



Оценка ширины запрещенной зоны фотопроводимости органических полупроводников по интегральным параметрам автокорреляционных функций

К. Ф. Латыпов¹, М. Ю. Доломатов^{1,2}

¹ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Башкирский государственный университет (БашГУ), www.bashedu.ru; Уфа, Россия

² Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет» (УГНТУ), <http://rusoil.net>, Уфа, Россия

В результате исследования спектров молекул органических полупроводников, содержащих гетероатомы азота и кислорода, обнаружен эффект, связывающий ширину запрещенной зоны фотопроводимости с интегральной автокорреляционной характеристикой спектра поглощения в видимом и УФ-диапазонах. В качестве феноменологической характеристики используется интегральный параметр автокорреляционной функции (ИАКФ). Этот параметр отражает корреляцию электронных состояний, возникающих при возбуждении молекул. Установленная закономерность объясняется влиянием на ширину запрещенной зоны различных электронных состояний, которые влияют на переход электронов из валентной зоны в зону проводимости. Поскольку автокорреляционная функция спектра передает взаимосвязь резонансных электронных состояний, создающих оптический спектр, то ИАКФ характеризует, с одной стороны, корреляционное

Estimation of the Bandgap Width of Organic Semiconductors Photoconductivity by Integral Parameters of Autocorrelational Functions

K. F. Latypov¹, M. Yu. Dolomatov^{1,2}

¹ Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education «Bashkir State University» (BashSU), www.bashedu.ru; Ufa, Russia

² Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education «Ufa State Petroleum Technical University» (UGNTU), <http://rusoil.net>, Ufa, Russia

As a result of experiments with spectra of organic semiconductors molecules, a new physical effect was found that connects the bandgap width of photoconductivity and the integral autocorrelational characteristics of absorption spectra in the visible and UV-range. An integral parameter of autocorrelational function (IACF) was taken as a phenomenological characteristics. The parameter reflects a correlation of electronic states under molecules excitations. The regularity found can be explained by the dependence of bandgap width on electronic states that govern electron transfusions from the valence to the conduction band. Since the autocorrelational function of spectra reflects interconnection between resonant electronic states which create optical spectra; then, the IACF, on the one hand, reflects correlational interactions of electron, on the other hand, electron states energy. That is why we can speak about correlation between the mentioned parameter with the bandgap width that is connected to relevant activation energy of photoconductivity.

The discovered regularities are confirmed by investigations in organic semiconductors rows on the base of anthraquinones and oxypyrenes. The regularities allow to evaluate the bandgap width of photoconductivity of organic semiconductors on the base of anthraquinones and oxypyrenes



взаимодействие электронов, с другой – энергию электронных состояний. Поэтому имеет место взаимосвязь этого параметра с шириной запрещенной зоны, связанной с соответствующей энергией активации фотопроводимости.

Обнаруженные закономерности подтверждаются исследованиями в рядах органических полупроводников на основе антрахинонов и оксипириенов. Данные закономерности позволяют проводить оценку ширины запрещенной зоны фотопроводимости органических полупроводников на основе антрахинонов и оксипириенов по ИАКФ оптических спектров поглощения в УФ- и видимой областях с достаточной для практических приложений точностью определения $\pm(0,01-0,02)$ эВ. Результаты исследований могут быть практически использованы в молекулярной электронике, фотонике, нано- и микроэлектронике, а также при разработке квантовых генераторов на основе органических полупроводников.

Ключевые слова: ширина запрещенной зоны фотопроводимости, электронная корреляция, интегральный параметр автокорреляционной функции, электронные спектры, оптическая спектроскопия поглощения

Статья поступила в редакцию: 15.12.2019

Статья принята к публикации: 14.01.2020

ВВЕДЕНИЕ

Знание ширины запрещенной зоны фотопроводимости имеет существенное значение для оптимизации работы светодиодов, фотоэлектронных преобразователей и сенсоров на основе органических полупроводников.

Оценка ширины запрещенной зоны фотопроводимости (E_g^{photo}) может быть проведена расчетным и экспериментальным путем. В настоящее время для расчета E_g^{photo} известны квантово-механические способы оценки методом функционала плотности в приближении TD-DFT BLYP [1]. В этом методе предполагается использование нестационарного уравнения для функционала плотности, позволяющее оценивать время электронных переходов из основного в возбужденное состояния $\Delta E \Delta t \geq \hbar$, а следовательно, и ширину запрещенной зоны фотопроводимости. Эти способы предполагают, что

by the IPAF of optical absorption spectra in the visible and UV ranges with the consistent accuracy for practical applications $\pm(0,01-0,02)$ eV. The results of research can be applied in molecular electronics, photonics, nano and microelectronics, in construction of quantum generators on organic semiconductors base as well.

