны составляет 2.79 эВ. Антрадитиофен демонстрирует высокую окислительную устойчивость в органических полевых транзисторах благодаря низким значениям НОМО [16].

В некоторых исследованиях описано использование доноров и акцепторов антрадитиофена для синтеза соответствующих сополимеров с целью изучения их фотоэлектрических характеристик. Антрадитиофен получали ранее описанным способом. Тонкие (10 мкм) плёнки монокристалла антрадитиофена были выращены из паровой фазы в потоке газа [7]. J. Schön et al. [15] изучили свойства антрадитиофена и зависимость переноса заряда от температуры в слоях *p*-типа проводимости и пришли к выводу о существовании обратной пропорциональной зависимости горизонтальной подвижности носителей заряда от температуры. Антрадитиофен получали как смесь син- и антиизомеров в связи с затруднённой отрыва изомеров [13].

В настоящей работе рассматриваются оптоэлектронные свойства высококачественных органических материалов на основе антрадитиофена, химическое строение которого представлено на рис. 1. Также исследуются молекулярная структура, отражательная способность, диэлектрическая проницаемость и ширина запрещённой зоны.

## 2. Вычислительные процедуры

Для теоретических расчётов нами было использовано ПО Gaussian 09 [19]. В литературе по

данному вопросу описано использование различных программ (в зависимости от задачи исследования) для анализа молекулярной структуры и квантово-химических расчётов, оптимизированная структура молекулы показана на рис. 2. В настоящей работе для определения оптических свойств и структуры молекул мы использовали карту распределения электростатического потенциала, УФ-спектроскопию и спектроскопию в видимой области спектра. Сначала проводилась оптимизация структуры молекул в различных базисных наборах с последующим сопоставлением. На основе теории функционала плотности с использованием различных базисов рассчитывались энергии НОМО (высшая занятая молекулярная орбиталь) и LUMO (низшая незанятая молекулярная орбиталь). Также сопоставлялись результаты теоретических и экспериментальных расчётов ширины запрещённой зоны. Далее мы сопоставляли результаты УФ-спектроскопии и спектроскопии в видимой области, расчёты энергий НОМО и LUMO, а также карты распределения электростатического потенциала, составленные с использованием метода Хартри–Фока и теории функционала плотности для различных базисов. В частности, мы использовали базисные наборы Split-Valence Basis Sets (SVBSs) 6-31G и 6-311G. Кроме того, для большей достоверности можно использовать поляризационные функции 6-311++ (d,p), базис 3-21G, который имеет поляризационные функции только для атомов второго периода, и базисы LANL2DZ (Los Alamos National Laboratory 2 double  $\xi$ ) для переходных металлов.

### 2.1. Теоретический расчёт свойств молекул антрадиитофена

В ходе исследования некоторые свойства молекулы антрадиитофена были определены посредством аппроксимации различных базисов с использованием теории функционала плотности и метода Хартри–Фока.

Способность молекул отдавать или присоединять электроны определяется на основе теории кислот и оснований Льюиса. НОМО указывает на существование молекул с высокой способностью отдавать электроны, а LUMO указывает на способность присоединять электроны [20].

Энергия ионизации рассчитывается на основе энергии НОМО. Так, для отрыва электронов химического соединения в газовой фазе или в изолированном состоянии требуется энергия. Теоретически, мы можем использовать теорему Купманса для интерпретации и оценки энергии

ионизации химических соединений, т. е. энергии, необходимой для того, чтобы электрон покинул молекулярную орбиталь НОМО [21, 22]:

$$I = -E_{\text{НОМО}}. \quad (1)$$

В газовой фазе или в изолированном состоянии изменение энергии реакции присоединения электрона химическим веществом указывает на сродство к электрону. Энергия LUMO указывает на сродство к присоединённому электрону, учитывая, что принимаемый электрон займёт вакантную молекулярную орбиталь с самой низкой энергией в основном состоянии. В соответствии с теорией Купмана – фон Неймана энергия сродства к электрону  $A$  рассчитывается по следующей формуле:

$$A = -E_{\text{LUMO}}. \quad (2)$$

Разница энергий между НОМО и LUMO указывает на ширину запрещённой зоны и может быть выражена следующим образом:

$$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{НОМО}}. \quad (3)$$

Энергия НОМО и LUMO указывает на прочные ионные и ковалентные связи. Ковалентные связи образуются между молекулами с близкими значениями ширины запрещённой зоны. Значения ширины запрещённой зоны молекул сильно отличаются. Основываясь на этих значениях, можно установить некоторые физические и химические свойства частиц, в частности нелинейные свойства и расположение частиц малой энергии, которые должны проявлять нелинейно-оптические свойства и обладать фотопроводимостью.

Электроотрицательность, жёсткость и мягкость являются ключевыми параметрами для определения электронных свойств молекул. Мягкость молекул относится к большим и сильно поляризованным химическим частицам, а жесткость молекул – к малым и слабо поляризованным частицам:

$$\eta = \frac{I - A}{2}, \quad (4)$$

$$\sigma = \frac{1}{\eta}, \quad (5)$$

где  $\eta$  – жёсткость молекулы, а  $\sigma$  – мягкость. На основе теории функционала плотности и соотношения потенциала ионизации и сродства к электрону рассчитывается абсолютная электроотрицательность  $\chi$  (по шкале Милликена), которая представляет собой энергию, равную полу-

сумме потенциала ионизации атома и сродства к электрону. Способность молекулы принимать и отдавать электроны определяется её электроотрицательностью. Молекулы с высокой электроотрицательностью являются мощными акцепторами электронов. Молекулы с более низкой электроотрицательностью обладают способностью отдавать электроны:

$$\chi = \frac{A + I}{2}. \quad (6)$$

Молярная свободная энергия Гиббса и стандартная свободная энергия Гиббса чистого вещества определяются на основе химического потенциала. При малых значениях свободной энергии Гиббса наблюдается низкая активность вещества. Химический потенциал рассчитывается по следующей формуле:

$$CP = -\chi. \quad (7)$$

Ещё одним важным параметром молекулы является индекс электрофильности  $\omega$ . Он указывает на снижение энергии при максимальном потоке электронов на основе следующего уравнения:

$$\omega = \frac{(CP)^2}{2\eta}. \quad (8)$$

Индекс электрофильности отражает мощность потока электронов. Чем выше индекс, тем выше мощность потока.

В отношении значений ширины запрещённой зоны результаты аппроксимации методом Хартри–Фока не сходятся с результатами экспериментов с использованием различных растворителей (табл. 1). Результаты вычисления функционала плотности хорошо согласуются с экспериментальными результатами (табл. 2). Результаты вычисления функционала плотности можно использовать при анализе химических свойств молекул антрадифитофена, т. к. разница в значениях ширины запрещённой полосы составляет не более 1.3 эВ, особенно в растворе хлороформа. Оба метода использованы нами для определения квантового состояния многоэлектронных систем (молекул и кристаллов) на основе приближения Борна–Оппенгеймера. В базисных наборах отсутствуют функции для молекул антрадифитофена, т. к. согласно методу Хартри–Фока, волновая функция многоэлектронной системы выбирается в виде детерминанта Слэтера. Недостатком такого подхода является то, что многоэлектронная волновая функция не может быть представлена в виде отдельного детерминанта. Энергии, рассчитанные по методу Хартри–Фока, оказываются слишком высоки, а сам метод не позволяет в полной мере учесть электронную корреляцию. Для установления конфигурации с использованием данного метода необходимо определить полный базисный набор одноэлектронных волновых функций. Тогда для данных волновых функций точное значение волновой функции множества электронов

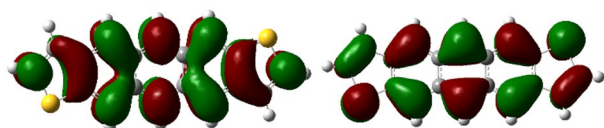
**Таблица 1.** Квантово-химический расчёт ряда свойств молекулы антрадифитофена для различных базисов по методу Хартри–Фока

