



## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА ИОНИЗАЦИИ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ ПО ОПТИЧЕСКИМ СПЕКТРАМ ПОГЛОЩЕНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ВИДИМОЙ И УФ- ОБЛАСТИ

М.Ю.Доломатов<sup>1,2</sup>, д.х.н., [dolomatov@gmail.com](mailto:dolomatov@gmail.com),  
К.Ф.Латыпов<sup>1</sup>, аспирант, [kamil-latipov@rambler.ru](mailto:kamil-latipov@rambler.ru),  
<sup>1</sup>Башкирский Государственный Университет, Уфа,  
Россия,  
<sup>2</sup>Уфимский Государственный Нефтяной Техниче-  
ский Университет, Уфа, Россия

Экспериментально обнаружен физический эффект, связывающий потенциалы ионизации кислород- и азотсодержащих молекул с интегральной автокорреляционной характеристикой спектра поглощения в видимом и УФ-диапазоне 190–760 нм (6,53–1,63 эВ). Результаты исследований могут быть полезны разработчикам изделий молекулярной электроники, фотоники, фотохимии и физической химии для изучения процессов переноса электронов, характеристик зонной структуры наночастиц в физике конденсированного состояния.

Гетероциклические кислород- и азотсодержащие молекулы широко применяются во многих областях науки и технологии как материалы электронной и нанoeлектронной техники [1,2]. В частности, они используются для фотоэлектрических преобразователей и других оптоэлектронных устройств [3], в качестве красителей для активных лазерных сред [4], органических полупроводников [5,6], а также маркеров аминокислот и антигенов в медицинской биохимии, фотосенсибилизаторов и ингибиторов радикальных цепных реакций. Кроме того, гетероциклические кислород- и азотсодержащие молекулы применяются в качестве лекарственных средств в медицине [7], эти молекулы играют ключевую роль в биологических системах, т.к. составляют основу азотистых оснований ДНК и аминокислот белков.

## DETERMINATION OF HETEROCYCLIC MOLECULES IONIZATION POTENTIAL BASED ON OPTICAL ABSORPTION SPECTRA OF ELECTROMAGNETIC RADIATION IN THE VISIBLE AND UV RANGE

M.Y.Dolomatov<sup>1,2</sup>, Doctor of Chemical Sciences,  
[dolomatov@gmail.com](mailto:dolomatov@gmail.com),  
K.F.Latypov<sup>1</sup>, graduate student,  
[kamil-latipov@rambler.ru](mailto:kamil-latipov@rambler.ru),  
<sup>1</sup>Bashkir State University, Ufa, Russia,  
<sup>2</sup>Ufa State Oil Technical University, Ufa, Russia

A physical effect connecting the ionization potentials of oxygen- and nitrogen-containing molecules with the integral autocorrelate characteristic of the absorption spectrum in the visible and UV range 190–760 nm (6.53–1.63 eV) was observed experimentally. The research results can be applied in molecular electronics, photonics, photochemistry and physical chemistry to study electron transfer processes, the band structure characteristics of nanoparticles in condensed matter physics.

Heterocyclic oxygen- and nitrogen-containing molecules are widely used in many fields of science and technology as materials of electronic and nanoelectronic engineering [1, 2]. In particular, they are used for photoelectric converters and other optoelectronic devices [3], as dyes for active laser media [4], organic semiconductors [5, 6], as well as markers of amino acids and antibodies in medical biochemistry, photosensitizers and inhibitors of radical chain reactions. Furthermore, heterocyclic oxygen- and nitrogen-containing molecules are used as medicines in medicine [7]; these molecules play a key role in biological systems, since they form a basis of the DNA nitrogenous bases and amino acids of proteins.

An extensive field of application of such molecules requires information on the electronic structure, in particular, the first vertical ionization potentials (IP), which determine the processes of electron transfer under the influence of electromagnetic radiation in



Обширная область применения таких молекул требует информацию об электронной структуре, в частности первых вертикальных потенциалах ионизации (ПИ), которые определяют процессы переноса электронов под действием электромагнитного излучения в оптической области и электродонорную способность материалов.

Известно, что вертикальный ПИ [8] характеризует ионизацию молекулы или атома, при которой образующийся молекулярный или атомный ион может находиться в произвольном энергетическом состоянии (электронном и колебательном), причем соответствующие квантовые переходы происходят без изменения межъядерных расстояний.