Keywords: bandgap width of photoconductivity, integral parameter of autocorrelational function, electronic spectra, optical absorption spectroscopy

Received: 15.12.2019

Accepted: 14.01.2020

INTRODUCTION

Knowledge of the bandgap width of photoconductivity is essential for optimizing the operation of LEDs, photoelectronic converters and sensors based on organic semiconductors.

Evaluation of the bandgap width of photoconductivity (E_g^{photo}) can be carried out by calculation and experimentally. Currently, quantum-mechanical methods for estimating the density functional method in the TD-DFT BLYP approximation are known for calculating (E_g^{photo}) [1]. This method assumes the use of a non-stationary equation for the density functional, which makes it possible to estimate the time of electronic transitions from the ground to the excited state $\Delta E \Delta t \geq \hbar$, and therefore the bandgap width of photoconductivity. These methods suggest that the bandgap width of photoconductivity is equal to the excitation energy of electronic states in the UV-range [1].

The disadvantages of the calculation approach include the impossibility of applying to multicomponent semiconductor systems and complex organic semiconductors.

There are methods for the experimental determination of $\Delta E \Delta t \geq \hbar$ by the fundamental band of the absorption spectrum $k^2=f(\lambda)$ [2] where k is the absorption coefficient, 10^2 m²/kg; $f(\lambda)$ is the distribution density of the square of the absorption coefficient, 10^4 m⁴/kg²; λ is the wavelength of electromagnetic radiation of a monochromatic source, nm. is determined by extrapolating the fundamental absorption band of the spectrum and determining the corresponding wavelength λ_0 by the formula:

$$E_g^{photo} = \frac{hc}{\lambda_0}, \quad (1)$$

where h is the Planck constant, $6.13567 \cdot 10^{-15}$ eV·s; c is the speed of light in vacuum, 299793 m/s; λ_0 is the



ширина запрещенной зоны фотопроводимости равна энергии возбуждения электронных состояний в УФ области [1].

К недостаткам расчетного подхода относятся невозможность применения к многокомпонентным полупроводниковым системам и сложным органическим полупроводникам.

Известны способы экспериментального определения E_g^{photo} по фундаментальной полосе спектра поглощения $k^2=f(\lambda)$ [2], где k – коэффициент поглощения, 10^2 м²/кг; $f(\lambda)$ – плотность распределения квадрата коэффициента поглощения, 10^4 м⁴/кг²; λ – длина волны электромагнитного излучения монохроматического источника, нм. E_g^{photo} определяется путем экстраполяции фундаментальной полосы поглощения спектра и определению соответствующей длины волны λ_0 по формуле:

$$E_g^{photo} = \frac{hc}{\lambda_0}, \quad (1)$$

где h – постоянная Планка, $6,13567 \cdot 10^{-15}$ эВ·с; c – скорость света в вакууме, 299793 м/с; λ_0 – граничная длина волны электромагнитного излучения, определенная путем экстраполяции, нм

Несмотря на кажущуюся простоту, способ имеет ряд недостатков:

- невозможность использования для многокомпонентных полупроводников, состоящих из двух и более соединений;
- невозможность использования для сложных органических полупроводников, в которых трудно разделить спектры поглощения, не прибегая к преобразованию Фурье;
- неприменимость для органических полупроводников, для которых отсутствует исчерпывающая информация о составе и структуре молекул.

Мы обнаружили эффект, позволяющий устранить данные недостатки. Многочисленные исследования показали существование зависимости между E_g^{photo} и интегральным параметром автокорреляционной функции.

Целью работы стало исследование интегральных корреляционных феноменологических характеристик оптических спектров органических молекул на основе антрахинонов и оксипиринов, которые, как известно, обладают полупроводниковыми свойствами [3–5]. В частности, изучение связей интегральных параметров автокорреляционных функций (АКФ) оптического спектра с шириной запрещенной зоны фотопроводимости в рамках гипотезы о сильной корреляции электронных состояний. Оптические спектры органических

boundary wavelength of electromagnetic radiation, determined by extrapolation, nm

Despite its apparent simplicity, the method has several disadvantages:

- the inability to use for multicomponent semiconductors consisting of two or more compounds;
- the inability of using complex organic semiconductors, in which it is difficult to separate the absorption spectra without resorting to the Fourier transform;
- inapplicability for organic semiconductors for which there is no comprehensive information on the composition and structure of molecules.