Базис	HOMO	LUMO	<i>I</i>	<i>A</i>	$\Delta E$	$\eta$	$\sigma$	$\chi$	<i>CP</i>	<i>W</i>	$\mu$
6-21G	-6.85	1.16	6.85	-1.16	8.01	4.005	0.249	2.845	-2.84	1.01	0.989
6-31G	-6.697	1.184	6.697	-1.18	7.881	3.94	0.253	2.756	-2.75	0.96	1.03
6-31G (d, p)	-6.503	1.33	6.503	-1.33	7.833	3.91	0.255	2.586	-2.58	0.85	1.17
6-311G	-6.825	1.015	6.825	-1.01	7.84	3.92	0.255	2.905	-2.90	1.07	0.92
LanL2DZ	-6.827	0.893	6.827	-0.89	7.72	3.86	0.259	2.967	-2.96	1.14	0.87
SDD	-6.817	0.915	6.817	-0.91	7.73	3.86	0.25	2.95	-2.95	1.12	0.88

**Таблица 2.** Квантово-химический расчёт ряда свойств молекулы антрадифитофена для различных базисов согласно теории функционала плотности

Базис	HOMO	LUMO	<i>I</i>	<i>A</i>	$\Delta E$	$\eta$	$\sigma$	$\chi$	<i>CP</i>	<i>W</i>	$\mu$
6-21G	-2.103	-0.672	2.10	0.67	1.43	0.71	1.39	1.38	-1.38	1.345	0.743
6-31G	-4.969	-2.067	4.96	2.06	2.90	1.45	0.68	3.51	-3.51	4.264	0.234
6-31G (d, p)	-4.809	-2.024	4.80	2.02	2.78	1.39	0.71	3.41	-3.41	4.191	0.238
6-311G	-5.189	-2.299	5.18	2.29	2.89	1.44	0.69	3.74	-3.74	4.85	0.206
LanL2DZ	-5.113	-2.284	5.11	2.28	2.829	1.414	0.70	3.69	-3.69	4.835	0.206
SDD	-5.095	-2.271	5.09	2.27	2.824	1.412	0.708	3.68	-3.68	4.803	0.208

может быть представлено как линейный набор всех возможных детерминантов. В соответствии с теорией функционала плотности, волновая функция множества электронов принимается за электронную плотность согласно теоремам Хоэнберга–Кона [21, 22]. Расчёт полной энергии молекулы (т. е. энергии основного состояния) по методу функционала плотности производится с учётом электронной плотности. Полная энергия является функцией электронной плотности. Так, с учётом электронной плотности для минимизации энергии можно следовать принципу анизотропии. Недостатком теории функционала плотности является невозможность определить функционал энергии. Для расчётов по методу Хартри–Фока необходимо учитывать все пространственные и спиновые координаты всех электронов  $N$ . Преимущество же теории функционала плотности состоит в возможности учитывать только одну функцию одной пространственной координаты. Именно поэтому теория функционала плотности получила большее распространение. На рис. 3 представлена визуализация HOMO и LUMO для молекулы антрадифитофена  $C_{18}H_{10}S_2$ .



HOMO

LUMO

Рис. 3. HOMO и LUMO антрадифитофена  $C_{18}H_{10}S_2$

### 3. Исследование антрадифитофена методом ИК-спектроскопии с Фурье-преобразованием с использованием различных растворителей

Частоты гармонических колебаний антрадифитофена для разных базисных наборов рассчитывались с использованием метода Хартри–Фока и теории функционала плотности. В настоящем исследовании для подробного изучения функциональных групп молекул назначались колебательные полосы с использованием программы визуализации Gauss-View. Полученные данные сравнивали с результатами экспериментов. На рис. 4а, б показано соотношение теоретических и экспериментальных расчётов. Химическая структура антрадифитофена представляет собой антрацен (изоэлектронная фаза пентацена) с пятью линейно соединёнными ароматическими кольцами с  $C=C$  связями в бензольных кольцах и деформационными колебаниями в связях  $C-N$ . Как правило, присутствие в структуре одного или более ароматических колец можно установить сразу. Молекула антрадифитофена имеет четыре связи: одинарная связь  $C-C$ , двойная связь  $C=C$ , связь углерода и водорода  $C-H$  и связь между углеродом и серой  $C-S$  (как показано в табл. 3). ИК-спектроскопия также позволяет определить основные функциональные группы. Выделяют два типа колебаний – деформационные и валентные колебания. Частоты деформационных колебания гораздо меньше, чем частоты валентных колебаний тех же групп.

На рис. 4б показаны результаты ИК-Фурье спектроскопии молекулы антрадифитофена. В

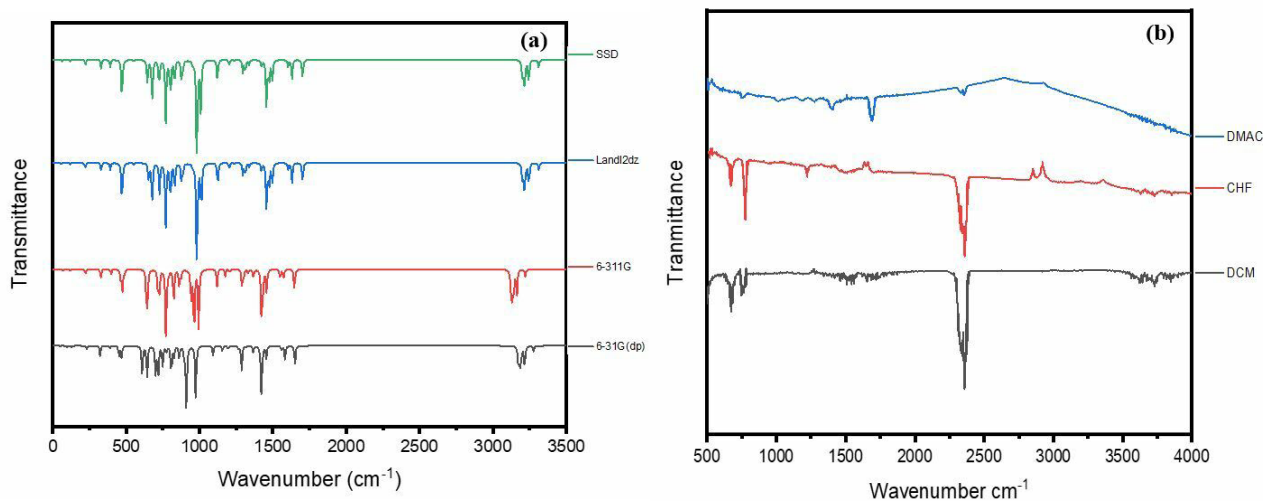


Рис. 4. Спектры оптического поглощения образцов антрадифитофена в растворе хлороформа, дихлорметана и диметилацетамида, установленные методом ИК-спектроскопии с Фурье-преобразованием: (а) теоретические, (б) экспериментальные

**Таблица 3.** Характеристические частоты поглощения функциональных групп в ИК спектре

Группа	Полоса поглощения (см <sup>-1</sup> )	Группа	Полоса поглощения (см <sup>-1</sup> )
Деформационные колебания С=C	1700–1500	Деформационные колебания С-Н	1650–2000
Валентные колебания С=C	1400–1600	Валентные колебания С-S	690–685
Валентные колебания С-С в кольце	1585–1600	Деформационные колебания С-Н вне плоскости	900–675
Валентные колебания С-Н	3000–3300	Деформационные колебания С-Н со слабым оборотом	1650–2000

качестве растворителей применялись дихлорметан (DCM), хлороформ (CHF) и диметилацетамид (DCM). В ИК спектре в области 2355 см<sup>-1</sup> для данных растворителей наблюдается чётко выраженный пик, указывающий на валентные колебания С-Н. ИК спектр в области 1693 см<sup>-1</sup> для раствора диметилацетамида соответствует водородной связи. В ИК спектре в области 1402 см<sup>-1</sup> для раствора диметилацетамида зафиксирована связь δC-H<sub>3</sub>. В ИК спектре в области 1219 см<sup>-1</sup> для раствора хлороформа зафиксированы группы CH<sub>2</sub> и CH<sub>3</sub>. В ИК спектре в области 772 см<sup>-1</sup> для раствора хлороформа зафиксированы сильные валентные колебания связи С-С. В ИК спектре в области 750 см<sup>-1</sup> для растворов хлороформа и дихлорметана зафиксированы деформационные колебания связи С-Н. В ИК спектре в области 668 см<sup>-1</sup> для растворов хлороформа и дихлорметана зафиксированы валентные колебания связи С-S.