Молекулы, содержащие большое число атомов углерода и гетероатомов, например азота, кислорода, серы, как известно, характеризуются сильными эффектами обменного и кулоновского взаимодействия электронов, так называемым корреляционным взаимодействием, которое трудно учитывать в расчетах и экспериментах [9]. Известно, что для определения первых вертикальных ПИ, наряду с методами фотоэлектронной спектроскопии, фотоионизацией, используется оптическая спектроскопия [10–12].

Исследования, проведенные ранее, свидетельствуют об эффективности использования интегральных феноменологических параметров оптических спектров для определения первых эффективных вертикальных ПИ молекул [10–12]. Но аддитивные интегральные параметры, которые используются в этих работах, не достаточно учитывают эффекты электронной корреляции, которые связаны с обменным и кулоновским взаимодействием электронов в различных энергетических состояниях [13–15].

Целью работы является исследование интегральных корреляционных феноменологических характеристик оптических спектров гетероциклических конденсированных сред из азот- и кислородсодержащих молекул. В частности, изучение связей интегральных параметров автокорреляционных функций оптического спектра с первыми вертикальными ПИ в рамках гипотезы о сильной корреляции электронных состояний.

Характерная особенность спектров состоит в том, что спектры отдельных исследуемых молекул имеют непрерывный характер в виде системы полос, связанных с взаимодействием колебательных электронных состояний.

Не прибегая к преобразованию Фурье для разделения полос, рассмотрим энергетический спектр молекулы в виде автокорреляционной функции

the optical region and the electron-donating ability of materials.

It is known that vertical IP [8] characterizes the ionization of a molecule or an atom where the molecular or atomic ion being formed can be in an arbitrary energy state (electronic and vibrational), and the corresponding quantum transitions occur without changing the internuclear distances.

Molecules containing a large number of carbon atoms and heteroatoms, e.g., nitrogen, oxygen, sulfur, are known to be characterized by strong effects of exchange and Coulomb interaction of electrons, the so-called correlation interaction, which is difficult to take into account in calculations and experiments [9]. It is known that optical spectroscopy is used to determine the first vertical IP, in addition to the methods of photoelectron spectroscopy and photoionization [10–12].

The earlier studies demonstrate the efficiency of using integral phenomenological parameters of optical spectra for determining the first effective vertical IP of the molecules [10–12]. But the additive integral parameters that are used in these studies do not sufficiently take into account the effects of electron correlation, associated with the exchange and Coulomb interaction of electrons in different energy states [13–15].

The aim of this research is to investigate the integral correlation phenomenological characteristics of the optical spectra of heterocyclic condensed media of nitrogen and oxygen-containing molecules. In particular, the study of the relationships between the integral parameters of the autocorrelation functions of the optical spectrum and the first vertical IP is within the framework of the hypothesis of a strong correlation of electronic states.

Spectra characteristic feature is that the spectra of the separate molecules under research are of a continuous nature, in the form of a system of bands associated with the interaction of vibrational electronic states.

Without resorting to the Fourier transform for the separation of bands, we shall consider energy spectrum of the molecule in the form of autocorrelation function (ACF), which depends on the frequency of the electronic transfers. We shall consider the integral value of ACF as a measure of the interaction of molecule electronic states at certain frequencies of the electronic transfers from one energy state to another. As it is known from the theory of signals [16, 17] and optical spectra [18], ACF has the following form:

(АКФ), которая зависит от частоты электронных переходов. Будем рассматривать интегральное значение АКФ в качестве меры взаимодействия электронных состояний молекулы при определенных частотах перехода электронов из одного энергетического состояния в другое. Как известно из теории сигналов [16,17] и оптических спектров [18], АКФ имеет вид:

$$A_c = \int_{-\infty}^{+\infty} S(\omega) \cdot S(\omega + \Delta\omega) d\omega, \quad (1)$$

где  $S(\omega), S(\omega + \Delta\omega)$  – частотные функции распределения интенсивностей поглощения излучения в видимом и УФ спектре на частотах  $\omega, \omega + \Delta\omega$ , соответственно. Корреляционную функцию можно выразить через резонансные частоты, используя теорему Винера-Хинчина [19,20],

$$A_c = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega} dF(\omega). \quad (2)$$

Формула (2) устанавливает непосредственную связь между энергетическим спектром резонансных электронных состояний и АКФ, но поиск этих частот методом Фурье-преобразования не входит в нашу задачу.