We found an effect that eliminates these shortcomings. Numerous studies have shown the existence of a relationship between E_g^{photo} and the integral parameter of the autocorrelational function.

The aim of the research was to study the integral correlation phenomenological characteristics of the optical spectra of organic molecules based on anthraquinones and hydroxypyrenes, which are known to have semiconductor properties [3–5]. In particular, the study of the relationships between the integral parameters of autocorrelational functions (ACF) of the optical spectrum and the bandgap width of photoconductivity in the framework of the hypothesis of strong correlation of electronic states. The optical spectra of organic semiconductors (anthraquinones and methoxypyrenes) are characterized by a combination of overlapping bands with maxima at $\lambda=240, 250, \text{ and } 280$ nm.

In earlier researches [6, 7], the authors' approach to the study of characteristics was that they calculated the phenomenological parameter of the spectrum without separating individual bands using the Fourier transform method. It was shown in [7] that the autocorrelational function (ACF) is a measure of the interaction of electronic states. As follows from a theoretical and experimental study of signals [8–10], ACF has the form:

$$Ac = \int_{-\infty}^{+\infty} S(\omega) \cdot S(\omega + \Delta\omega) d\omega, \quad (2)$$

where $S(\omega)$, $S(\omega + \Delta\omega)$ are the spectral distribution functions of the intensities of the absorbed radiation at frequencies ω and $\omega + \Delta\omega$, respectively. Using the Wiener-Khinchin theorem [11], the autocorrelational function can be expressed in terms of resonant frequencies:

$$Ac = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega} dF(\omega). \quad (3)$$

полупроводников (антрахиноны и метокси-пирены) характеризуются совокупностью перекрывающихся полос с максимумами при $\lambda=240, 250$ и 280 нм.

В более ранних работах [6, 7] подход авторов к исследованию характеристик состоял в том, что они вычисляли феноменологический параметр спектра без разделения отдельных полос методом Фурье-преобразования. В работе [7] показано, что автокорреляционная функция (АКФ) является мерой взаимодействия электронных состояний. Как следует из теоретического и экспериментального исследования сигналов [8-10], АКФ имеет вид:

$$Ac = \int_{-\infty}^{+\infty} S(\omega) \cdot S(\omega + \Delta\omega) d\omega, \quad (2)$$

где $S(\omega)$, $S(\omega + \Delta\omega)$ – спектральные функции распределения интенсивностей поглощаемого излучения на частотах ω и $\omega + \Delta\omega$ соответственно. Используя теорему Винера-Хинчина [11], можно выразить автокорреляционную функцию через резонансные частоты:

$$Ac = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega} dF(\omega). \quad (3)$$

Формула (3) непосредственно отражает связь энергетического спектра резонансных электронных состояний и АКФ. Однако поиск этих частот при помощи преобразования Фурье не является задачей исследования.

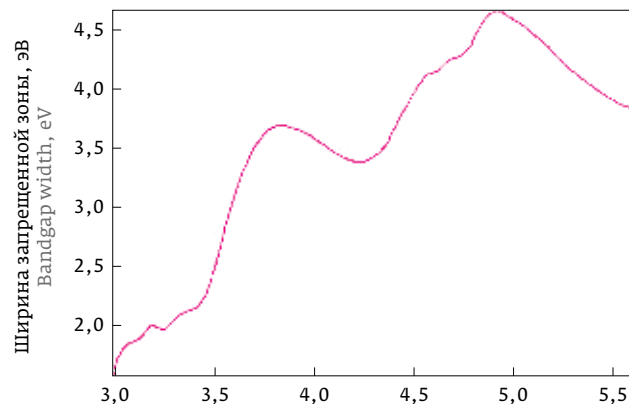
В данной работе рассматривается ближний УФ- и видимый диапазон спектра в области 190–760 нм (6,53–10,63 эВ), а вместо АКФ используется интегральный параметр от этой функции (ИАКФ), представляющий определенный интеграл с конкретным численным значением в энергетической шкале:

$$I_A = \int_{E_1}^{E_2} S(E) \cdot S(E + \Delta E) dE, \quad (4)$$

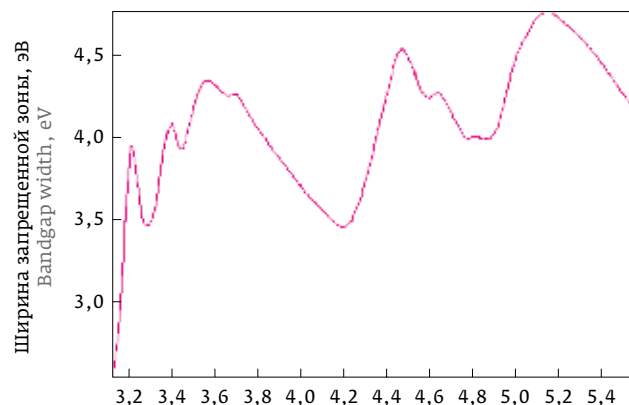
где E – энергия излучения, эВ; E_1, E_2 – диапазон спектра, эВ; $S(E)$ и $S(E + \Delta E)$ – спектральные функции распределения интенсивностей поглощения излучения в видимом и УФ-спектре для энергий E и $E + \Delta E$ соответственно.

ИАКФ представляет собой интегральное преобразование в виде произведения основной и запаздывающей логарифмической функции от молярного коэффициента поглощения $\epsilon(E)$, т.е. $S(E) = \lg \epsilon(E)$. Тогда

$$I_A = \int_{E_1}^{E_2} \lg \epsilon(E) \cdot \lg \epsilon(E + \Delta E) dE, \quad (5)$$



а) Интегральный параметр автокорреляционной функции (ИАКФ), эВ
Integral parameter of autocorrelational function (IACF), eV



б) Интегральный параметр автокорреляционной функции (ИАКФ), эВ
Integral parameter of autocorrelational function (IACF), eV

Рис. 1. Оптические спектры: а) антрахинона; б) 3-оксипирена

Fig. 1. Optical spectra: a) anthraquinone; b) 3-hydroxypyrene

Formula (3) directly reflects the relationship of the energy spectrum of resonant electronic states and ACF. However, the search for these frequencies using the Fourier transform is not the task of the study.

In this paper, we consider the near UV and visible range of the spectrum in the range 190–760 nm (6.53–10.63 eV), and instead of the ACF, we use the integral parameter of this function (IACF), which represents a certain integral with a specific numerical value in the energy scale:

$$I_A = \int_{E_1}^{E_2} S(E) \cdot S(E + \Delta E) dE, \quad (4)$$

where E is the radiation energy, eV; E_1, E_2 – spectrum range, eV; $S(E)$ and $S(E + \Delta E)$ are the spectral distribution

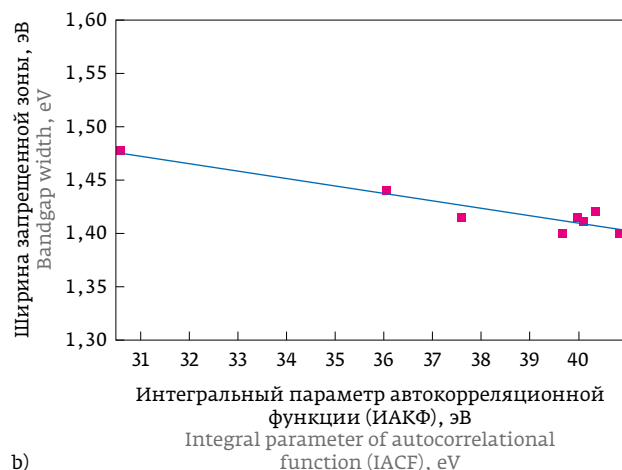
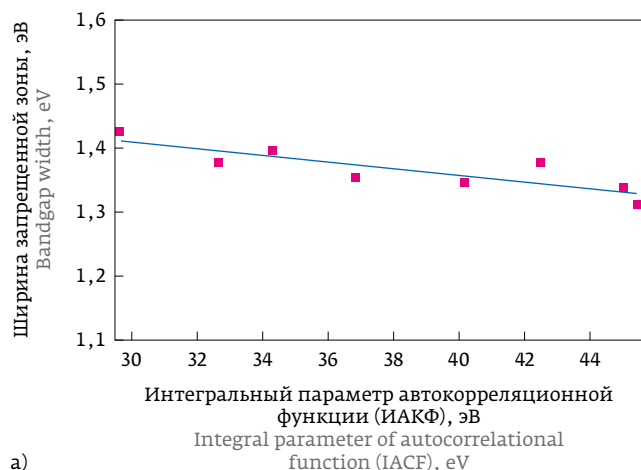


Рис. 2. Зависимость ширины запрещенной зоны фотопроводимости от ИАКФ в гетероатомных органических полупроводниках класса: а) антрахинонов; б) оксипириенов

Fig. 2. Dependence of the bandgap width of photoconductivity on the IACF in heteroatomic organic semiconductors classified as: a) anthraquinones; b) oxypyrenes

I_A имеет размерность эВ.