### 3.1. УФ и видимый диапазон спектра

Органические полупроводниковые материалы имеют множество применений и обязаны своими полупроводниковыми свойствами наличием сопряжённых двойных связей в структуре молекул. *Sp*<sup>2</sup>-гибридизация атомов углерода приводит к формированию π и σ связей. Энергетический уровень состоит из двух разделённых областей, где высшая занятая молекулярная орбиталь (НОМО) представляет низший энергетический уровень, а низшая вакантная молекулярная орбиталь (LUMO) представляет высший энергетический уровень [25–27]. Органические красители в последнее время оказались в центре внимания как новые материалы для создания устройств с повышенной плотностью оптической записи благодаря ряду свойств, а именно низкой теплопроводности, разнообразию оптических характери-

стик и химической устойчивости. Ширина запрещённой зоны таких полупроводников является важной характеристикой при производстве устройств. Изменяя размер частиц и общую фотоактивность, можно существенно расширить гибридную полупроводниковую систему и изменить спектр оптического поглощения узкополосных полупроводников таким образом, что они будут поглощать излучение в видимой части спектра [28].

Ширина запрещённой зоны молекулы антра[2, 3-b: 6, 7-b']дитиофена рассчитана из спектров в УФ- и видимом диапазоне для растворов дихлорметана, хлороформа и диметилацетамида, как показано на рис. 5а и б. Поглощение – важная характеристика для оптоэлектроники. Для молекулы антрадитиофена максимальные пики наблюдаются при 296, 297 и 295 нм соответственно. Как видно из соответствующих кривых, наиболее широкий и устойчивый диапазон наблюдается у молекулы антрадитиофена в растворе дихлорметана. Наиболее активна молекула антрадитиофена на длинноволновом участке УФ спектра. Ширина запрещённой зоны молекулы антрадитиофена составляет 4.92 и 4.17 эВ в растворе хлороформа, 4.9 и 4.18 эВ в растворе дихлорметана и 4.2 и 4.59 эВ в растворе диметилацетамида. Данные значения оказываются достаточно близки при расчёте максимального поглощения для каждого раствора.

Важнейшим свойством полупроводниковых материалов является способность к поглощению света. О степени поглощения говорят коэффициенты поглощения α и *hν*. Ширина запрещённой зоны полупроводников определяется согласно следующему выражению *E<sub>g</sub>* [27]:

$$\alpha = \frac{2 \cdot 303A}{L}, \quad (9)$$

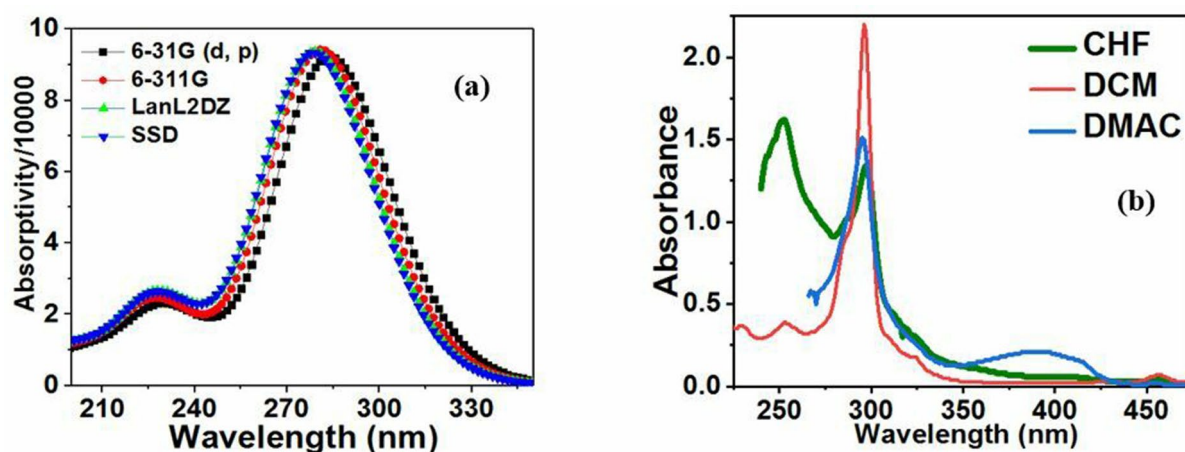


Рис. 5. УФ-видимые спектры молекулы антрадифитофена: (а) рассчитанные теоретически в различных базисных наборах и (б) экспериментальные в разных растворителях

Таблица 4. Максимальный спектр поглощения и ширина запрещённой зоны для антрадифитофена в различных растворах (теоретические и экспериментальные результаты)

Экспериментальные результаты	Дихлорметан		Хлороформ		Диметилацетамид				
	$\lambda_{max}$ , нм	253	296	252	297	265	295		
$E_g$ , эВ	4.92	4.17	4.9	4.18	4.2	4.59			
Теоретические результаты	631G (d, P)		6311G		LanL2DZ		SSD		
	$\lambda_{max}$ , нм	228	284	226.5	280	226	277	228	277.6
	$E_g$ , эВ	5.44	4.37	5.48	4.43	5.49	4.49	4.30	4.47

$$k = \frac{\alpha\lambda}{4\pi}, \tag{10}$$

где  $\alpha$  – коэффициент поглощения,  $A$  – поглощение, а  $L$  – толщина (в данном исследовании 1 см).

$$(\alpha h\nu) = A^* (h\nu - E_g)^m. \tag{11}$$

Здесь  $A^*$  – константа, а  $m$  – параметр измерения ширины запрещённой зоны. При этом для оптических переходов должно соблюдаться условие сохранения квазиимпульса и энергии. В физике полупроводников выделяют два типа полупроводников в зависимости от ширины запрещённой зоны: прямозонные 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. Если квазиимпульс электронов или дырок отличается в зоне проводимости и в валентной зоне, речь идёт о непрямозонном переходе. Импульс электрона в верхней части

валентной зоны и в нижней части зоны проводимости не всегда совпадает. Верхняя часть валентной зоны и нижняя часть зоны проводимости в прямозонных проводниках имеют одинаковое значение импульса. Сопоставив ширину запрещённой зоны в УФ и видимом диапазоне по методу Тауца, мы установили, что антрадифитофен является непрямозонным полупроводником. Значение  $m$  не зависит от типа запрещённой зоны и составляет 3/2 для запрещённого перехода, 3 для непрямозонного запрещённого перехода, 2 для непрямозонного разрешённого перехода.

На рис. 6 представлен график Тауца для молекулы антрадифитофена в сочетании с тремя разными растворителями. Прямой разрешённый переход наблюдается в линейной области. Ширина запрещённой зоны  $E_g$  для всех растворов составляет 4.058 и 4.07 эВ. Для раствора хлороформа  $E_g$  имеет такое же значение, а для раствора диметилацетамида  $E_g$  составляет 4,07 эВ.  $E_g$  полупроводниковых материалов имеет серьёзное значение при производстве солнеч-

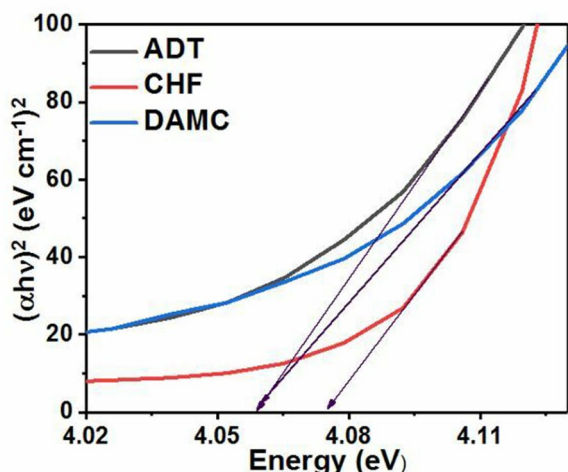


Рис. 6. График Тауца для молекулы антрадифитофена в различных растворителях

ных элементов, так как данные устройства являются высоковольтными и используются при высоких температурах. Использование других растворителей позволяет большему количеству электронов перейти в зону проводимости за счёт больших длин волн фотонов, как показано на рис. 5 и 6. При увеличении поглощения большее число электронов попадает в зону проводимости, за счёт чего повышается эффективность работы устройств.