Поскольку в данной работе статистический анализ спектра включает ближнюю УФ- и видимую области в диапазоне 190–760 нм (6,53–10,63 эВ), АКФ заменяется интегральным параметром от этой функции (ИАКФ), который представляет из себя определенный интеграл, имеющий конкретное числовое значение в энергетической шкале (эВ):

$$I_A = \int_{E_1}^{E_2} S(E) \cdot S(E + \Delta E) dE, \quad (3)$$

где  $E$  – энергия излучения, эВ;  $E_1, E_2$  – границы спектра, эВ;  $S(E)$  и  $S(E + \Delta E)$  – спектральная функция распределения интенсивностей поглощения излучения в видимом и УФ спектре при энергиях  $E$  и  $E + \Delta E$  соответственно.

В качестве ИАКФ ( $I_A$ ) использовано интегральное преобразование в виде основной и запаздывающей логарифмической функции, т.е.  $S(E) = \lg \varepsilon(E)$ ,  $\varepsilon(E)$  – коэффициент молярного поглощения. Тогда

$$I_A = \int_{E_1}^{E_2} \lg \varepsilon(E) \cdot \lg \varepsilon(E + \Delta E) dE. \quad (4)$$

Поскольку ИАКФ характеризует взаимосвязь резонансных электронных состояний, которые соответствуют электронным переходам, создающим электронный спектр, то этот параметр отражает, с одной стороны, корреляционное взаимодействие электронов, с другой стороны – энергию

$$A_c = \int_{-\infty}^{+\infty} S(\omega) \cdot S(\omega + \Delta\omega) d\omega, \quad (1)$$

where  $S(\omega), S(\omega + \Delta\omega)$  are the frequency distribution functions of radiation absorption intensities in the visible and UV spectra at frequencies of  $\omega, \omega + \Delta\omega$ , respectively. As it is known [19, 20], the correlation function can be expressed in terms of resonant frequencies, using Wiener-Khinchin theorem

$$A_c = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega} dF(\omega). \quad (2)$$

Formula (2) establishes a direct connection between the energy spectrum of the resonance electronic states and ACF, but the search for these frequencies by the Fourier transform method is not a part of our task.

Since the statistical analysis of the spectrum includes the near UV and visible regions in the range of 190–760 nm (6.53–10.63 eV) in this research, ACF is replaced by an integral parameter of this function (IACF), which is a particular integral having a specific numerical value in the energy scale:

$$I_A = \int_{E_1}^{E_2} S(E) \cdot S(E + \Delta E) dE, \quad (3)$$

where  $E$  is the radiation energy, eV;  $E_1, E_2$  are spectral boundaries, eV;  $S(E)$  and  $S(E + \Delta E)$  are the spectral distribution functions of the radiation absorption intensities in the visible and UV spectra with energies of  $E$  and  $E + \Delta E$ , respectively.

The integral transformation is used as IACF ( $I_A$ , eV) in the form of basic and retarding logarithmic function, i. e.,  $S(E) = \lg \varepsilon(E)$ ,  $\varepsilon(E)$  is the molar absorption ratio. Then

$$I_A = \int_{E_1}^{E_2} \lg \varepsilon(E) \cdot \lg \varepsilon(E + \Delta E) dE. \quad (4)$$

Since IACF reflects the interconnection of the resonance electronic states that correspond to electronic transfers creating the electron spectrum, this parameter reflects the correlation interaction of electrons on the one hand and the energy of electronic states on the other hand. Therefore, we should expect the interrelation of this parameter with IP, which characterizes the energy of the higher occupied molecular orbital.

To test this hypothesis, we investigated the interrelation of IACF calculated from the experimental absorption spectra of heterocyclic molecules with IP obtained by Hartree-Fock method, RHF-6-31G\*\* [21]. In the calculations it is assumed that the process of absorption of radiation by molecules is ergodic and

электронных состояний. Поэтому следует ожидать взаимосвязь этого параметра с ПИ, который характеризуют энергию высшей занятой молекулярной орбитали.

Для проверки этой гипотезы исследовалась взаимосвязь ИАКФ, рассчитанных по экспериментальным спектрам поглощения гетероциклических молекул с ПИ, полученных методом Хартри-Фока RHF-6-31G\*\*[21]. В расчетах предполагается, что процесс поглощения излучения молекулами эргодический и стационарный, т.е. время прохождения света через исследуемый образец существенно меньше времени релаксации электронных состояний.

### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

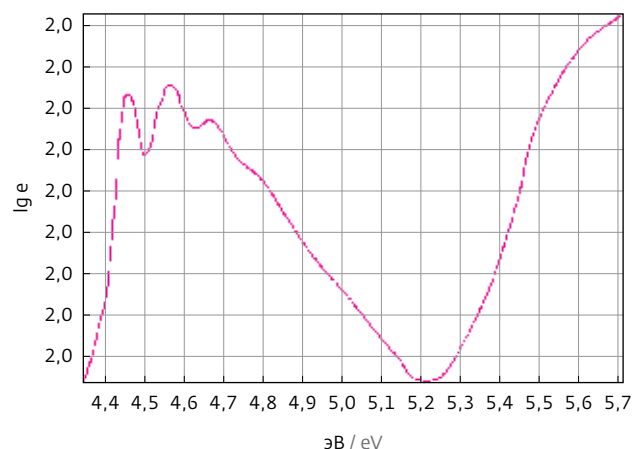
В качестве объектов исследования были изучены спектры 93 гетероциклических молекул, в частности спектры кислородсодержащих молекул, принадлежащих к рядам: фенолов, сложных ароматических спиртов и эфиров, кетонов и альдегидов, полиеновых кислот и хинонов. Были также изучены спектры азотсодержащих молекул, принадлежащих к рядам акридинов и пиридинов (рис.1). Спектры гетеросодержащих соединений включают полосы поглощения, появление которых вызывается  $\pi \rightarrow \pi^*$ -переходами, обусловленными наличием сопряженной цепочки, которые характеризуются высокой интенсивностью, а также малоинтенсивными запрещенными по симметрии  $n \rightarrow \pi^*$ ,  $n \rightarrow \sigma^*$  переходами.

Спектры регистрировали в диапазоне поглощения от 190 до 760 нм на автоматическом электронном спектрометре СФ-2000 с шагом 1 нм и выводом результатов через АЦП на ЭВМ. Кроме того, спектры отдельных соединений были выбраны из базы данных [22].

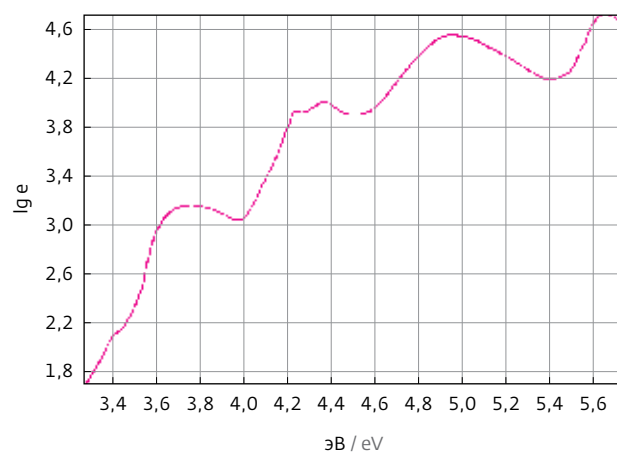
Далее перейдем к энергетической шкале спектра. Обработкой данных спектроскопии и квантовых расчетов методом наименьших квадратов исследованы статистические связи первых ПИ и ИАКФ. В ходе расчетов для всех классов органических соединений установлен физический эффект, связывающий ИАКФ с первыми ПИ для исследуемых молекул:

$$IP = \zeta_1 + \zeta_2 I_A, \quad (5)$$

где IP – первый вертикальный ПИ, эВ;  $\zeta_1, \zeta_2$ , – эмпирические коэффициенты, постоянные для близких по химической природе молекул, размерность которых эВ и безразмерная величина соответственно.



a)



b)

Рис.1. Оптические спектры: а) фенола; б) пиридина  
Fig. 1. Optical spectra: a) phenol; b) pyridine

stationary, i.e. the time of light passage through the sample being researched is much shorter than the relaxation time of the electronic states.

### EXPERIMENTAL PART

93 spectra of heterocyclic molecules were examined, in particular, the spectra of oxygen-containing molecules belonging to the series of phenols, complex aromatic alcohols and ethers, ketones and aldehydes, polyene acids and quinines, as well the spectra of nitrogen-containing molecules belonging to the series of acridines and pyridines (Fig. 1). The spectra of hetero-containing compounds include absorption bands, the appearance of which is caused by  $\pi \rightarrow \pi^*$  transitions due to the presence of a conjugated chain, characterized by high intensity, as well as by low-intensity forbidden by symmetry transitions of  $n \rightarrow \pi^*$ ,  $n \rightarrow \sigma^*$ .