В проведенных ранее исследованиях [7,12] было установлено, что ИАКФ связано с потенциалами ионизации и сродством к электрону органических молекул. Это дает возможность предположить существование зависимости между ИАКФ и E_g^{photo} .

Для проверки данной гипотезы исследовались взаимосвязи ИАКФ, определенных по экспериментальным спектрам поглощения гетероциклических молекул с E_g^{photo} , полученных методом определения по краю фундаментальной полосы поглощения [2]. При расчетах допускается эргодичность и стационарность сигнала, т.е. время прохождения света через исследуемый образец значительно мало по сравнению со временем релаксации электронных состояний.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Объектами исследования в данной работе являлись спектры гетероатомных органических полупроводников ряда антрахинона и оксипириена, спектры отдельных соединений приведены на рис. 1. Как известно, спектры гетероатомных органических полупроводников характеризуются полосами поглощения, вызванными $\pi \rightarrow \pi^*$ -переходами, обусловленными присутствием сопряженной цепочки, они характеризуются высокой интенсивностью и слабо интенсивными запрещенными по симметрии $n \rightarrow \pi^*$, $n \rightarrow \sigma^*$ переходами.

Спектры поглощения регистрировались в области от 190 до 760 нм с шагом 1 нм при помощи

functions of the radiation absorption intensities in the visible and UV spectra for the energies E and $E + \Delta E$, respectively.

The IACF is an integral transformation in the form of the product of the main and delayed logarithmic functions of the molar absorption coefficient $\epsilon(E)$, i. e. $S(E) = \lg \epsilon(E)$. Then

$$I_A = \int_{E_1}^{E_2} \lg \epsilon(E) \cdot \lg \epsilon(E + \Delta E) dE, \quad (5)$$

I_A has an eV dimension.

In previous studies [7, 12], it was found that IACF is associated with ionization potentials and electron affinity of organic molecules. This makes it possible to assume the existence of a relationship between the IACF and E_g^{photo} .

To test this hypothesis, we studied the interrelationships of the IACF, determined from the experimental absorption spectra of heterocyclic molecules with E_g^{photo} , obtained by determining the fundamental absorption band along the edge [2]. In the calculations, ergodicity and stationarity of the signal are allowed, i. e. the time of light passage through the sample under study is much shorter than the relaxation time of electronic states.

EXPERIMENT RESULTS

The objects of study in this work were the spectra of heteroatomic organic semiconductors of a number of anthraquinone and oxypyrene, the spectra of individual compounds are shown in Fig. 1. As

автоматического электронного спектрометра СФ-2000, результаты выводились на ЭВМ через АЦП. Спектры отдельных соединений взяты из базы данных [13-14].

В дальнейшем расчет производился в энергетической шкале спектра.

Обработкой данных спектроскопии и расчетов E_g^{photo} способом экстраполяции фундаментальной полосы поглощения методом наименьших квадратов исследованы статистические связи E_g^{photo} и ИАКФ. Установленные зависимости для полупроводников ряда антрахинонов (рис. 2 а) и оксипириенов (рис. 2 б) имеют вид:

$$E_g^{photo} = D_1 - D_2 I_A, \quad (6)$$

где константа D_1 характеризует ширину запрещенной зоны фотопроводимости при отсутствии автокорреляции электронных состояний ($I_A = 0$), константа D_2 отражает уменьшение ширины запрещенной зоны фотопроводимости при увеличении корреляционной энергии отталкивания электронов. Значения D_1 и D_2 для ряда антрахинонов и оксипириенов, а также расчеты статистических погрешностей приведены в табл. 1.

По результатам эксперимента установлено, что E_g^{photo} для антрахинонов находится в диапазоне 1,31-1,43 эВ, а для оксипириенов соответственно 1,40-1,48 эВ. Полученная зависимость обоснована статистически: так коэффициент детерминации R^2 находится в диапазоне от 0,72 до 0,89, средняя относительная погрешность - в диапазоне от 0,44 до 1,16%.

is known, the spectra of heteroatomic organic semiconductors are characterized by absorption bands caused by $\pi \rightarrow \pi^*$ transitions due to the presence of a conjugated chain, they are characterized by high intensity and weakly intense $n \rightarrow \pi^*$, $n \rightarrow \sigma^*$ symmetry transitions.

