

УДК 535.6+535(075.8)

Оценка первых потенциалов ионизации и сродства к электрону молекул полициклических органических полупроводников по цветовым характеристикам в колориметрических системах XYZ и RGB

М. Ю. Долوماتов, Г. У. Ярмухаметова, Д. О. Шуляковская

Определены и изучены цветовые характеристики молекул полициклических органических полупроводников в колориметрических системах XYZ и RGB. Установлены линейные зависимости между цветовыми характеристиками и потенциалом ионизации и сродством к электрону молекул. Выводы подтверждены статистической обработкой данных.

PACS: 32.10.Hq

Ключевые слова: цветовые характеристики, потенциал ионизации, сродство к электрону, линейная корреляция.

Введение

В последние годы в нанoeлектронике разработаны полевые органические транзисторы, полупроводниковыми элементами которых являются молекулы аценовых, ароматических и гетероароматических соединений [1, 2].

Как известно, твердые органические полупроводники на основе полициклических ароматических и гетероциклических соединений относятся к проводникам *n*-типа [1, 2]. Механизм электронной проводимости реализуется за счет перехода электронов с высшей занятой на низшую свободную молекулярную орбиталь (МО) и переносом электрона между отдельными молекулами твердого проводника по экситонному механизму. Важное значение для разработки такого типа устройств имеет определение энергий высших занятых и низших свободных МО молекул полупроводника.

Из теоремы Купманса [3] известно, что первые потенциалы ионизации (ПИ) коррелируют с энергией высшей занятой МО, а сродство к электрону (СЭ) связано с энергией низшей свободной МО. Эти два параметра, таким образом, определяют зону проводимости материалов. Поэтому оценка

таких энергий имеет важное значение для нанoeлектроники. В настоящее время для определения и расчета ПИ применяют методы фотоэлектронной спектроскопии и квантовой химии. Методы фотоэлектронной спектроскопии сложны и требуют тщательной подготовки образцов [4]. Кроме того, жесткое ионизирующее излучение нарушает молекулярную структуру метастабильных веществ. Методы квантовых расчетов дают значительную ошибку в многоатомных квантовых системах, так как модельные гамильтонианы не учитывают в полной мере обменные взаимодействия электронов и эффекты взаимодействия электронов с ядерными остовами [3]. Методы определения СЭ, в частности, методы фотоотрыва, электронного удара, полярографический метод и т. д. характеризуются сложностью эксперимента. Поэтому разработка методов оценки ПИ и СЭ является актуальной задачей прикладной физики. Решение данной проблемы может быть получено на основе эмпирических зависимостей, связывающих первые ПИ и СЭ с какими-либо сравнительно просто определяемыми свойствами молекул, например цветовыми характеристиками (ЦХ).

Согласно теории МО цвет веществ связан с электронными спектрами поглощения излучения в видимой области спектра [5, 6]. Чем меньше энергетическое расстояние ΔE между высшими занятыми и низшими свободными МО в молекуле, тем больше максимум поглощения соединений. Величина ΔE связана с максимумом в спектре поглощения и, следовательно, с доминирующим цветовым тоном вещества:

$$\Delta E = hc / \lambda_{\max}, \quad (1)$$

где λ_{\max} — максимум поглощения, м;

Долوماتов Михаил Юрьевич, профессор.
Ярмухаметова Гульнара Ульфатовна, аспирант.
Уфимская государственная академия экономики и сервиса.
Россия, 450077, РБ, г. Уфа, ул. Чернышевского, 145.
E-mail: dolomatov@gmail.ru
Шуляковская Дарья Олеговна, аспирант.
Башкирский институт социальных технологий
(филиал) Академии труда и социальных отношений.
Россия, 450054, РБ, г. Уфа, Проспект Октября, 74/2.
E-mail: shibaeva@bk.ru

Статья поступила в редакцию 26 февраля 2010 г.

© Долوماتов М. Ю., Ярмухаметова Г. У., Шуляковская Д. О., 2011

$h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ — постоянная Планка, Дж/с;
 $c = 2,99792 \cdot 10^8$ — скорость света в вакууме, м/с.

Из соотношения (1) следует, что ПИ и СЭ пропорциональны величине $\Delta E = E_{НСМО} - E_{ВЗМО} \approx \approx \text{ПИ} - \text{СЭ}$.

В свою очередь ЦХ также пропорциональны ΔE . Следовательно, между ЦХ, ПИ и СЭ также должна существовать линейная взаимосвязь [7]. Применение линейной зависимости обосновано в работах [8—10], в которых установлены корреляции, связывающие первые ПИ ряда органических полупроводников с их ЦХ.

Цели работы — расширение классов полициклических ароматических соединений для определения первых ПИ по их ЦХ и исследование взаимосвязи ЦХ молекул ароматических полициклических соединений с СЭ.

Исследования имеют практическую значимость, так как открывают путь к разработке простых способов оценки электронной структуры органических полупроводников и сложных органических соединений, имеющих перспективу в нанoeлектронике.

Объекты исследования

В качестве объектов исследования были выбраны молекулы конденсированных, ароматических соединений, обладающих цветностью: углеводороды, содержащие три линейно-аннелированных бензольных кольца; углеводороды, содержащие пять линейно-аннелированных бензольных колец; углеводороды ряда перилена; углеводороды ряда бисантена; углеводороды ряда пирена; углеводороды ряда антрантрена; сера и кислород, содержащие конденсированные и гетероароматические полупроводники.

Спектры полупроводников были выбраны из [11, 12] и базы данных [13]. Спектры отдельных соединений исследованы на спектрометре Specord UV—VIS по стандартной методике в оптически прозрачных растворителях. ПИ и СЭ определяли по электронным абсорбционным спектрам в УФ- и видимой области по методике из [14] и данным работы [15].

Методика определения ЦХ соединений

Навеску соединения растворяли в оптически прозрачном растворителе. В качестве растворителей использовались вещества, обладающие растворяющей способностью, оптически прозрачные в видимой и ближней УФ-области: бензол, метанол, этанол, 1-метилнафталин, 1,2,4-трихлорбензол, циклогексан.