### 3.2. Показатель преломления

В последнее время полупроводниковые материалы активно используются при производстве электроники и оптоэлектроники, включая такие устройства как фотодетекторы, лазеры, светодиоды, оптические модуляторы, функционирующие в средней ИК-области (2–5 мкм), а также интегральные схемы. Показатель преломления и ширина запрещённой зоны – два важнейших параметра полупроводниковых материалов [30, 31]. Показатель преломления связан со структурой материала и является мерой прозрачности. Пороговое значение поглощения определяет ширину запрещённой зоны полупроводника.

Показатель преломления рассчитывается в соответствии со уравнением (12). Из рис. 7 видно, что показатель преломления уменьшается с ростом ширины запрещённой зоны. Показатель преломления молекулы антрадифитофена в растворе диметилацетамида имеет наибольшее значение при наименьшем значении ширины запрещённой зоны. Показатель преломления молекулы антрадифитофена в растворе диметила-

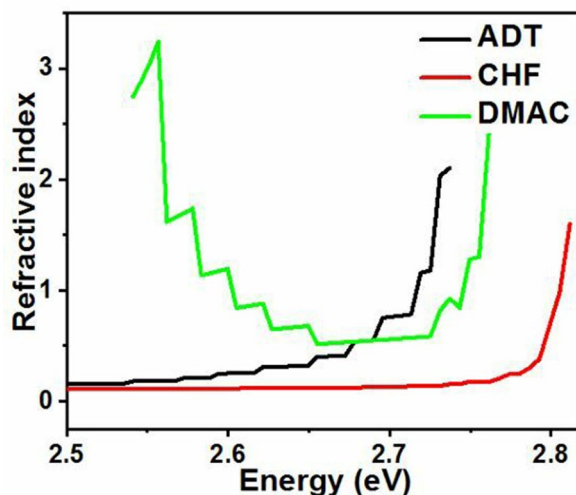


Рис. 7. Коэффициент отражения и ширина запрещённой зоны для молекулы антрадифитофена в различных растворителях

цетамида при малых значениях ширины запрещённой зоны отличается от такового для других растворов, однако после 2.67 эВ приближается к ним. Рис. 8 иллюстрирует влияние растворителя на показатель преломления антрадифитофена:

$$n = \left\{ \left[ \frac{4R}{(R-1)^2} - k^2 \right]^{\frac{1}{2}} - \frac{R+1}{R-1} \right\}. \quad (12)$$

Показатель преломления ( $n$ ) полупроводникового материала можно вычислить посредством ряда формул: Равиндры, Мосса, Кумара–Синга и Херве–Вандамма. Данные показатели определяются на основе ширины запрещённой зоны и используются для определения  $n$  полупроводников [32]:

Уравнение Редди:

$$n^4 (E_g - 0.365) = 154. \quad (13)$$

Уравнение Мосса:

$$n^4 E_g = 95 \text{ eV}. \quad (14)$$

Уравнение Кумара–Синга:

$$n = KE_g^c. \quad (15)$$

где  $K$  и  $C$  – константы,  $K = 3,3668$  и  $C = 0,32234$ .

Уравнение Херве–Вандамма

$$n^2 = 1 + \left( \frac{A}{E_g + B} \right)^2. \quad (16)$$

Уравнение Равиндры:

$$n = 4.084 - 0.62E_g. \quad (17)$$



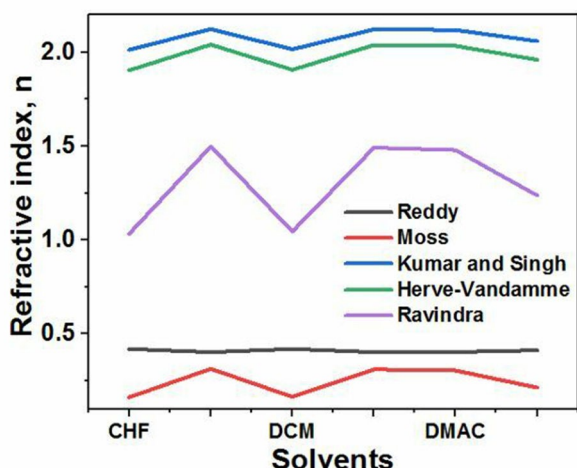


Рис. 8. Кривые коэффициента преломления антрадифитофена в различных растворителях

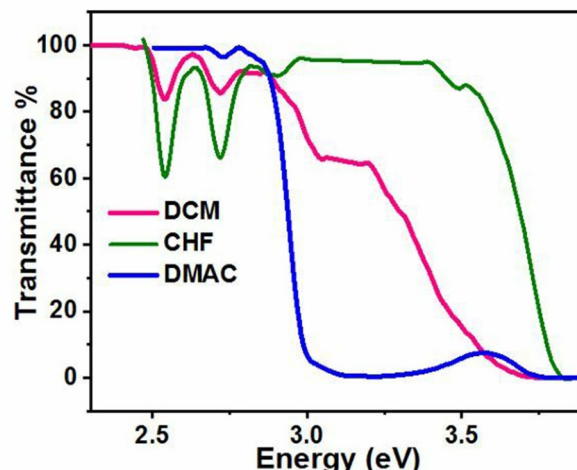


Рис. 9. Кривые  $E_g$  и светопропускания антрадифитофена в различных растворителях

### 3.3. Спектры пропускания

Спектры пропускания растворов антрадифитофена показаны на рис. 9. При низкой  $E_g$  спектр пропускания будет широким и зависит от типа растворителя. В растворах дихлорметана и диметилацетамида при низкой  $E_g$  коэффициент пропускания будет наибольшим. Однако при использовании хлороформа светопропускание в УФ и видимом диапазоне остаётся на низком уровне по сравнению с другими растворами.

Прозрачный материал обладает низкой электропроводностью и высокой отражательной способностью. Молекула антрадифитофена при 3.75 эВ демонстрирует наименьшую прозрачность и наибольшую отражательную способность для всех растворов. Спектр пропускания сужается по мере увеличения ширины запрещённой зоны.

### 3.4. Область нормальной дисперсии

Чтобы определить физические свойства материала, в частности преломление света при различных значениях длины волны, необходимо рассмотреть такой параметр как дисперсия. Одним из важных свойств является площадь рассеяния. Она зависит от показателя преломления материала. При увеличении угловой частоты, показатель преломления меняется, в результате чего растёт площадь рассеяния.

При производстве оптических инструментов дисперсия может быть как желательным, так и нежелательным свойством. Более точное определение длин волн за счёт рассеяния посредством стеклянных призм позволяет создавать