Absorption spectra were recorded in the range from 190 to 760 nm with a step of 1 nm using an SF-2000 automatic electronic spectrometer, and the results were displayed on a computer via ADC. The spectra of individual compounds were taken from the database [13-14].

Subsequently, the calculation was performed on the energy scale of the spectrum.

By processing the data of spectroscopy and E_g^{photo} calculations by extrapolating the fundamental absorption band using the least square method, the statistical relationships of E_g^{photo} and IACF were studied. The established dependences for the semiconductors of a number of anthraquinones (Fig. 2 a) and oxypyrenes (Fig. 2 b) have the form:

$$E_g^{photo} = D_1 - D_2 I_A, \quad (6)$$

where the constant D_1 characterizes the bandgap width of photoconductivity in the absence of autocorrelation of electronic states ($I_A = 0$), the constant D_2 reflects a decrease in the bandgap width of photoconductivity with increasing correlation energy of electron repulsion. The values of D_1 and D_2 for a number of anthraquinones and hydroxypyrenes, as well as calculations of statistical errors, are given in Table 1.

Таблица 1. Значение эмпирических коэффициентов зависимости E_g^{photo} от ИАКФ для органических полупроводников ряда антрахинона и оксипириена

Table 1. Value of the empirical coefficients of the dependence of E_g^{photo} on the IACF for organic semiconductors of the anthraquinone and oxypyrene series

№ No.	Класс органических полупроводников Organic semiconductor class	D_1 , эВ D_1 , eV	$D_2 \cdot 10^{-3}$, безразмерная величина $D_2 \cdot 10^{-3}$, dimensionless quantity	Коэффициент детерминации, R^2 Determination coefficient, R^2	Оценка погрешностей Error estimation		
					Средняя абсолютная погрешность, эВ Average absolute error, eV	Средняя относительная погрешность, % Average relative error, %	Среднее квадратичное отклонение, эВ Standard deviation, eV
1	антрахиноны anthraquinones	1,56	5,15	0,72	0,02	1,16	0,03
2	метоксипириены methoxypyrenes	1,68	6,84	0,89	0,01	0,44	0,02



Таблица 2. Сравнения результатов определения ширины запрещенной зоны фотопроводимости различными методами

Table 2. Comparison of the results of determining the bandgap width of photoconductivity by various methods

№ No.	Органические полупроводники Organic semiconductors	Ширина запрещенной зоны фотопроводимости, эВ Bandgap width of photoconductivity, eV		Абс. погрешн., эВ Absolute error, eV	Относит. погрешн., % Relative error, %
		Оптическим методом по краю фунда. полосы By optical method around the edge of fund. band	По зависимости (6) By dependence (6)		
1	1-диметиламино-2,3,4-трифторантрахинон 1-dimethylamino-2,3,4-trifluororantraquinone	1,48	1,33	0,15	10,13
2	11-оксибензо[b]пирен 11-hydroxybenzo[b]pyrene	1,33	1,37	0,04	3,01
Средняя погрешность, % Average error, %				0,58	6,57

В качестве примера были определены значения E_g^{photo} органических полупроводников: 1-диметиламино-2,3,4-трифторантрахинона и 11-оксибензо[b]пирена. Определение производилось по краю фундаментальной полосы спектра поглощения λ и по зависимости (6) (табл. 2). Из табл. 2 следует, что средняя относительная погрешность определения ширины запрещенной зоны фотопроводимости органических полупроводников по зависимости (6) в сравнении с оптическим методом по краю фундаментальной полосы составляет 6,57%. Следовательно, предлагаемый способ определения ширины запрещенной зоны фотопроводимости дает адекватные результаты в сравнении с известным аналогом.

Таким образом, существует возможность определения ширины запрещенной зоны фотопроводимости непосредственно из спектра по ИАКФ.

ВЫВОДЫ

Для органических гетероатомных полупроводников ряда антрахинона и оксипирена в ходе экспериментального изучения оптических спектров в видимом и УФ-диапазонах установлен эффект, связывающий ширину запрещенной зоны фотопроводимости с интегральным параметром автокорреляционной функции спектра поглощения, который характеризует взаимодействие возбужденных электронных состояний.

Установленные закономерности позволяют проводить оценки ширины запрещенной зоны фотопроводимости органических полупроводников рядов антрахинонов и оксипиринов по интегральному параметру автокорреляционной

According to the results of the experiment, for anthraquinones is in the range 1.31–1.43 eV, and for oxypyrenes, respectively, 1.40–1.48 eV. The obtained dependence is statistically substantiated: thus, the determination coefficient R^2 is in the range from 0.72 to 0.89, the average relative error is in the range from 0.44 to 1.16%.