Растворители для полициклических ароматических и гетероциклических соединений

Соединение	Растворитель
Перилен.....	Метанол
2,3-бензперилен.....	Этанол
1,2-7,8-дибензперилен.....	Метанол
1,12-2,3-8,9-трибензперилен.....	Бензол
Коронен.....	Бензол
Пентафен.....	Этанол
3,4-бензпентафен.....	Бензол
Бисантен.....	Бензол
1,14-бензбисантен.....	Бензол
Овален.....	1-метилнафталин
3,4-10,11-дибензбисантен.....	Бензол
Циркумантрацен.....	1,2,4-трихлорбензол
1,2-3,4-дибензпирен.....	Этанол
1,2-3,4-9,10-трибензпирен.....	Этанол
1,14-4,5-дибензпентацен.....	Бензол
Антантрен.....	Бензол
1,2-7,8-дибензантантрен.....	Бензол
2,3-4,5-дибензантантрен.....	Бензол
2,3-8,9-дибензантантрен.....	Бензол
9-антрацентиол.....	Циклогексан
4-тиапирантион.....	Метанол
2-тиапирантион.....	Этанол
1,3-дитиолан-2-тион.....	Циклогексан

Концентрация растворов выбиралась таким образом, чтобы межмолекулярное взаимодействие веществ было минимальным. Поэтому спектры определялись в разбавленных растворах с концентрациями 10^{-4} — 10^{-6} кг/м³, так как при более высоких концентрациях наблюдается эффект ассоциации полициклических ароматических соединений [16], а при более низких концентрациях точность определения ЦХ снижается [17]. Концентрация растворов образцов должна быть такой, чтобы оптическая плотность на аналитической длине волны находилась в пределах 0,2—0,8.

Для соединений, содержащих три и пять линейно-аннелированных бензольных колец, и соединений ряда перилена оптимальная концентрация составила 10^{-6} кг/м³. Для соединений ряда бисантена и антрантрена — 10^{-5} кг/м³. Для соединений ряда пирена и гетероциклических соединений — $5 \cdot 10^{-5}$ и 10^{-4} кг/м³, соответственно.

Полученный раствор заливали в рабочую кварцевую кювету спектрофотометра, стандартный размер которой равен 1 см. В канале сравнения помещали парную кювету с чистым растворителем. Регистрировали электронный абсорбционный спектр поглощения исследуемого соединения с шагом 10 нм в видимой области спектра от 380 до 780 нм.

На рис. 1 представлены характерные спектры отдельных классов соединений.

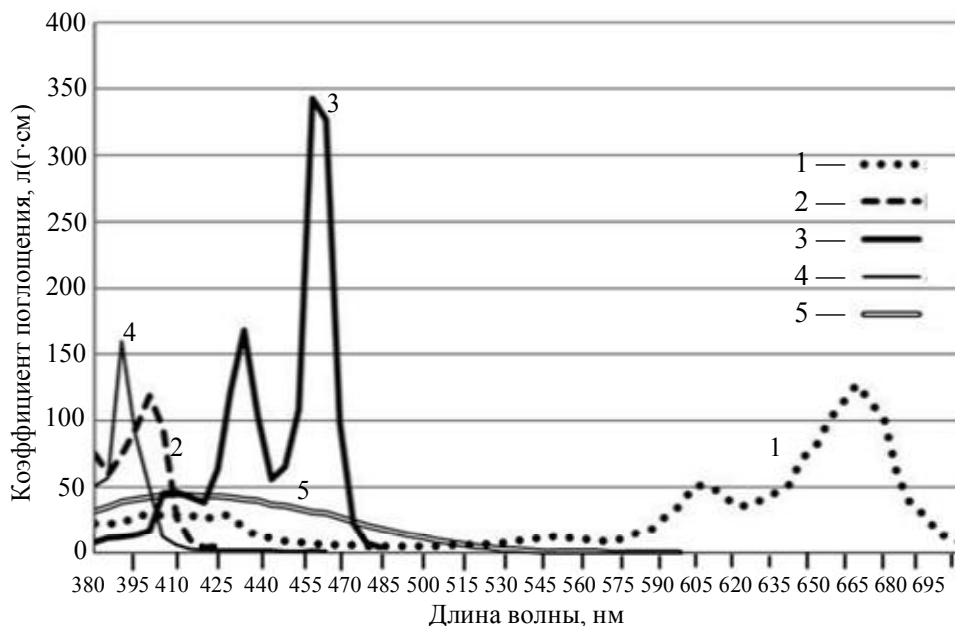


Рис. 1. Электронные абсорбционные спектры поглощения органических полупроводников в растворах оптически прозрачных веществ:

1 — раствор бисантена (соединение ряда бисантена) в бензоле; 2 — раствор 1,12-2,3-8,9-трибензперилена (соединение ряда перилена) в бензоле; 3 — раствор 1,2-7,8-добензантатрена (соединение ряда антатрена) в бензоле; 4 — раствор 1,2-3,4-9,10-трибензпирена (соединение ряда пирена) в этаноле; 5 — раствор 2-тиапирантиона (гетероциклическое соединение) в этаноле

Далее определяли коэффициент поглощения $k(\lambda_i)$ при каждом значении длины волны λ_i по известной формуле:

$$k(\lambda_i) = \frac{1}{cL} D(\lambda_i), \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (2)$$

где $k(\lambda_i)$ — коэффициент поглощения при определенной длине волны λ_i согласно интервалам разбиения спектра, л/(г·см);

c — концентрация поглощающего соединения, г/л;

L — толщина кюветы (в нашем примере 1 см);

$D(\lambda_i)$ — оптическая плотность раствора при определенной длине волны λ_i согласно интервалам разбиения спектра, безразмерная величина;

n — количество частичных интервалов разбиения спектра.

Спектральные коэффициенты пропускания $\tau(\lambda_i)$, соответствующие длине волны λ_i , определяли в соответствии с законом Бугера—Ламберта—Бэра:

$$\tau(\lambda_i) = 10^{-ck(\lambda_i)L}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (3)$$

где $\tau(\lambda_i)$ — спектральный коэффициент пропускания при определенной длине волны λ_i согласно интервалам разбиения спектра (безразмерная величина);

L — толщина поглощающего слоя раствора, т. е. толщина кюветы (в нашем примере 1 см).