**Табл. 1.** Эмпирические коэффициенты зависимости (5) для кислород- и азотсодержащих молекул

**Table 1.** Empirical ratios of dependence (5) for oxygen- and nitrogen-containing molecules

№	Молекулярные системы Molecular systems	$\zeta_1$ , эВ eV	$\zeta_2 \cdot 10^{-2}$ , отн.ед. dimensionless	Коэфф. детерминации, $R^2$ Determination ratio, $R^2$	Оценка погрешностей Error assessment		
					Ср. отн. отклонение, % Average relative deviation, %	Ср. квадр. отклонение, эВ Root-mean-square deviation, eV	Коэфф. вариации Variation ratio
1	Спирты и окси-соединения Alcohols and oxy compounds	9,35	-2,98	0,90	1,07	0,35	3,99
2	Кетоны и альдегиды Ketones and aldehydes	10,65	-4,53	0,85	1,83	0,49	5,20
3	Полиеновые кислоты Polyene acids	10,75	-4,46	0,99	0,06	0,64	6,82
4	Пиридины и акридины Pyridines and acridines	10,89	-7,87	0,91	1,63	0,60	6,50
5	Хиноны Quinones	11,34	-5,26	0,76	3,05	0,59	6,05

Физический смысл этих коэффициентов, по-видимому, заключается в следующем:  $\zeta_1$  характеризует значение ПИ в данном ряду при отсутствии автокорреляции состояний ( $I_A = 0$ );  $\zeta_2$  характеризует изменение ПИ с ростом корреляционной энергии отталкивания электронов, которая определяется ростом ИАКФ. Графически зависимость (5) отображена на рис.2. Эмпирические коэффициенты зависимостей (5) для первых ПИ кислород- и азотсодержащих молекул приведены в табл. 1.

Квазилинейная связь ПИ и АКФ подтверждается статистической обработкой данных методом наименьших квадратов. Соответствующие средние относительные отклонения составляют от 0,06 до 3,05 эВ; коэффициенты детерминации 0,76–0,99; коэффициенты вариации 3,99–6,82; средние квадратичные отклонения 0,35–0,64 эВ; коэффициенты  $\zeta_1$  находятся в диапазоне 9,35–11,34 эВ; коэффициенты  $\zeta_2$  – в диапазоне от -2,98 до -7,87 (см. табл. 1). Как следует из значений коэффициента  $\zeta_2$ , наименьшее значение параметров корреляции находится в ряду: пиридины и акридины < хиноны < кетоны и альдегиды < полиеновые кислоты < спирты и окси-соединения. Указанные обстоятельства согласуются с выводами квантовой теории молекул [21].

Таким образом, существует физический эффект, связывающий ИАКФ с первыми ПИ. Причиной этого, вероятно, является корреляция электронных состо-

The spectra were registered in the absorption range from 190 to 760 nm on an automatic electronic spectrometer SF-2000 with a step of 1 nm and the output of the results via ADC to a computer. Furthermore, the spectra of individual compounds were selected from the database [22].

Thus, we move to the energy scale of the spectrum. By processing the data of spectroscopy and quantum calculations using least square method, the statistical relationships of the first IP and IACF are studied. In the course of calculations, for all classes of organic compounds, a physical effect is established that connects IACF to the first IP for the molecules under study:

$$IP = \zeta_1 + \zeta_2 I_A, \quad (5)$$

where IP is the first vertical IP, eV;  $\zeta_1, \zeta_2$ , are empirical ratios that are constant for molecules close in chemical nature, whose dimensions are eV and dimensionless, respectively.

The physical meaning of these ratios, apparently, is as follows:  $\zeta_1$  characterizes IP value in a given series in the absence of autocorrelation of states ( $I_A = 0$ );  $\zeta_2$  characterizes the change in IP with an increase in the correlation energy of repulsion of electrons, which is determined by the IACF growth. Graphically, the dependence (5) is shown in Fig. 2. Empirical ratios of dependences (5) for the first IP



**Табл. 2.** Сопоставления расчетных и экспериментальных ПИ по зависимости (5) и АКФ отдельных спектров для кислород- и азотсодержащих молекул

**Table 2.** Comparison of calculated and experimental IP depending on (5) and ACF of individual spectra for oxygen- and nitrogen-containing molecules

Молекулы Molecules	ИАКФ, эВ IACF, eV	ПИ (расчет), эВ IP (calculate), eV	ПИ (по зависимости (5), эВ IP (dependency (5)), eV	Абс. погреш- ность, эВ Absolute error, eV	Отн. погреш- ность, % Relative error, %
Спирты и органические окси-соединения Alcohols and organic oxy compounds					
о-Крезол o-Cresol	18,87	9,06	8,98	0,08	0,88
п-Крезол p-Cresol	18,84	8,95	8,98	0,03	0,34
2,3,5-Триметилфенол 2,3,5-Trimethylphenol	14,74	8,92	9,06	0,14	1,57
Кетоны и альдегиды Ketones and aldehydes					
Циннамалиденацетон Cinnamylideneacetone	55,46	9,01	9,00	0,01	0,12
2,5-Диметилбензофенон 2,5-Dimethylbenzophenone	35,49	9,40	9,59	0,19	2,02
Циклогексилфенилкетон Cyclohexyl phenyl ketone	11,20	9,99	10,31	0,32	3,20
Пиридины и акридины Pyridines and acridines					
2-Фенилпиридин 2-Phenylpyridine	33,16	9,02	9,01	0,01	0,13
3-Фенилпиридин 3-Phenylpyridine	33,78	9,16	8,98	0,18	1,97
9-Оксиакридин 9-Oxyacridine	41,32	8,38	8,69	0,31	3,70