As an example, the values of organic semiconductors were determined: 1-dimethylamino-2,3,4-trifluororantraquinone and 11-hydroxybenzo[b]pyrene. The determination was made at the edge of the fundamental band of the absorption spectrum and according to dependence (6) (Table 2). It follows from Table 2 that the average relative error in determining the bandgap width of photoconductivity of organic semiconductors from dependence (6) in comparison with the optical method along the edge of the fundamental band is 6.57%. Therefore, the proposed method for determining the bandgap width of photoconductivity gives adequate results in comparison with the known analogue.

Thus, it is possible to determine the bandgap width of photoconductivity directly from the spectrum by the IACF.

CONCLUSIONS

During the experimental study of optical spectra in the visible and UV ranges for organic heteroatomic semiconductors of the anthraquinone and oxypyrene series, an effect was established that relates the bandgap width of photoconductivity to the integral parameter of the autocorrelational function of the absorption spectrum, which characterizes the interaction of excited electronic states.



функции оптических спектров поглощения в УФ- и видимой областях с достаточной для практических приложений точностью определения $\pm(0,01-0,02)$ эВ. Обеспечивая тем самым получение корректной информации о ширине зоны проводимости в органических полупроводниках без проведения квантовых расчетов и разделения спектральных полос с помощью преобразования Фурье.

Полученные результаты предназначены для использования в исследованиях полупроводников для задач создания фотоэлектронных преобразователей, а также при разработке квантовых генераторов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Юрнев П. В., Щербинин А. В., Степанов Н. Ф. Применимость методов TD-DFT для расчета электронного спектра поглощения гексааминоуретина (п) в водном растворе. Журнал физической химии. 2010; 84(1): 44–48.
2. Бондарь И. В. Ширина запрещенной зоны твердых растворов $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}[\text{x}]\text{Se}[\text{1-x}])$. Физика и техника полупроводников. 2015; 49(9):1180–1183.
3. Симон Ж. Ж.-Ж. Андре. Молекулярные полупроводники: фотоэлектрические и солнечные элементы. – М.: Мир, 1988.
4. Водзинский В. Ю. Органические полупроводники / Учебное пособие. – Н. Новгород: НГТУ им. Р. Е. Алексеева. 2015.
5. Файн В. Я. 9, 10-антрахиноны и их применение. – М.: Центр фотохимии РАН. 1999.
6. Тихонов В. И. Статистическая радиофизика. – М.: Радио и связь, 1982.
7. Рытов С. М. Введение в статистическую радиофизику / ч. 1. Случайные процессы. – М.: Наука. 1976.
8. Шмидт В. Оптическая спектроскопия для химиков и биологов. – М.: Техносфера. 2007; 189–194.
9. Leon W., Couch I. Digital and Analog Communications Systems. 6 ed. – New Jersey: Prentice Hall. 2001; 406–409.
10. Долomatov М. Ю., Ковалева Э. А. Автокорреляционный анализ спектров поглощения электромагнитного излучения молекулами полициклических соединений в петагерцевой области. Электромагнитные волны и электронные системы. 2016; 21(9): 20–24.
11. Долomatov М. Ю., Латыпов К. Ф. Определение потенциала ионизации гетероциклических молекул по оптическим спектрам поглощения электромагнитного излучения в видимой и УФ-области. Фотоника. 2017; 4: 78–82.
12. Долomatov М. Ю., Латыпов К. Ф. Применение методов статистической радиофизики для оценки потенциалов ионизации и сродства к электрону молекул по спектрам поглощения электромагнитного излучения в петагерцевой области. Электромагнитные волны и электронные системы. 2017; 22(2):54–60.
13. Коптюг В. А. Атлас спектров ароматических и гетероциклических соединений. Выпуск 13. Спектры поглощения производных антрахинона 9,10 в инфракрасной, ультрафиолетовой и видимой областях. Новосибирск: ИОХ; НИЦ МС, 1977.
14. Большаков Г. Ф., Ватаго В. С., Агрест Ф. Б. Ультра-фиолетовые спектры гетероорганических соединений. – Л.: Химия, 1969.