Как известно, ЦХ зависят от типа источника света. В качестве источников видимого излучения для определения ЦХ использованы стандартные источники А, В, С и D₆₅ CIE (Comission Internationale de l'Eclairage) [18, 19]. Характеристики источников приведены в табл. 1.

Таблица 1

Характеристики стандартных источников излучения

Источник	Излучение	Цветовая температура T_c , К
А	Вольфрамовая лампа накаливания мощностью 60 Вт	2856
В	Солнечное излучение (среднесуточное прямое излучение Солнца на средних широтах)	4870
С	Фаза дневного света (дневной рассеянный свет облачного неба в полдень на средних широтах)	6770
D ₆₅	Фаза дневного света (среднесуточное суммарное излучение Солнца и неба вне зависимости от облачности)	6504

ЦХ были определены по методике Н. С. Овечкина [20] в соответствии со специально разработанной программой [21]. Сущность методики заключается в использовании для расчетов ЦХ коэффициентов пропускания τ и соотношения (4):

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} E(\lambda_1)\bar{x}(\lambda_1) & E(\lambda_2)\bar{x}(\lambda_2) & \dots & E(\lambda_i)\bar{x}(\lambda_i) \\ E(\lambda_1)\bar{y}(\lambda_1) & E(\lambda_2)\bar{y}(\lambda_2) & \dots & E(\lambda_i)\bar{y}(\lambda_i) \\ E(\lambda_1)\bar{z}(\lambda_1) & E(\lambda_2)\bar{z}(\lambda_2) & \dots & E(\lambda_i)\bar{z}(\lambda_i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau(\lambda_1) \\ \tau(\lambda_2) \\ \dots \\ \tau(\lambda_{i-1}) \\ \tau(\lambda_i) \end{pmatrix},$$

$$i = 1, 2, \dots, n, \quad (4)$$

где X, Y, Z — координаты цвета;

$E(\lambda_i)$ — спектральная характеристика источника излучения;

$\bar{x}(\lambda), \bar{y}(\lambda), \bar{z}(\lambda)$ — функции сложения стандартного колориметрического наблюдателя в системе CIE XYZ;

n — количество частичных интервалов разбиения спектра.

Выражение (4) можно представить в виде:

$$\Phi_{XYZ} = \mathbf{E}_{XYZ} \times \mathbf{T}, \quad (5)$$

где Φ_{XYZ} — вектор-столбец координат цвета исследуемого объекта в системе XYZ;

\mathbf{E}_{XYZ} — матрица произведений спектра стандартного источника излучения на функцию сложения стандартного колориметрического наблюдателя в системе XYZ;

\mathbf{T} — вектор-столбец соответствующих коэффициентов пропускания.

Координаты цветности определялись по формулам:

$$x = \frac{X}{X + Y + Z}; \quad y = \frac{Y}{X + Y + Z}; \quad z = \frac{Z}{X + Y + Z}. \quad (6)$$

В данной методике расчета координаты получаются зависящими от стандартных источников излучения и обозначаются соответствующими индексами: $x_A, y_A, z_A, x_B, y_B, z_B, x_C, y_C, z_C, x_D, y_D, z_D, X_A, Y_A, Z_A, X_B, Y_B, Z_B, X_C, Y_C, Z_C, X_D, Y_D, Z_D$.

Для оценок ЦХ в колориметрической системе RGB использовали известное в колориметрии преобразование [19, 20, 22]:

$$\begin{aligned} X &= 0,4185R + 0,0912G + 0,0009B; \\ Y &= 0,1588R + 0,2524G + 0,0025B; \\ Z &= 0,0829R + 0,0157G + 0,1786B. \end{aligned} \quad (7)$$

При этом проводим матричное преобразование:

$$\Phi_{XYZ} = \Phi \times \Phi_{RGB} \Rightarrow \Phi_{RGB} = \Phi^{-1} \times \Phi_{XYZ}, \quad (8)$$

$$\text{где } \Phi = \begin{pmatrix} 0,4185 & 0,0912 & 0,0009 \\ 0,1588 & 0,2524 & 0,0025 \\ 0,0829 & 0,0157 & 0,1786 \end{pmatrix} \text{ — матрица}$$

переходных коэффициентов от системы RGB к системе XYZ;

$$\Phi^{-1} = \begin{pmatrix} 2,769148 & -1,00058 & 0,0000516455 \\ -1,73101 & 4,590889 & -0,055539252 \\ -1,13318 & 0,06087 & 5,603962401 \end{pmatrix} \text{ —}$$

обратная матрица коэффициентов перехода от системы XYZ к системе RGB;

$$\Phi_{RGB} = \begin{pmatrix} R \\ G \\ B \end{pmatrix} \text{ — вектор-столбец, элементами ко-$$

торого являются цветовые координаты в системе RGB, скорректированные для определенного источника излучения, т. е. для вычисления используются значения Φ_{XYZ} из (5), рассчитанные для каждого из стандартных источников излучения A, B, C или D₆₅.

Вычисление цветового модуля $m = R + G + B$ и трехцветных координат цветности в системе RGB:

$$r = R/m, \quad g = G/m, \quad b = B/m. \quad (9)$$

Таким образом, соответствующие ЦХ системы RGB получили путем стандартного алгебраического преобразования ЦХ системы XYZ. Поэтому в данной методике расчета координаты RGB получаются зависящими от стандартных источников излучения и обозначаются соответствующими индексами: $r_A, g_A, b_A, r_B, g_B, b_B, r_C, g_C, b_C, r_D, g_D, b_D, R_A, G_A, B_A, R_B, G_B, B_B, R_C, G_C, B_C, R_D, G_D, B_D$.

Корреляции между ЦХ, ПИ и СЭ исследовались стандартным методом наименьших квадратов в виде линейной зависимости:

$$PI = A_0 + A_1 q; \quad EA = B_0 + B_1 q, \quad (10)$$

где PI — потенциал ионизации, эВ;
 A_0, A_1 — числовые коэффициенты, постоянные для данного класса органических веществ, ЦХ и типов источников, эВ;

q — ЦХ стандартных растворов в оптически прозрачных растворителях в системах XYZ и RGB;

EA — сродство к электрону, эВ;

B_0, B_1 — числовые коэффициенты, постоянные для данного класса органических соединений, ЦХ и типов источников, эВ.