яний, принадлежащих различным молекулярных орбиталям гетероциклических соединений. Следовательно, можно предположить что возможно определение ПИ непосредственно из электронных спектров по частотным ИАКФ в видимой и ближней УФ- областях спектра.

Установленные зависимости по своей точности не уступают другим экспериментальным методам и методам квантово-химического расчета в приближении RHF-6-31G\*\*. В табл.2 приведены характеристики адекватности эмпирических и расчетных оценок ПИ для различных молекул.

## ВЫВОДЫ

На основе представлений спектра как совокупности взаимодействующих возбужденных электронных состояний в сильно коррелированной квантовой системе, обнаружен физический эффект, связыва-

of oxygen- and nitrogen-containing molecules are given in Table 1.

Quasilinear connection of IP and ACF is confirmed by statistical data processing by the least square method. The corresponding average relative deviations are from 0.06 to 3.05 eV; determination ratios are from 0.76 to 0.99; variation ratios are from 3.99 to 6.82; root-mean-square deviations are from 0.35 to 0.64 eV;  $\zeta_1$  ratios are in the range from 9.35 to 11.34 eV;  $\zeta_2$  ratios are in the range from -2.98 to -7.87 (Table 1). As follows from the values of the  $\zeta_2$  ratios, the smallest value of the correlation parameters is in the series of pyridines and acridines < quinones < ketones and aldehydes < polyenoic acids < alcohols and oxy compounds. These circumstances coincide with the conclusions of the molecules quantum theory [21].

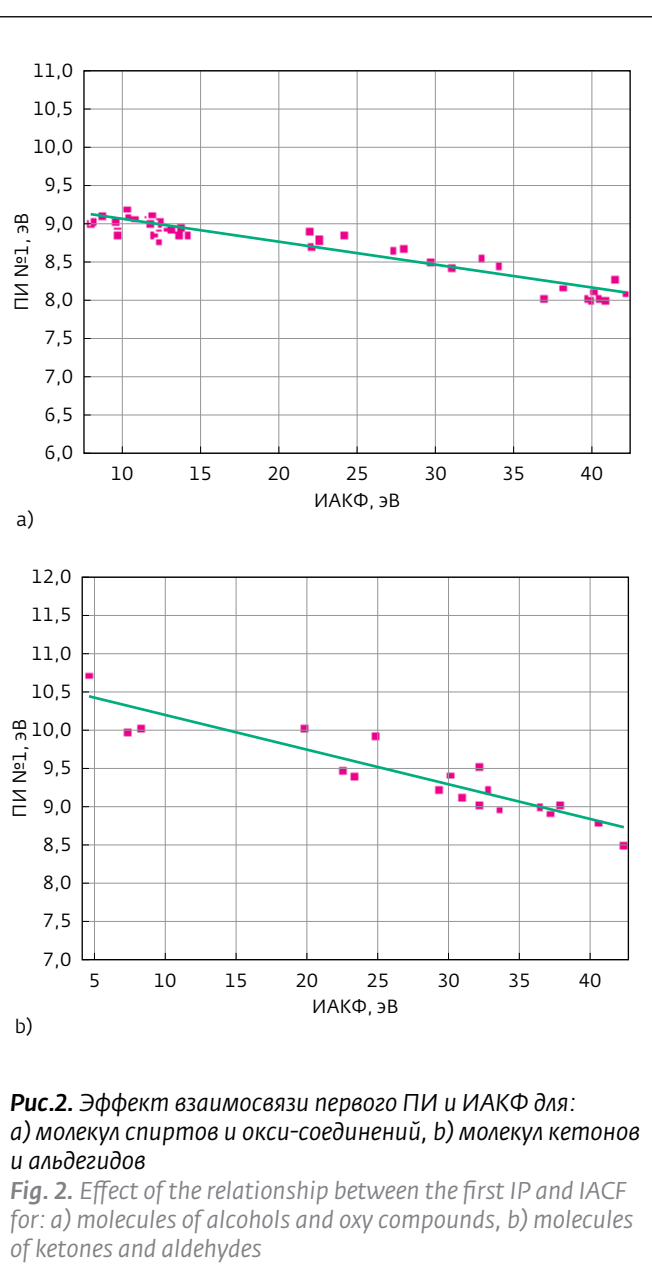
ющий потенциалы ионизации кислород- и азот-содержащих гетероциклических молекул с интегральной феноменологической характеристикой поглощения электромагнитного излучения – интегральным параметром автокорреляционной функцией сигнала в диапазоне 6,53–1,63 эВ (190–760 нм).