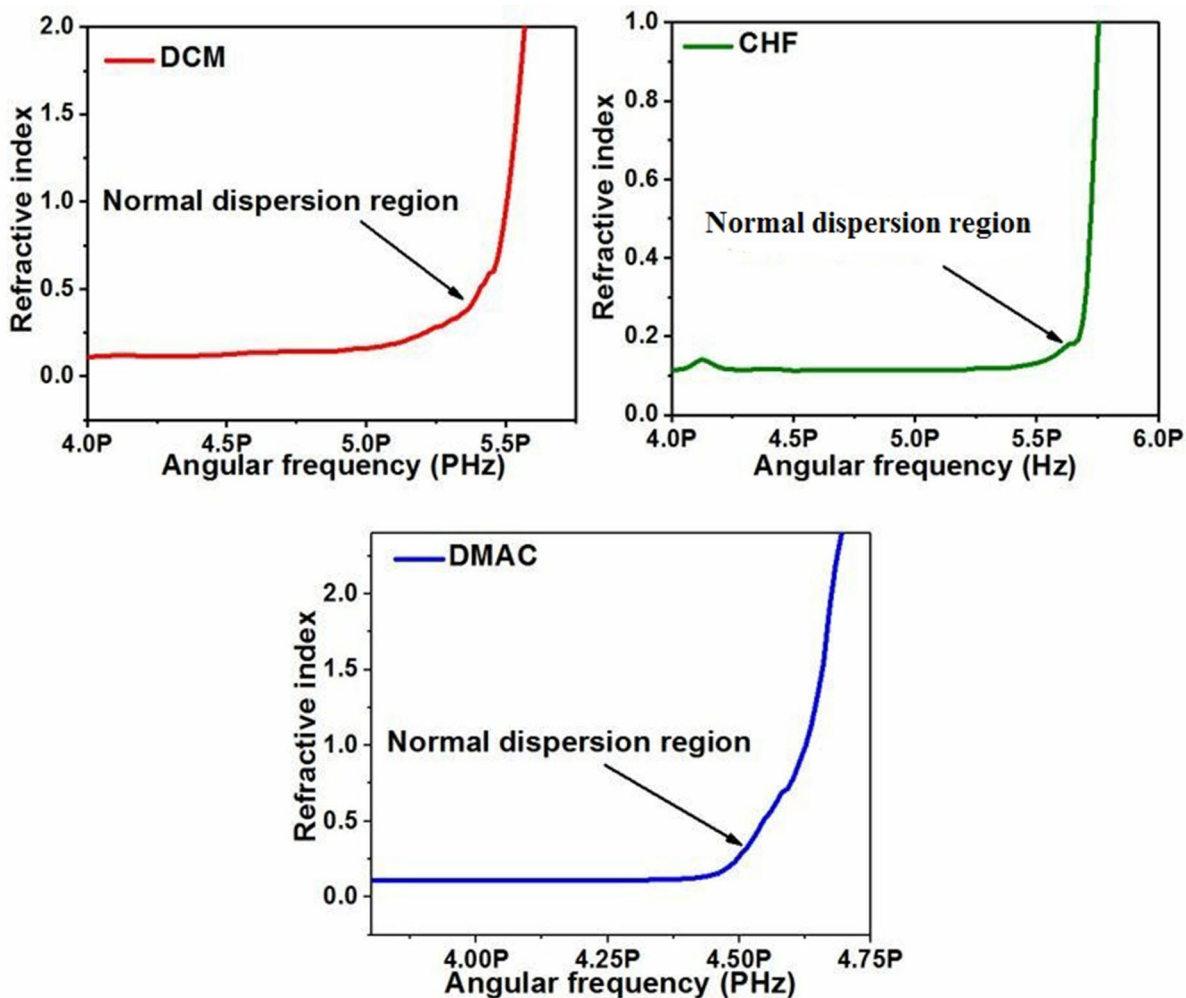
спектрорадиометры и спектрометры. Зависимость показателя преломления от частоты света называется дисперсией. Степень преломления уменьшается с уменьшением частоты. Угловая частота антрадифитофена в растворе хлороформа имеет наибольший показатель, а площадь нормальной дисперсии составляет 5.6 ПГц. В растворе диметилацетамида частоты наиболее низкие, а площадь нормальной дисперсии составляет 4.51 ПГц. В растворе диметилацетамида площадь рассеяния составляет 5.4 ПГц, как показано на рис. 10.

### 3.5. 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. Отношение между коэффициентом молярной экстинкции и коэффициентом отражения позволяет рассчитать отражательную способность посредством следующего выражения [33, 34].

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}, \tag{18}$$

где  $k$  – частотнозависимый коэффициент молярной экстинкции рассчитанный по (10). Для слабых поглотителей значения  $k$  слишком малы и сходят на нет при высоких частотах. Отражательная способность при более высоких частотах рассчитывается по следующему уравнению:



**Рис. 10.** Расчёт области нормальной дисперсии и кривые угловой частоты и коэффициент отражения для молекулы антрадиитофена в различных растворителях

$$R = \left( \frac{n-1}{n+1} \right)^2, \tag{19}$$

где  $n$  – коэффициент отражения, полученный в соответствии с (12).

Коэффициент отражения рассчитывается в соответствии со следующим уравнением:

$$r = \sqrt{R}. \tag{20}$$

Поглощение является ещё одним важным свойством в связи с соотношением электрических и оптических свойств. Оно описывается тензором проводимости. Высокая электропроводность материала указывает на высокую отражательную способность. Однако прозрачные материалы ожидаемо обладают низкой электропроводностью. Отражательная способность молекулы антрадиитофена в УФ и видимом диапазоне спектра соответствуют друг другу, так как

коэффициент отражения зависит от ширины запрещённой зоны. Широкая запрещённая зона указывает на низкую отражательную способность, а узкая запрещённая зона указывает на высокую отражательную способность, как показано на рис.11.

### 3.6. Потери на отражение и коэффициент прохождения

В телекоммуникационных системах потери на отражение и коэффициент прохождения являются ключевыми характеристиками. Они рассчитываются посредством приведённых ниже уравнений. На рис. 12 показано соотношение потерь на отражение и коэффициента прохождения. Как видно из рисунка, эти параметры обратно пропорциональны друг другу [34, 35]:

$$R_L = \left[ \frac{n-1}{n+1} \right]^2. \tag{21}$$

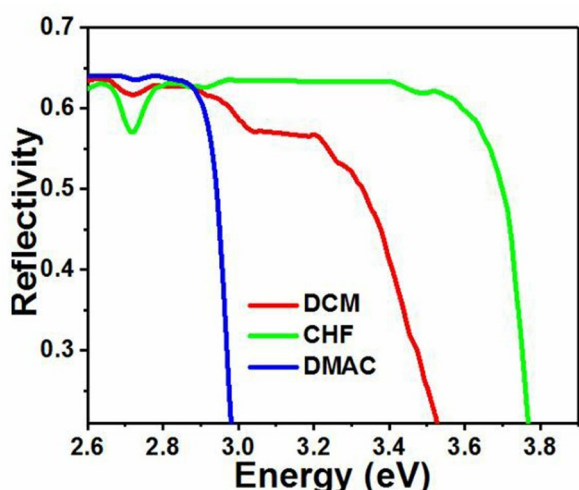


Рис. 11. Отражательная способность молекулы антрадифитофена и ширина запрещённой зоны в различных растворах

$$T = \frac{2n}{n^2 + 1} \tag{22}$$

Чтобы оценить число электромагнитных колебаний, проходящих через поверхность или оптический элемент, можно использовать коэффициент прохождения. С помощью коэффициента прохождения можно определить амплитуду и интенсивность волн. С точки зрения химии коэффициент прохождения позволяет установить требования для преодоления потенциального барьера [36].

#### 4. Электро- и фотопроводимость

Существует два параметра, позволяющих судить об электрических и оптических свойствах, – электро- и фотопроводимость [36]:

$$\sigma_{opt} = \frac{\alpha n c}{4\pi} \tag{23}$$

$$\sigma_{ele} = \frac{2\lambda\sigma_{opt}}{\alpha} \tag{24}$$

Анализ электронной структуры материалов и наличие свободных электронов в зоне проводимости указывает на то, что электро- и фотопроводимость полупроводников представляют собой разницу в проводимости (как рост, так и снижение), возникающую при освещении.

Теория Друде объясняет электропроводность материалов, а зонная теория объясняет само явление проводимости. В зоне проводимости оказывается больше электронов, когда валентная зона и зона проводимости пересекаются. В этом случае проводимость обеспечивается за

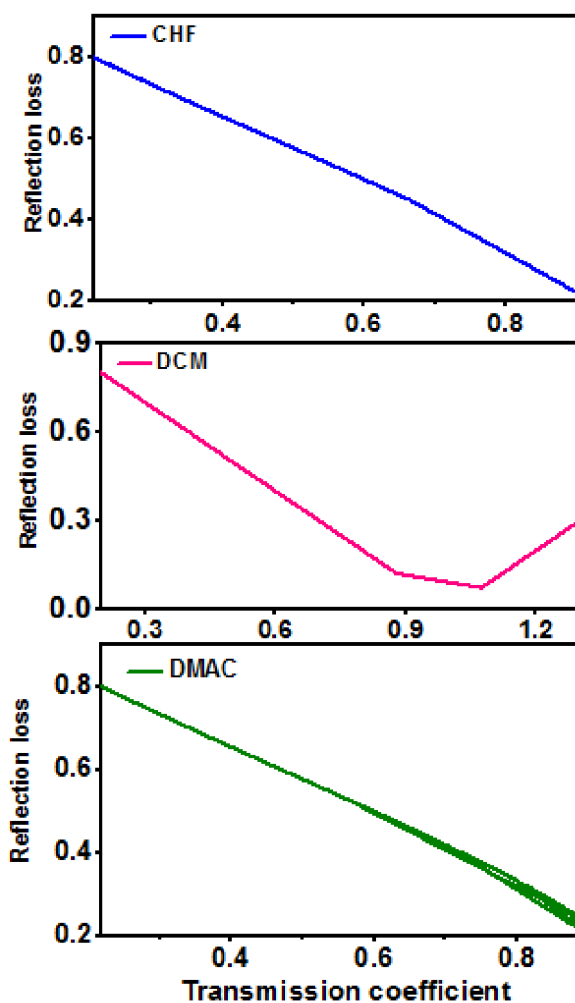


Рис. 12. Коэффициенты пропускания в зависимости от убыли коэффициента отражения для молекулы антрадифитофена в различных растворителях

счёт перехода возбуждённых электронов из валентной зоны в зону проводимости. Диэлектрическая проницаемость в этом случае позволяет свету распространяться в материале. Распространение оптических волн, время релаксации и плазменная частота также являются важными параметрами [37]. Физические параметры имеют значение, так как, когда энергия света в виде фотона сталкивается с поверхностью материала, происходит высвобождение электрона. В отсутствие рассеяния, свет отражается полностью. Такие металлы обладают металлическим блеском. Данное свойство связано с цветом материала.