В табл. 2 и 3 приведены соответствующие значения коэффициентов зависимостей (10) и результаты их статистической достоверности: коэффициенты корреляции, коэффициенты вариации (%), стандартные отклонения (эВ), а также расчетные и табличные значения критерия Фишера, необходимые для проверки адекватности линейной модели взаимосвязи ЦХ, ПИ и СЭ.

Таблица 2

Результаты исследования линейной корреляционной связи первого потенциала ионизации органических полупроводников и их ЦХ

Класс органических полупроводников	ЦХ	Коэффициенты зависимости (10) для потенциала ионизации $PI = A_0 + A_1q$		Коэффициент корреляции	Коэффициент вариации, %	Стандартное отклонение, эВ	Критерий Фишера для объема выборки, F	Табличное значение критерия Фишера, $F_{\text{табл}}$	Объем выборки, шт.
		A_1 , эВ	A_0 , эВ						
Полупроводники, содержащие три и пять линейно-аннелированных бензольных колец, и полупроводники ряда перилена	Z_C	-0,0120	8,2188	0,90	3,10	0,23	109,36	4,21	29
	Z_D	-0,0129	8,2035	0,89	3,13	0,23	106,74		
	B_C	-0,0023	8,2256	0,89	3,17	0,24	103,34		
	B_D	-0,0024	8,2110	0,89	3,20	0,24	100,79		
Полупроводники ряда бисантена и антантрена	z_C	4,7985	3,7638	0,94	4,44	0,31	75,06	5,12	11
	z_D	4,5947	3,9328	0,94	4,47	0,31	74,09		
	b_B	4,2833	3,4563	0,94	4,71	0,32	65,89		
	b_C	5,3597	2,4476	0,94	4,52	0,31	71,99		
Полупроводники ряда пирена	x_C	-4,2636	7,8232	0,87	2,85	0,20	54,17	4,41	20
	x_D	-4,2503	7,8231	0,86	2,88	0,20	53,04		
	R_A	-0,0110	7,2866	0,87	2,86	0,20	53,91		
	R_B	-0,0148	7,3764	0,87	2,80	0,20	56,79		
Гетероциклические полупроводники	y_C	-1,9421	7,7117	0,94	1,92	0,14	93,07	4,67	15
	y_D	-1,8822	7,7100	0,93	1,96	0,14	89,11		
	g_A	-1,1612	7,5854	0,91	2,32	0,17	60,00		
	g_B	-1,2637	7,5599	0,90	2,41	0,18	54,45		

Таблица 3

Результаты исследования линейной корреляционной связи средства к электрону органических полупроводников и их ЦХ

Класс органических полупроводников	ЦХ	Коэффициенты зависимости (10) для средства к электрону $SЭ = B_0 + B_1q$		Коэффициент корреляции	Коэффициент вариации, %	Стандартное отклонение, эВ	Критерий Фишера для объема выборки, F	Табличное значение критерия Фишера, $F_{\text{табл}}$	Объем выборки, шт.
		B_1 , эВ	B_0 , эВ						
Полупроводники, содержащие три и пять линейно-аннелированных бензольных колец, и полупроводники ряда перилена	Z_C	0,0049	0,6344	0,90	9,92	0,09	109,36	4,21	29
	Z_D	0,0053	0,6407	0,89	10,01	0,10	106,74		
	B_C	0,0009	0,6316	0,89	10,77	0,10	103,34		
	B_D	0,0010	0,6376	0,89	10,88	0,10	100,79		
Полупроводники ряда бисантена и антантрена	z_C	-1,9716	2,4650	0,94	10,65	0,13	74,96	5,12	11
	z_D	-1,8879	2,3955	0,94	10,71	0,13	74,00		
	b_B	-1,7597	2,5912	0,94	11,29	0,13	65,68		
	b_C	-2,2019	3,0056	0,94	10,85	0,13	71,75		
Полупроводники ряда пирена	x_C	1,7519	0,7970	0,87	7,62	0,08	54,11	4,41	20
	x_D	1,7464	0,7970	0,86	7,68	0,08	52,97		
	R_A	0,0045	1,0175	0,87	7,64	0,08	53,74		
	R_B	0,0061	0,9806	0,87	7,49	0,08	56,64		
Гетероциклические полупроводники	y_C	0,7978	0,8430	0,94	5,71	0,06	93,13	4,67	15
	y_D	0,7732	0,8437	0,93	5,82	0,06	89,19		
	g_A	0,4769	0,8949	0,91	6,89	0,07	59,98		
	g_B	0,5190	0,9054	0,90	7,17	0,07	54,36		

На рис. 2—5 приведены соответствующие корреляции для отдельных классов органических полупроводников.

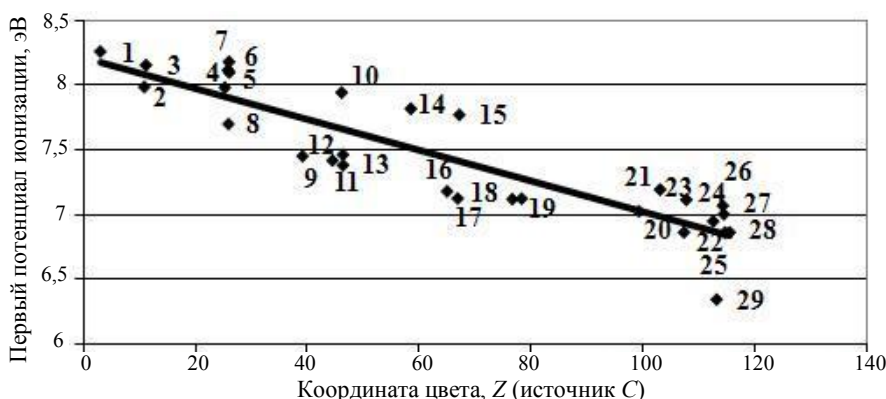


Рис. 2. Взаимосвязь первого потенциала ионизации полупроводников, содержащих три и пять линейно-аннелированных бензольных колец, и полупроводников ряда перилена с координатой цвета Z для источника C :