Установленные закономерности позволяют проводить оценки первых потенциалов ионизации кислород- и азотсодержащих молекул по интегральному параметру автокорреляционной функции оптических спектров поглощения в УФ- и видимой областях с достаточной для практических приложений, точностью определения  $\pm(0,1-0,3)$  эВ, обеспечивая тем самым получение корректной информации об электронной структуре молекул и свойствах сложных молекулярных систем и органических полупроводников без проведения квантовых расчетов и разделения спектральных полос преобразованием Фурье.

Установленные закономерности могут быть использованы в молекулярной электронике, фотонике, фотохимии и физической химии для изучения процессов переноса электронов, а также в оценках характеристик зонной структуры наночастиц в физике конденсированного состояния.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **В.В.Пасынков, В.С.Сорокин.** Материалы электронной техники. – С-Пб.: Лань, 2003.
2. **Т.Джилкрист.** Химия гетероциклических соединений. – М.: Мир, 1996.
3. **Ж.Симон, Ж.-Ж.Андре.** Молекулярные полупроводники. Фотоэлектрические и солнечные элементы – М.: Мир, 1988.
4. **И.Г.Давиденко, Качковский, Ю.Л.Сломинский, А.И.Толмачев.** Природа электронных переходов в цианиновых красителях, производных 7,8-дигидробензо[с, d]фуоро[2,3-f]индола. – Украинский химический журн., 2008, т. 74, № 6, с. 110–116.
5. **В.Я.Файн.** Антрахиноны и их применение. – М.: Центр фотохимии РАН, 1999.
6. **В.Ю.Водзинский.** Органические полупроводники. Учеб. пособие, НГТУ им. Р.Е.Алексеева. – Н. Новгород: 2015.
7. **Г.А.Мелентьева, Л.А.Антонова.** Фармацевтическая химия. – М.: Медицина, 1985.
8. **М.В.Коробов.** Потенциал ионизации. Химическая энциклопедия, т. 4/Под ред. Зефинова Н.С. – М.: БРЭ, 1995.
9. **J.Stöhr, H.C.Siegmann.** Magnetism: From Fundamentals to Nanoscale Dynamics. – Berlin: Springer-Verlag Heidelberg, Springer series in solid-state sciences, 2006, v.152.
10. **М.Ю.Доломатов, Г.Р.Мукаева.** Способ определения потенциалов ионизации и средства к электрону атомов и молекул методом электронной спектроскопии. – Прикл. спектроскопия, 1992, т. 56, № 4, с.570–574.950.
11. **Э.А.Ковалева, М.Ю.Доломатов.** Автокорреляционный анализ спектров поглощения электромагнитного излучения молекулами полициклических соединений в петагерцевой области. – Электромагнитные волны и электрон-



**Рис.2.** Эффект взаимосвязи первого ПИ и ИАКФ для: а) молекул спиртов и окси-соединений, б) молекул кетонов и альдегидов  
**Fig. 2.** Effect of the relationship between the first IP and IACF for: a) molecules of alcohols and oxy compounds, b) molecules of ketones and aldehydes

Thus, there is a physical effect connecting IACF with the first UI. The reason for this is probably the correlation of electronic states belonging to different molecular orbitals of heterocyclic compounds. Therefore, it can be assumed that it is possible to determine IP directly from the electronic spectra by frequency-based IACF in the visible and near-UV ranges of the spectrum.

The established dependencies are as good as other experimental methods and quantum-chemical calculation methods in RHF-6-31G\*\* approximation. Table 2 shows the characteristics of adequacy of IP empirical and calculated estimates for various molecules.



ные системы, 2016, № 9, с. 20–24.