ОБ АВТОРАХ

Латыпов Камил Фаридович, аспирант, kamil-latipov@rambler.ru, Башкирский Государственный Университет (БашГУ), www.bashedu.ru, Уфа, Россия
ORCID: 0000-0003-1581-662X,
Долматов Михаил Юрьевич, д. х. н., dolmatov@gmail.com, Башкирский Государственный Университет (БашГУ), www.bashedu.ru, Уфимский государственный нефтяной технический университет (УГНТУ), http://rusoil.net, Уфа, Россия
ORCID: 0000-0003-2677-6993

The established regularities make it possible to estimate the bandgap width of photoconductivity of organic semiconductors of anthraquinone and oxypyrene series by the integral parameter of autocorrelational function of optical absorption spectra in the UV and visible regions with an accuracy of $\pm(0.01-0.02)$ eV sufficient for practical applications. Thus, providing the correct information on the width of the conduction band in organic semiconductors without quantum calculations and separation of spectral bands using the Fourier transform.

The results obtained are intended for use in semiconductor research for the creation of photoelectronic converters, as well as in the development of quantum generators.

The idea of the experiment belongs to M. Dolomatov, schematic design and processing of the results was made by K. Latypov.

REFERENCE

1. YUrenev P. V., SHCherbinin A. V., Stepanov N. F. Primenimost' metodov TD-DFT dlya rascheta elektronnoy spektra pogloshcheniya geksaminoruteniya (p) v vodnom rastvore. Zhurnal fizicheskoy khimii. 2010; 84(1): 44–48.
2. Bodnar I. V. On the band gap of $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}[\text{x}]\text{Se}[\text{1-x}])$. Semiconductors. 2015; 49: 1145–1148. doi:10.1134 / S1063782615090079.
3. Simon J., Andre J.-J. Molecular Semiconductors: Photoelectrical Properties and Solar Cells / 1-st ed. – Berlin, Heidelberg, New York, Tokio: Springer-Verlag. 1985.
4. Vodzinskij V. YU. Organicheskie poluprovodniki / Uchebnoe posobie. – N. Novgorod: NGTU im. R. E. Alekseeva. 2015.
5. Fajn V. YA. 9, 10-antrahinony i ih primeneniye. – M.: Centr fotohimii RAN. 1999.
6. Tihonov V. I. Statisticheskaya radiofizika. – M.: Radio i svyaz', 1982.
7. Rytov S. M. Vvedeniye v statisticheskuyu radiofiziku / ch. 1. Sluchajnyye processy. – M.: Nauka. 1976.
8. SHmidt V. Opticheskaya spektroskopiya dlya himikov i biologov. – M.: Tekhnosfera. 2007; 189–194.
9. Leon W., Couch I. Digital and Analog Communications Systems. 6 ed. – New Jersey: Prentice Hall. 2001; 406–409.
10. Dolomatov M. YU., Kovaleva E. A. Avtokorrelatsionnyy analiz spektrov pogloshcheniya elektromagnitnoy izlucheniya molekulami politsiklicheskih soedineniy v petagercevoy oblasti. Elektromagnitnyye volny i elektronnyye sistemy. 2016; 21(9): 20–24.
11. Dolomatov M. YU., Latypov K. F. Opredeleniye potentsiala ionizatsii geterotsiklicheskih molekuly po opticheskim spektram pogloshcheniya elektromagnitnoy izlucheniya v vidimoy i UF-oblasti. Fotonika. 2017; 4: 78–82.
12. Dolomatov M. YU., Latypov K. F. Primeneniye metodov statisticheskoy radiofiziki dlya ocenki potentsialov ionizatsii i srodstva k elektronu molekuly po spektram pogloshcheniya elektromagnitnoy izlucheniya v petagercevoy oblasti. Elektromagnitnyye volny i elektronnyye sistemy. 2017; 22(2):54–60.
13. Koptuyug V. A. Atlas spektrov aromatischeskih i geterotsiklicheskih soedineniy. Vypusk 13. Spektiry pogloshcheniya proizvodnykh antrahinona 9,10 v infrakrasnoy, ul'trafiyoletovoj i vidimoy oblastiakh. Novosibirsk: IOH; NIC MS, 1977.
14. Bol'shakov G. F., Vatago V. S., Agrest F. B. Ul'tra-fiolyetovyye spektry geteroorganicheskikh soedineniy. – L.: Himiya, 1969.

ABOUT AUTHORS

Latypov Kamil Faridovich, graduate student, kamil-latipov@rambler.ru, Bashkir State University, www.bashedu.ru, Ufa, Russia
ORCID: 0000-0003-1581-662X
Dolmatov Michel Yurievich, Dr. of Chemical Sciences, dolmatov@gmail.com, Bashkir State University, www.bashedu.ru, Ufa State Petroleum Technological University, http://rusoil.net, Ufa, Russia
ORCID: 0000-0003-2677-6993