- 1 — 2,3-бензпицен; 2 — 1,12-2,3-8,9-трибензперилен; 3 — 1,12-2,3-добензперилен; 4 — антрацено[2',1':1,2]антрацен; 5 — коронен; 6 — 2,3-8,9-добензпицен; 7 — 3,4-бензпентафен; 8 — пентафен; 9 — перилен; 10 — нафт[2',3':3,4]пентафен; 11 — 1,12-0-фениленперилен; 12 — 1,2-бензкоронен; 13 — 1,2-3,4-5,6-10,11-тетрабензантрацен; 14 — 2,3-8,9-добензперилен; 15 — 1,2-7,8-добензкоронен; 16 — 1,12-0-фенилен-2,3-10,11-добензперилен; 17 — нафт[2',3':1,2]коронен; 18 — 2,3-10,11-добензперилен; 19 — 2,3-бензперилен; 20 — 1,2-3,4-5,6-трибензкоронен; 21 — антрацено[2',1':1,2]тетрафен; 22 — 1,2-бензперилен; 23 — 1,2-10,11-добензперилен; 24 — 1,2-3,4-8,9-10,11-тетрабензпентацен; 25 — 1,2-11,12-добензперилен; 26 — 1,2-8,9-добензпентацен; 27 — 1,2-бензпентацен; 28 — пентацен; 29 — 1,2-7,8-добензперилен



Рис. 3. Взаимосвязь сродства к электрону полупроводников, содержащих три и пять линейно-аннелированных бензольных колец, и полупроводников ряда перилена с координатой цвета Z для источника C .
Числа на графике от 1 до 29 соответствуют веществам на рис. 2

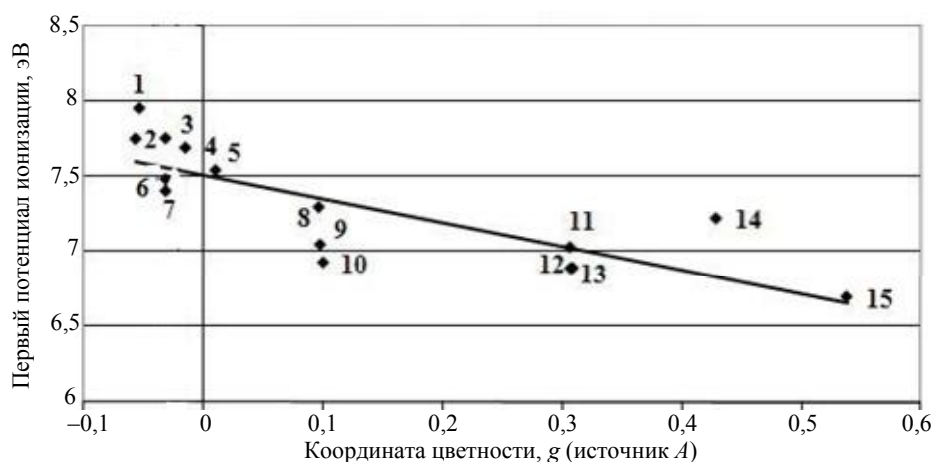


Рис. 4. Взаимосвязь первого потенциала ионизации гетероциклических полупроводников с координатой цветности g для источника A :

- 1 — 1,2-бис-(фенилтио)этилен; 2 — 2,2';5',2"-гертенил; 3 — 1,3-дителилен-2-тион; 4 — 4,5-циклогексено-1,3-дителилен-2-тион; 5 — 9-антрацентиол; 6 — 4-фенил-1,3-дителилен-2-тион; 7 — нафто[1,2-b]-1,3-дителилен-2-тион; 8 — тиолан-3,4-дителион; 9 — 4,5-диметил-1,2-дителилен-3-тион; 10 — 2-фенил-5,6-бензо-4-тиапирантион; 11 — 4,5-циклогексено-1,2-дителилен-3-тион; 12 — 4,5-циклопентено-1,2-дителилен-3-тион; 13 — 4,5-циклопентено-1,2-дителилен-3-тион; 14 — 4-тиапирантион; 15 — 2-тиапирантион

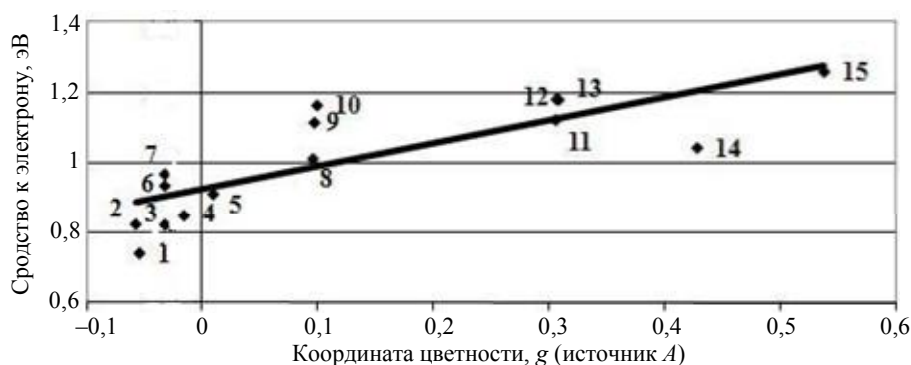


Рис. 5. Взаимосвязь сродства к электрону гетероциклических полупроводников с координатой цветности g для источника A . Числа на графике от 1 до 15 соответствуют веществам на рис. 4

Обсуждение результатов

Проведена статистическая обработка данных по ЦХ, ПИ и СЭ органических полупроводников однофакторным регрессионным анализом. Результаты свидетельствуют о выполнении соотношений (10) для всех классов исследуемых веществ. Обоснуем адекватность данной зависимости для каждого класса веществ в определенных источниках излучения. Согласно табл. 2 зависимость ЦХ и ПИ изученных полупроводников характеризуется коэффициентами корреляции в пределах 0,86—0,94, коэффициентами вариации в пределах 1,92—4,71 % и стандартными отклонениями в пределах 0,14—0,32 эВ. Согласно табл. 3 для зависимости СЭ от ЦХ коэффициенты корреляции находятся в преде-

лах 0,86—0,94, коэффициенты вариации составляют 5,71—11,29 % и стандартные отклонения — 0,06—0,13 эВ. Как следует из табл. 2 и 3, критерий Фишера превышает табличное значение для всех классов веществ (при доверительной вероятности 0,95). Следовательно, наблюдаемая взаимосвязь между ЦХ, ПИ и СЭ является неслучайной.