Электропроводность молекулы антрадифитофена варьируется в зависимости от раствора. Для раствора диметилацетамида наивысшее значение электропроводности наблюдается в диапазоне от 2.87 до 3.4 эВ, что указывает на то,

что электрический ток свободно проходит через молекулу антрадифенина. Электрическое сопротивление характеризует свойство материала препятствовать прохождению электрического тока. В растворе хлороформа наименьшее значение электропроводности наблюдается при 3.78 В и затем несколько возрастает. При узкой запрещённой зоне молекула антрадифенина препятствует прохождению электрического тока. Во всех растворах электропроводность возрастает при 3.6 эВ и более, что указывает на широкий диапазон значений ширины запрещённой зоны для молекулы антрадифенина. Вид растворителя очень сильно влияет на оптоэлектронные и электрические свойства молекул. Как показано на рис. 13б, оптическая проводимость молекулы антрадифенина ниже, чем электропроводимость. На рис. 13а и б показано, что оптическая и электропроводимость во многом проявляются схожим образом. Очевидно, что они сначала возрастают, потом падают, после чего остаются на одном уровне, на что указывает ширина запрещённой зоны в различных растворах. Оптическая проводимость имеет высокие значения при большой ширине запрещённой зоны, и кривая идёт вверх, по сравнению с электропроводимостью. Ширина запрещённой зоны и рост оптической проводимости при 3.6 эВ указывают на большую ширину запрещённой зоны молекулы антрадифенина, который, таким образом, можно использовать при производстве устройств, функционирующих под сильным током и при высоких температурах, как, например, солнечные элементы. Рост  $\sigma_{\text{real}}$  и  $\sigma_{\text{optical}}$  можно объяснить ростом коэффициента поглощения в данной области. В то же время снижение  $\sigma_{\text{real}}$  после второго пика можно объяснить снижением коэффициента поглоще-

ния в данной области. Два пика молекулы антрадифенина в растворе диметилацетамида в  $\sigma_{\text{real}}$  указывают на зоны более глубокого проникновения электромагнитных волн, а также на высокую проводимость. Когда энергия фотонов достигает данных пиков, можно говорить о достижении оптимальной проводимости.

#### 4.1. Диэлектрическая проницаемость

Диэлектрическая проницаемость является существенным параметром для изучения проводимости материалов. Возможность использовать тонкие плёнки в качестве фотоэлектрических материалов определяется их электрическими свойствами. Электрические свойства определяют такие параметры роста плёнок, как скорость осаждения и температура субстрата [38]. Параметры  $\epsilon'$  и  $\epsilon''$  представляют соответственно диэлектрическую проницаемость и диэлектрические потери. Комплексная диэлектрическая проницаемость рассчитывается по следующему уравнению:

$$\epsilon^* = \epsilon' + j\epsilon'', \quad (25)$$

где  $\epsilon'$  – диэлектрическая проницаемость,  $\epsilon''$  – диэлектрические потери, а  $\epsilon^*$  – комплексная диэлектрическая проницаемость. Диэлектрическая спектроскопия крайне важна, так как связана со многими параметрами, включая такие как межзёренные границы, структура химических соединений, транспортные свойства и способность диэлектрического материала к накоплению заряда. На межзёренных границах в тонких плёнках или в твёрдых телах образуется потенциальный барьер, что приводит к увеличению диэлектрической проницаемости с ростом частоты, что, в свою очередь, связано с высоковольтной поляризацией [39, 40].

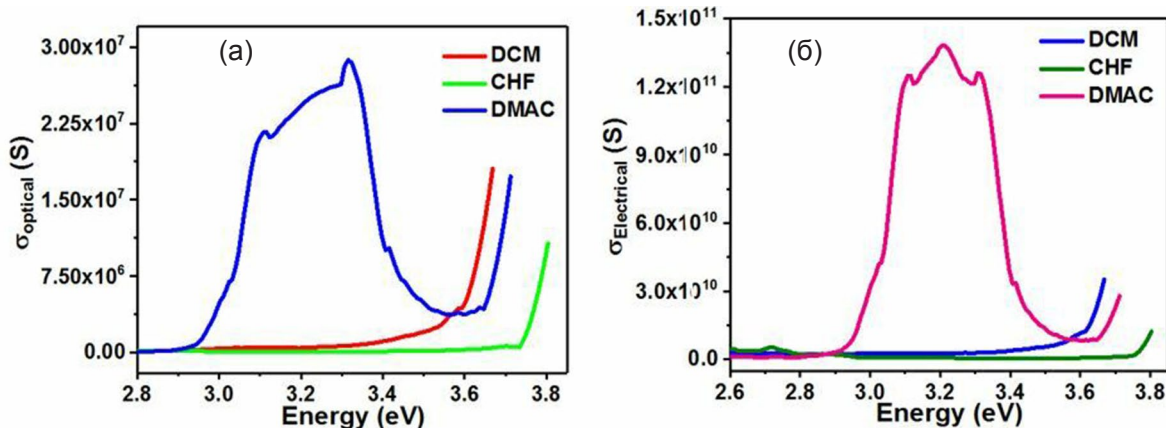


Рис. 13. Изменение оптической проводимости (а) и электропроводности (б) молекулы антрадифенина

Поляризация молекул антрадитиофена в различных растворах зависит от соотношения диэлектрических потерь и вида проницаемости, так как поляризация в данном случае зависит от электрического поля. Если время релаксации электрического поля и частота совпадают, это свидетельствует о фазовом сдвиге. Если же показатель частоты ниже времени релаксации электрического поля, возникает поляризация. При этом, если время релаксации меньше частоты, деполяризации не происходит. На рис. 14 показаны изменения частоты для диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь антрадитиофена в различных растворителях.

#### 4.2. Карта распределения электростатического потенциала

В данном разделе представлена карта распределения электростатического потенциала. В разделе представлены данные по атомным зарядам и рассмотрены преимущества карты распределения потенциала [41]. Одним из преимуществ является возможность определить, является ли молекула полярной или неполярной. Во-вторых, данный метод можно использовать для сопоставления зарядов разных молекул, чтобы получить информацию о продукте химической реакции. В-третьих, данный метод позволяет определить форму электронного облака и установить области с наибольшей и наименьшей электронной плотностью. Наконец, данный метод позволяет установить, какие заряды электронов отталкивают и притягивают молекулы. Взаимодействие молекул объясняет механизм формирования полимерных комплексов. Это также связано с химическими реакциями. Кар-

та распределения электростатического потенциала представляет собой трёхмерную модель молекулы. Она объясняет распределение зарядов по поверхности молекулы и позволяет установить свойства молекул. Также с её помощью можно установить форму и размер молекул [42] и спрогнозировать поведение сложных молекул. Цветовая разметка позволяет наглядно продемонстрировать распределение заряда [43]. По умолчанию цветовая шкала начинается с красного цвета и заканчивается тёмно-синим. Красный цвет указывает на высокую концентрацию электронов, что говорит о снижении электростатического потенциала до минимального уровня. Иными словами, красная область на рис. 15 (в цвете онлайн) обозначает область наибольшей электроотрицательности. Синим отмечена низкая электроотрицательность. В жёлтых и зелёных зонах электроотрицательность выше, чем в синей, но ниже, чем в красной. В жёлтой зоне электроотрицательность выше, чем в зелёной. Отметим, что область наименьшего электростатического потенциала является одновременно областью наибольшей концентрации электронов. Область вокруг серы характеризуется большей электроотрицательностью. Область вокруг водорода отличается меньшей электроотрицательностью. Сера обладает наибольшим значением электроотрицательности, а водород – наименьшим. Таким образом, сера связана с красной областью на карте распределения потенциала, а водород – с синей. Сера имеет 6 валентных электронов и участвует в формировании химических связей с другими элементами. Водород имеет один валентный электрон.