12. **М.Ю.Доломатов, Г.У.Ярмухаметова, Д.О.Шуляковская.** Оценка первых потенциалов ионизации и сродства к электрону молекул полициклических органических полупроводников по цветовым характеристикам в колориметрических системах XYZ и RGB. – Прикладная физика, 2011, № 1, с.20–31.
13. **M.Yu.Dolomatov, K.F.Latypov.** Influence of lower energy levels on the first ionization potentials of molecules on the example of oxygen-containing. – ElecMol'12, MINATEC center, Grenoble, France, December, 3–7, 2012.
14. **M.Yu.Dolomatov, K.F.Latypov.** Influence of lower energy levels on the first ionization potentials of molecules on the example of oxygen-containing compounds. – Applied Physics Research, v.4, Canada, Toronto: Canadian Center of Science and Education, 2012, p.152–158.
15. **M.Yu.Dolomatov, N.Kh.Paymurzina, G.R.Mukaeva, K.F.Latypov.** Specific quantum interaction in the molecules and nanoparticles of organic semiconductors. – Trends in nanotechnologies, Seville, Spain, 2013.
16. **В.И.Тихонов.** Статистическая радиофизика. – М.: Радио и связь, 1982.
17. **С.М.Рытов.** Введение в статистическую радиофизику, ч. 1. Случайные процессы. – М.: Наука, 1976.
18. **В.Шмидт.** Оптическая спектроскопия для химиков и биологов. – М.: Техносфера, 2007.
19. **W.Leon, I.Couch.** Digital and Analog Communications Systems. – Prentice Hall, New Jersey, 2001.
20. **А.М.Яглом.** Корреляционная теория стационарных случайных функций с примерами из метеорологии. – Л.: Гидрометеиздат, 1981.
21. **F.Jensen.** Introduction to Computational Chemistry. – John Wiley&Sons, Ltd, 2007.
22. **Г.Ф.Большаков, В.С.Ватаго, Ф.Б.Агрест.** УФ-спектры гетероорганических соединений. – Л.: Химия, 1969.

## CONCLUSIONS

On the basis of spectral representations as a plurality of interacting excited electronic states in a strongly correlated quantum system, a physical effect binding ionization potentials of oxygen- and nitrogen-containing heterocyclic molecules with an integral phenomenological characteristic of absorption of electromagnetic radiation was discovered, an integral parameter of autocorrelation function of the signal in the range 6.53 .1.63 eV (190...760 nm).

The established regularities allow reducing the estimates of the first ionization potentials of oxygen- and nitrogen-containing molecules by integral parameters of the autocorrelation function of the optical absorption spectra in the UV and visible regions with the accuracy sufficient for practical applications,  $\pm(0.1...0.3)$  eV, thus providing for correct information about electronic structure of the molecules and the properties of complex molecular systems, and organic semiconductors without quantum calculations and division of spectral bands by Fourier transform.

The established regularities may be used in molecular electronics, photonics, photochemistry and physical chemistry for the study of electron transfer processes, as well as in the estimates of the characteristics of the band structure of nanoparticles in condensed matter physics.

## НОВЫЕ КНИГИ ИЗДАТЕЛЬСТВА "ТЕХНОСФЕРА"



Цена 1600 руб.

### ПОВЕРХНОСТНО-УСИЛЕННАЯ РАМАНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ (SERS): АНАЛИТИЧЕСКИЕ, БИОФИЗИЧЕСКИЕ И БИМЕДИЦИНСКИЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

Редактор оригинального издания С.Шлюкер

Перевод с англ. под редакцией А.А. Лушниковой

М.: ТЕХНОСФЕРА, 2017. – 332 с.  
ISBN 978-5-94836-425-4

В настоящем издании представлен обзор современных проблем спектроскопии ГКР (SERS) в аналитической, биофизической и биологической сферах приложения (ГКР – гигантское комбинационное рассеяние).

В книгу включены теоретические основы спектроскопии ГКР, обобщены различные субстраты для этой технологии, обсуждаются количественные методы спектроскопии ГКР, методы микроскопической и электрохимической спектроскопии ГКР, резонансной спектроскопии комбинационного рассеяния, усиленного поверхностью, спектроскопии гиперкомбинационного рассеяния, усиленного поверхностью, а также метод когерентной анти-стоксовой рамановской спектроскопии.

Книга предназначена для химиков-аналитиков, фармацевтов, спектроскопистов, биофизиков и материаловедов. Издание будет полезно как для новичков в спектроскопии ГКР, так и для экспертов в этой области, заинтересованных в получении обзорной информации, а также в углубленном изучении специальных вопросов.

#### КАК ЗАКАЗАТЬ НАШИ КНИГИ?

✉ 125319, Москва, а/я 91; ☎ (495) 234-0110; 📠 (495) 956-3346; [knigi@technosphaera.ru](mailto:knigi@technosphaera.ru), [sales@technosphaera.ru](mailto:sales@technosphaera.ru)