В табл. 4 сопоставлены абсолютные значения первых ПИ, определенные известными методами и по ЦХ, и представлены: абсолютные погрешности определения ПИ полупроводников по ЦХ (эВ), относительные величины данных погрешностей (%), значения критерия Фишера для сравнения дисперсий двух выборок и табличные значения данного критерия, а также объемы этих выборок.

Таблица 4

Результаты определения первых потенциалов ионизации различных полупроводников

Класс органических полупроводников	Полупроводник	Потенциал ионизации, эВ		Абсолютная погрешность, эВ	Относительная погрешность, %	Критерий Фишера для объема выборки, F	Табличное значение критерия Фишера, $F_{\text{табл}}$	Объем выборки, шт.
		Известные методы	По ЦХ					
Полупроводники, содержащие три и пять линейно-аннелированных бензольных колец, и полупроводники ряда перилена	Пентафен	7,70	7,91	0,20	2,65	1,25	1,86	29
	3,4-бензпентафен	8,18	7,91	0,28	3,38			
	Нафт[2',3':3,4]пентафен	7,95	7,66	0,28	3,54			
	Антрацено[2',1':1,2]антрацен	7,99	7,91	0,07	0,88			
	2,3-бензпицен	8,26	8,18	0,08	0,98			
	2,3-8,9-добензпицен	8,12	7,91	0,21	2,61			
	Антрацено[2',1':1,2]тетрафен	7,20	6,98	0,21	2,97			
	Пентацен	6,87	6,83	0,03	0,48			
	1,2-бензпентацен	7,01	6,85	0,16	2,29			
	1,2-8,9-добензпентацен	7,07	6,85	0,22	3,16			
	1,2-3,4-8,9-10,11-тетрабензпентацен	6,95	6,87	0,08	1,20			
	Перилен	7,46	7,75	0,29	3,93			
	1,2-бензперилен	6,87	6,93	0,06	0,94			
	2,3-бензперилен	7,13	7,28	0,15	2,14			
	1,2-7,8-добензперилен	6,35	6,86	0,51	8,08			
	1,2-10,11-добензперилен	7,12	6,93	0,19	2,69			
	1,2-11,12-добензперилен	6,87	6,84	0,02	0,30			
	2,3-8,9-добензперилен	7,82	7,52	0,30	3,89			
	2,3-10,11-добензперилен	7,12	7,30	0,18	2,48			
	1,12-2,3-добензперилен	8,16	8,08	0,07	0,90			
1,12-2,3-8,9-трибензперилен	7,99	8,09	0,10	1,23				
1,12-0-фениленперилен	7,42	7,68	0,26	3,54				

Окончание табл. 4

Класс полупроводников	Полупроводник	Потенциал ионизации, эВ		Абсолютная погрешность, эВ	Относительная погрешность, %	Критерий Фишера для объема выборки, F	Табличное значение критерия Фишера, $F_{табл}$	Объем выборки, шт.
Полупроводники, содержащие три и пять линейно-аннелированных бензольных колец, и полупроводники ряда перилена	1,12-0-фенилен-2,3-10,11-добензперилен	7,18	7,44	0,26	3,55	1,25	1,86	29
	1,2-3,4-5,6-10,11-тетрабензантрацен	7,39	7,66	0,28	3,75			
	Коронен	8,10	7,91	0,20	2,41			
	1,2-бензкоронен	7,47	7,66	0,20	2,63			
	1,2-7,8-добензкоронен	7,77	7,41	0,36	4,64			
	1,2-3,4-5,6-трибензкоронен	7,03	7,03	0,00	0,00			
	Нафт[2',3':1,2]коронен	7,13	7,42	0,29	4,03			
Полупроводники ряда бисантена и антантрена	Бисантен	5,66	5,72	0,06	1,05	1,12	2,82	11
	1,14-бензбисантен	7,06	6,87	0,19	2,66			
	Овален	7,79	7,61	0,18	2,29			
	3,4-11,12-добензбисантен	7,61	7,63	0,01	0,18			
	3,4-10,11-добензбисантен	7,35	7,53	0,18	2,45			
	Циркумантрацен	5,03	5,39	0,36	7,10			
	1,2-3,4-8,9-10,11-тетрабензбисантен	7,60	7,49	0,11	1,45			
	Антантрен	7,24	7,67	0,44	6,04			
	1,2-7,8-добензантантрен	7,46	7,24	0,22	2,97			
	2,3-4,5-добензантантрен	6,35	6,56	0,21	3,31			
	2,3-8,9-добензантантрен	6,60	6,04	0,56	8,49			
Полупроводники ряда пирена	1,2-3,4-добензпирен	6,98	7,25	0,27	3,86	1,32	2,12	20
	3,4-8,9-добензпирен	7,14	7,34	0,20	2,75			
	3,4-9,10-добензпирен	7,32	7,29	0,02	0,32			
	1,2-3,4-9,10-трибензпирен	7,07	7,03	0,04	0,52			
	Нафт[2',3':3,4]пирен	7,05	7,33	0,28	3,97			
	3,4-бензнафт[2",3":8,9]пирен	7,29	7,21	0,09	1,17			
	3,4-бензнафт[2",3":9,10]пирен	7,40	7,36	0,04	0,47			
	Динзнафт[2',3':1,2]-[2",3":4,5]пирен	7,49	7,20	0,29	3,85			
	Динзнафт[2',3':3,4]-[2",3":8,9]пирен	7,00	6,81	0,19	2,76			
	Динзнафт[2',3':3,4]-[2",3":9,10]пирен	7,33	7,53	0,20	2,77			
	1,2-бензнафт[2",3":4,5]-[2",3":8,9]пирен	6,98	6,76	0,21	3,07			
	1,14-4,5-добензпентацен	7,08	7,15	0,07	1,02			
	Нафт[1',7':2,14]пентацен	6,99	7,05	0,06	0,92			
	Фенантreno[2',3':3,4]пирен	7,66	7,30	0,36	4,71			
	1,2-бензфенантreno[9',10':6,7]пирен	7,00	7,09	0,09	1,29			
	5,6-15,16-добензгексацен	7,17	7,14	0,03	0,46			
	Нафт[1',7':2,16]гексацен	6,35	6,48	0,12	1,95			
	5,6-8,9-14,15-17,18-тетрабензгептацен	7,55	7,23	0,32	4,19			
	1,18-4,5-9,10-13,14-тетрабензгептацен	7,29	7,41	0,12	1,71			
	Динафт[1',7':2,18]-[7",1":9,11]гептацен	5,92	6,08	0,16	2,72			
Гетероциклические полупроводники	9-антрацентиол	7,54	7,57	0,03	0,38	1,14	2,40	15
	1,2-бис-(фенилтио)этилен	7,96	7,67	0,28	3,54			
	2,2';5',2"-гертиенил	7,75	7,68	0,08	0,97			
	4-тиапирантион	7,22	7,14	0,08	1,17			
	2-фенил-5,6-бензо-4-тиапирантион	6,93	7,05	0,13	1,87			
	2-тиапирантион	6,69	6,61	0,08	1,21			
	1,3-дитиолен-2-тион	7,76	7,65	0,11	1,41			
	4,5-циклогексено-1,3-дитиолен-2-тион	7,69	7,62	0,07	0,89			
	4-фенил-1,3-дитиолен-2-тион	7,48	7,65	0,16	2,17			
	Нафто[1,2-b]-1,3-дитиолен-2-тион	7,40	7,64	0,24	3,28			
	4,5-диметил-1,2-дитиолен-3-тион	7,05	7,23	0,19	2,63			
	4,5-циклопентено-1,2-дитиолен-3-тион	6,89	6,91	0,02	0,31			
	4,5-циклогексено-1,2-дитиолен-3-тион	7,03	7,02	0,00	0,07			
	4,5-циклогептено-1,2-дитиолен-3-тион	6,89	6,83	0,06	0,87			
	Тиолан-3,4-дитион	7,30	7,29	0,00	0,05			