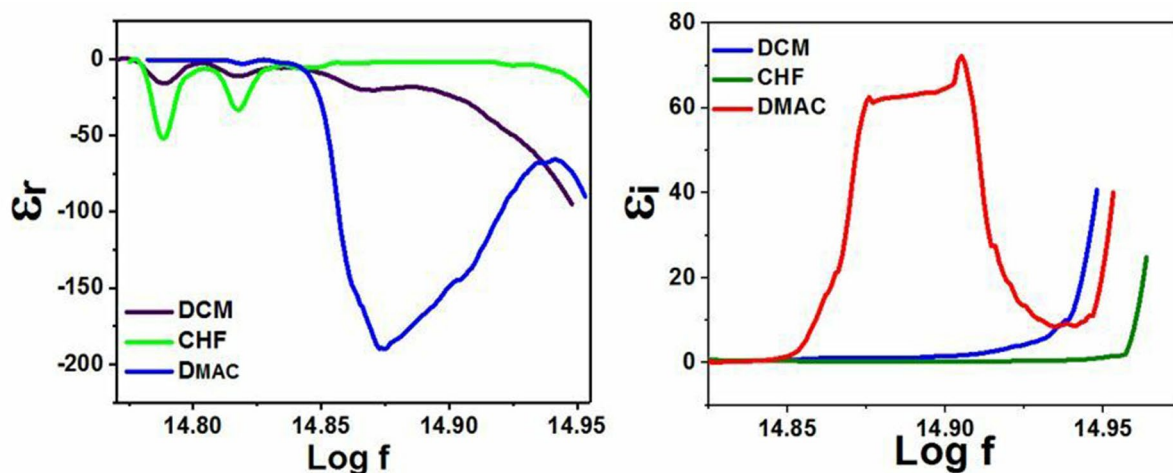
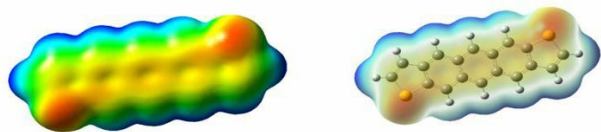


Рис. 14. Изменения частоты для диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь антрадитиофена в различных растворителях



**Рис. 15.** Поверхности потенциальной энергии молекулы антрадитиофена

## 5. Заключение

В статье рассматриваются оптические и электрические свойства молекулы антрадитиофена в различных растворах и проводится сопоставительный анализ теоретических и практических результатов. Методом УФ-спектроскопии и спектроскопии в видимой области были установлены оптоэлектронные свойства, такие как ширина запрещённой зоны, непрямой разрешённый переход, коэффициент отражения, область дисперсии, электро- и фотопроводимость, а также диэлектрические свойства для различных растворов. Ширина запрещённой зоны позволяет объяснить оптоэлектронные свойства. Результаты экспериментов, основанных на различных базисных наборах, хорошо согласуются с теоретическими выкладками. Основным методом исследования послужила аппроксимация на основе теории функционала плотности и метода Хартри – Фока. Основанные на них теоретические расчёты сопоставлялись с результатами экспериментальных расчётов для молекулы антрадитиофена. Средняя ширина запрещённой зоны между энергиями НОМО и ЛУМО составила 2.84 эВ для пяти базисных наборов. Некоторые наборы использовались нами для оптимизации антрадитиофена. Составленная в ходе исследования карта распределения электростатического потенциала антрадитиофена показывает наибольшую электроотрицательность для серы и наименьшую электроотрицательность для водорода. Результаты исследования показали преимущества антрадитиофена, обусловленные его оптоэлектронными свойствами, и возможность использовать данный полупроводниковый материал при производстве оптоэлектронных устройств.

## Заявленный вклад авторов

Авторы внесли одинаковый вклад в работу, представленную в статье.

## Конфликт интересов:

Авторы заявляют, что у них нет известных финансовых конфликтов интересов или личных

отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

## Список литературы

1. Platt A. D., Day J., Subramanian S., Anthony J. E., Ostroverkhova O. 'Optical, fluorescent, and (photo) conductive properties of high-performance functionalized pentacene and anthradithiophene derivatives. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2009;113(31): 14006–14014. <https://doi.org/10.1021/jp904021p>
2. Sekar A., Sivula K. Organic semiconductors as photoanodes for solar-driven photoelectrochemical fuel production. *CHIMIA International Journal for Chemistry*. 2021;75(3): 169–179. <https://doi.org/10.2533/chimia.2021.169>
3. Li H., Brédas J.-L. Developing molecular-level models for organic field-effect transistors. *National Science Review*. 2021;8(4): nwa167. <https://doi.org/10.1093/nsr/nwa167>
4. Rojas H. C., Bellani S., Fumagalli F., Tullii G., Leonardi S., Mayer M. T., Schreier M., Grätzel M., Lanzani G., Di Fonzo F. Polymer-based photocathodes with a solution-processable cuprous iodide anode layer and a polyethyleneimine protective coating. *Energy & Environmental Science*. 2016;9(12): 3710–3723. <https://doi.org/10.1039/c6ee01655c>
5. 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(4): 13–16. <https://doi.org/10.35219/mms.2020.4.02>
6. 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(5): 561–567. <https://doi.org/10.3103/s1067821221050096>
7. Laquindanum J. G., Katz H. E., Lovinger A. J. Synthesis, morphology, and field-effect mobility of anthradithiophenes. *Journal of the American Chemical Society*. 1998;120(4): 664–672. <https://doi.org/10.1021/ja9728381>
8. Zhu G., Sun Y., Li M., Tao C., Zhang X., Yang H., Guo L., Lin. Ionic crosslinked polymer as protective layer in electrochromic supercapacitors for improved electrochemical stability and ion transmission performance. *Electrochimica Acta*. 2021;365: 137373. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2020.137373>
9. Qadr H. M. Effect of ion irradiation on the mechanical properties of high and low copper. *Atom Indonesia*. 2020;46(1): 47–51. <https://doi.org/10.17146/aij.2020.923>
10. Mamada M., Minamiki T., Katagiri H., Tokito S. Synthesis, physical properties, and field-effect mobility of isomerically pure syn-/anti-anthradithiophene derivatives. *Organic Letters*. 2012;14(16): 4062–4065. <https://doi.org/10.1021/ol301626u>