Из данных табл. 4 следует, что для полупроводников, содержащих три и пять линейно-аннелированных бензольных колец, и полупроводников ряда перилена абсолютные отклонения значений

ПИ, определенных известным методом и по ЦХ, находятся в пределах 0,00—0,51 эВ, а относительные отклонения в пределах 0,00—8,08 %. Незначительно отклонение значений ПИ, полученных

этими методами, для 1,2-3,4-5,6-трибензкоронена. Достаточно малы абсолютные отклонения ПИ для пентацена и 1,2-11,12-добензперилена и составляют 0,03 и 0,02 эВ, соответственно.

Для полупроводников ряда бисантена и антантрена абсолютные отклонения значений ПИ, определенных известным методом и по ЦХ, находятся в пределах 0,01—0,56 эВ, а относительные отклонения в пределах 0,18—8,49 %. Абсолютные отклонения значений ПИ, полученных этими методами, для 3,4-11,12-добензбисантена и бисантена не превышают 0,01 и 0,06 эВ, соответственно.

Для полупроводников ряда пирена абсолютные отклонения значений ПИ, определенных известным методом и по ЦХ, находятся в пределах 0,02–0,36 эВ, а относительные отклонения — в пределах 0,32—4,71 %. Наблюдались малые абсолютные отклонения ПИ для 3,4-9,10-добензпирена — 0,02 эВ и для 5,6-15,16-добензгексацена — 0,03 эВ, а для 3,4-бенз-нафт[2",3":9,10]пирена и 1,2-3,4-9,10-трибензпирена эти отклонения составили 0,04 эВ.

Для гетероциклических полупроводников абсолютные отклонения значений ПИ, определенных известным методом и по ЦХ, находятся в пределах

0,00—0,28 эВ, а относительные отклонения в пределах 0,05—3,54 %. Незначительно отклонение значений ПИ, полученных этими методами, для 4,5-циклогексено-1,2-дитиолен-3-тиона и тиолан-3,4-дитиона. Достаточно малы абсолютные отклонения ПИ для 9-антрацентиола и 4,5-циклопентено-1,2-дитиолен-3-тиона и составляют 0,03 и 0,02 эВ, соответственно.

Наибольшие погрешности для значений ПИ, полученных известными методами и по ЦХ, наблюдались для: 1,2-7,8-добензкоронена (полупроводник ряда перилена) — 0,36 эВ; 1,2-7,8-добензперилена (полупроводник ряда перилена) — 0,51 эВ; антантрена (полупроводник ряда антантрена) — 0,44 эВ; 2,3-8,9-добензантантрена (полупроводник ряда антантрена) — 0,51 эВ; фенантreno[2',3':3,4]пирена (полупроводник ряда пирена) — 0,36 эВ; 5,6-8,9-14,15-17,18-тетрабензгептацена (полупроводник ряда пирена) — 0,32 эВ и 1,2-бис-(фенилтио) этилена (гетероциклический полупроводник) — 0,28 эВ.

В табл. 5 сопоставлены значения СЭ, определенные известными методами и по ЦХ, и представлены статистические оценки определения СЭ по ЦХ.