11. Miao Q. (Ed.). *Polycyclic arenes and heteroarenes: synthesis, properties, and applications*. John Wiley & Sons; 2015. <https://doi.org/10.1002/9783527689545>
12. Brédas J.-L., Calbert J. P., da Silva Filho D. A., Cornil J. Organic semiconductors: A theoretical characterization of the basic parameters governing charge transport. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2002;99(9): 5804–5809. <https://doi.org/10.1073/pnas.092143399>
13. Hallani R. K., Thorley K. J., Mei Y., Parkin S. R., Jurchescu O. D., Anthony J. E. Structural and electronic properties of crystalline, isomerically pure anthradithiophene derivatives. *Advanced Functional Materials*. 2016;26(14): 2341–2348. <https://doi.org/10.1002/adfm.201502440>
14. Mamada M., Katagiri H., Mizukami M., Honda K., Minamiki T., Teraoka R., Uemura T., Tokito S. Syn-/anti-anthradithiophene derivative isomer effects on semiconducting properties. *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2013;5(19): 9670–9677. <https://doi.org/10.1021/am4027136>
15. Schön J., Kloc C., Siegrist T., Laquindanum J., Katz H. Charge transport in anthradithiophene single crystals. *Organic Electronics*. 2001;2: 165–169. [https://doi.org/10.1016/S1566-1199\(01\)00022-2](https://doi.org/10.1016/S1566-1199(01)00022-2)
16. Qadr H. M. Pressure effects on stopping power of alpha particles in argon gas. *Physics of Particles and Nuclei Letters*. 2021;18(2): 185–189. <https://doi.org/10.1134/S1547477121020151>
17. Kwon O., Coropceanu V., Gruhn N., Durivage J., Laquindanum J., Katz H., Cornil J., Brédas J.-L. Characterization of the molecular parameters determining charge transport in anthradithiophene. *The Journal of Chemical Physics*. 2004;120(17): 8186–8194. <https://doi.org/10.1063/1.1689636>
18. Yang H., Locklin J., Singh B., Bao Z. Organic field-effect transistors with solution-processible thiophene/phenylene based-oligomer derivative films. *Organic Field-Effect Transistors VI, International Society for Optics and Photonics*. 2007: 66581A. <https://doi.org/10.1117/12.733953>
19. Caricato M., Frisch M. J., Hiscocks J., Frisch M. J. *Gaussian 09: I/Ops Reference, Citeseer*. 2009.
20. 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(4): 1–8. <https://doi.org/10.1007/s40735-021-00566-9>
21. Mamand D. Determination the band gap energy of poly benzimidazobenzophenanthroline and comparison between HF and DFT for three different basis sets. *Journal of Physical Chemistry and Functional Materials*. 2019;2(1): 32–36. Режим доступа: <https://dergipark.org.tr/en/pub/jphcfum/issue/45047/589803>
22. 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(5): 943–953. <https://doi.org/10.1134/S207020512105018x>
23. Görling A. Density-functional theory beyond the Hohenberg-Kohn theorem. *Physical Review A*. 1999;59(5): 3359. <https://doi.org/10.1103/physreva.59.3359>
24. Gilbert T. L. Hohenberg-Kohn theorem for non-local external potentials. *Physical Review B*. 1975;12(6): 2111. <https://doi.org/10.1103/physrevb.12.2111>
25. Mamand D. Theoretical calculations and spectroscopic analysis of gaussian computational examination-NMR, FTIR, UV-Visible, MEP on 2, 4, 6-Nitrophenol. *Journal of Physical Chemistry and Functional Materials*. 2019;2(2): 77–86. Режим доступа: <https://dergipark.org.tr/en/pub/jphcfum/issue/50562/645745>
26. Iliev V., Tomova D., Rakovsky S., Eliyas A., Puma G. L. Enhancement of photocatalytic oxidation of oxalic acid by gold modified WO<sub>3</sub>/TiO<sub>2</sub> photocatalysts under UV and visible light irradiation. *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*. 2010;327(1-2): 51–57. <https://doi.org/10.1016/j.molcata.2010.05.012>
27. Aceto M., Agostino A., Fenoglio G., Idone A., Gulmini M., Piccolo M., Ricciardi P., Delaney J. K. Characterisation of colourants on illuminated manuscripts by portable fibre optic UV-visible-NIR reflectance spectrophotometry. *Analytical Methods*. 2014;6(5): 1488–1500. <https://doi.org/10.1039/c3ay41904e>
28. Wu J., Walukiewicz W., Shan W., Yu K., Ager W. J., Haller E.E., Lu H., Schaff W. J. Effects of the narrow band gap on the properties of InN. *Physical Review B*. 2002;66(20): 201403. <https://doi.org/10.1103/physrevb.66.201403>
29. Orek 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>
30. Herve P., Vandamme L. K. J. General relation between refractive index and energy gap in semiconductors. *Infrared physics & technology*. 1994;35(4): 609–615. [https://doi.org/10.1016/1350-4495\(94\)90026-4](https://doi.org/10.1016/1350-4495(94)90026-4)
31. Hader J., Moloney J., Koch S. Microscopic theory of gain, absorption, and refractive index in semiconductor laser materials-influence of conduction-band nonparabolicity and coulomb-induced intersubband coupling. *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 1999;35(12): 1878–1886. <https://doi.org/10.1109/3.806602>
32. Ravindra N., Ganapathy P., Choi J. Energy gap-refractive index relations in semiconductors—An overview. *Infrared Physics & Technology*. 2007;50(1): 21–29. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2006.04.001>
33. Linda D., Duclère J.-R., Hayakawa T., Dutreilh-Colas M., Cardinal T., Mirgorodsky A., Kaba-

- dou A., Thomas P. Optical properties of tellurite glasses elaborated within the  $\text{TeO}_2\text{-Tl}_2\text{O-Ag}_2\text{O}$  and  $\text{TeO}_2\text{-ZnO-Ag}_2\text{O}$  ternary systems. *Journal of Alloys and Compounds*. 2013;561: 151–160. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2013.01.172>
34. Umar S., Halimah M., Chan K., Latif A. Polarizability, optical basicity and electric susceptibility of  $\text{Er}^{3+}$  doped silicate borotellurite glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2017;471: 101–109. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2017.05.018>
35. Maheshvaran K., Linganna K., Marimuthu K. Composition dependent structural and optical properties of  $\text{Sm}^{3+}$  doped boro-tellurite glasses. *Journal of Luminescence*. 2011;131(12): 2746–2753. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2011.06.047>
36. Yoshino K., Oyama S., Yoneta M. Structural, optical and electrical characterization of undoped ZnMgO film grown by spray pyrolysis method. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 2008;19(2): 203–209. <https://doi.org/10.1007/s10854-007-9333-2>
37. Jiménez-González A. E., Soto Urueta J. A., Suárez-Parra R. Optical and electrical characteristics of aluminum-doped ZnO thin films prepared by solgel technique. *Journal of Crystal Growth*. 1998;192(3-4): 430–438. [https://doi.org/10.1016/s0022-0248\(98\)00422-9](https://doi.org/10.1016/s0022-0248(98)00422-9)
38. Sassi M., Oueslati A., Moutia N., Khirouni K., Gargouri M. A study of optical absorption and dielectric properties in lithium chromium diphosphate compound. *Ionics*. 2017;2394: 847–855. <https://doi.org/10.1007/s11581-016-1903-y>
39. Xie P., Wang Z., Zhang Z., Fan R., Cheng C., Liu H., Liu Y., Li T., Yan C., Wang N. Silica microsphere templated self-assembly of a three-dimensional carbon network with stable radio-frequency negative permittivity and low dielectric loss. *Journal of Materials Chemistry C*. 2018;6(19): 5239–5249. <https://doi.org/10.1039/c7tc05911f>
40. Yang K., Huang X., Huang Y., Xie L., Jiang P. Fluoro-polymer@  $\text{BaTiO}_3$  hybrid nanoparticles prepared via RAFT polymerization: toward ferroelectric polymer nanocomposites with high dielectric constant and low dielectric loss for energy storage application. *Chemistry of Materials*. 2013;25(11): 2327–2338. <https://doi.org/10.1021/cm4010486>
41. Leboeuf M., Köster A., Salahub D. Approximation of the molecular electrostatic potential in a gaussian density functional method. *Theoretical Chemistry Accounts*. 1997;96(1): 23–30. <https://doi.org/10.1007/s002140050199>
42. Ramalingam S., Babu P. D. S., Periandy S., Fe-reydueni 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(1): 210–220. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2011.09.030>
43. Ramalingam S., Karabacak M., Periandy S., Puviarasan N., Tanuja D. Spectroscopic (infrared, Raman, UV and NMR) analysis, Gaussian hybrid computational investigation (MEP maps/HOMO and LUMO) on cyclohexanone oxime. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 2012;96: 207–220. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2012.03.090>

#### Информация об авторах

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

Хазар Хамад Расул, магистр по направлению «Физика атомов и молекул», кафедра физики, Университет Рапарин, Сулеймания, Ирак  
[hazharhrm@uor.edu.krd](mailto:hazharhrm@uor.edu.krd)

Пешанг Хдир Омер, магистр по направлению «Химия», кафедра химии, Университет Рапарин, Сулеймания, Ирак  
[peshang.khdir@uor.edu.krd](mailto:peshang.khdir@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](mailto:hiwa.physics@uor.edu.krd)

Поступила в редакцию 10.01.2022; одобрена после рецензирования 30.03.2022; принята к публикации 15.05.2022; опубликована онлайн 25.06.2022.

Перевод на русский язык Дымант Юлии Александровны