Таблица 5

Результаты определения сродства к электрону для различных полупроводников

Класс полупроводников	Полупроводник	Сродство к электрону, эВ		Абсолютная погрешность, эВ	Относительная погрешность, %	Критерий Фишера для объема выборки, F	Табличное значение критерия Фишера, $F_{\text{табл}}$	Объем выборки, шт.
		Известные методы	По ЦХ					
Полупроводники, содержащие три и пять линейно-аннелированных бензольных колец, и полупроводники ряда перилена	Пентафен	0,85	0,76	0,08	9,86	1,25	1,86	29
	3,4-бензпентафен	0,65	0,76	0,11	17,55			
	Нафт[2',3':3,4]пентафен	0,75	0,86	0,12	15,41			
	Антрацено[2',1':1,2]антрацен	0,73	0,76	0,03	4,03			
	2,3-бензпицен	0,62	0,65	0,03	5,32			
	2,3-8,9-добензпицен	0,68	0,76	0,09	12,90			
	Антрацено[2',1':1,2]тетрафен	1,05	1,14	0,09	8,38			
	Пентацен	1,19	1,20	0,01	1,14			
	1,2-бензпентацен	1,13	1,20	0,07	5,86			
	1,2-8,9-добензпентацен	1,11	1,20	0,09	8,36			
	1,2-3,4-8,9-10,11-тетрабензпентацен	1,16	1,19	0,03	2,95			
	Перилен	0,95	0,83	0,12	12,70			
	1,2-бензперилен	1,19	1,16	0,03	2,25			
	2,3-бензперилен	1,08	1,02	0,06	5,78			
	1,2-7,8-добензперилен	1,40	1,19	0,21	15,04			
	1,2-10,11-добензперилен	1,09	1,17	0,08	7,20			
	1,2-11,12-добензперилен	1,19	1,20	0,01	0,70			
	2,3-8,9-добензперилен	0,80	0,92	0,12	15,66			
	2,3-10,11-добензперилен	1,09	1,01	0,07	6,70			
	1,12-2,3-добензперилен	0,66	0,69	0,03	4,53			
	1,12-2,3-8,9-трибензперилен	0,73	0,69	0,04	5,56			
	1,12-0-фениленперилен	0,96	0,85	0,11	11,23			
	1,12-0-фенилен-2,3-10,11-добензперилен	1,06	0,95	0,11	9,92			
	1,2-3,4-5,6-10,11-тетрабензантрацен	0,98	0,86	0,11	11,64			
	Коронен	0,68	0,76	0,08	11,75			
	1,2-бензкоронен	0,94	0,86	0,08	8,56			
	1,2-7,8-добензкоронен	0,82	0,97	0,15	18,19			
	1,2-3,4-5,6-трибензкоронен	1,12	1,12	0,00	0,04			
	Нафт[2',3':1,2]коронен	1,08	0,96	0,12	10,89			

Окончание табл. 5

Класс полупроводников	Полупроводник	Средство к электрону, эВ		Абсолютная погрешность, эВ	Относительная погрешность, %	Критерий Фишера для объема выборки, F	Табличное значение критерия Фишера, $F_{\text{табл}}$	Объем выборки, шт.
		Известные методы	По ЦХ					
Полупроводники ряда бисантена и антантрена	Бисантен	1,69	1,66	0,02	1,44	1,12	2,82	11
	1,14-бензбисантен	1,11	1,19	0,08	6,95			
	Овален	0,81	0,88	0,07	9,13			
	3,4-11,12-добензбисантен	0,88	0,88	0,01	0,65			
	3,4-10,11-добензбисантен	0,99	0,92	0,07	7,50			
	Циркумантрацен	1,94	1,80	0,15	7,56			
	1,2-3,4-8,9-10,11-тетрабензбисантен	0,89	0,93	0,05	5,13			
	Антантрен	1,04	0,86	0,18	17,31			
	1,2-7,8-добензантантрен	0,95	1,04	0,09	9,58			
	2,3-4,5-добензантантрен	1,40	1,31	0,09	6,19			
	2,3-8,9-добензантантрен	1,30	1,53	0,23	17,75			
Полупроводники ряда пирена	1,2-3,4-добензпирен	1,14	1,03	0,11	9,69	1,32	2,12	20
	3,4-8,9-добензпирен	1,08	1,00	0,08	7,50			
	3,4-9,10-добензпирен	1,01	1,01	0,01	0,90			
	1,2-3,4-9,10-трибензпирен	1,11	1,12	0,02	1,36			
	Нафт[2',3':3,4]пирен	1,12	1,00	0,11	10,31			
	3,4-бензнафт[2'',3'':8,9]пирен	1,02	1,05	0,03	3,43			
	3,4-бензнафт[2'',3'':9,10]пирен	0,97	0,99	0,01	1,47			
	Динзнафт[2',3':1,2]-[2'',3'':4,5]пирен	0,93	1,05	0,12	12,72			
	Динзнафт[2',3':3,4]-[2'',3'':8,9]пирен	1,13	1,21	0,08	7,00			
	Динзнафт[2',3':3,4]-[2'',3'':9,10]пирен	1,00	0,92	0,08	8,34			
	1,2-бензнафт[2'',3'':4,5]-[2'',3'':8,9]пирен	1,15	1,23	0,09	7,72			
	1,14-4,5-добензпентацен	1,10	1,07	0,03	2,69			
	Нафт[1',7':2,14]пентацен	1,14	1,11	0,03	2,38			
	Фенантрено[2',3':3,4]пирен	0,86	1,01	0,15	17,19			
	1,2-бензфенантрено[9',10':6,7]пирен	1,14	1,10	0,04	3,28			
	5,6-15,16-добензгексацен	1,06	1,08	0,01	1,34			
	Нафт[1',7':2,16]гексацен	1,40	1,35	0,05	3,61			
	5,6-8,9-14,15-17,18-тетрабензгептацен	0,91	1,04	0,13	14,33			
	1,18-4,5-9,10-13,14-тетрабензгептацен	1,02	0,97	0,05	5,08			
Динафт[1',7':2,18]-[7'',1'':9,11]гептацен	1,58	1,51	0,07	4,22				
Гетероциклические полупроводники	9-антрацентиол	0,91	0,90	0,01	1,31	1,14	2,40	15
	1,2-бис-(фенилтио)этилен	0,74	0,86	0,12	15,53			
	2,2';5',2''-тертиенил	0,83	0,86	0,03	3,79			
	4-тиапирантион	1,05	1,08	0,03	3,33			
	2-фенил-5,6-бензо-4-тиапирантион	1,17	1,11	0,05	4,55			
	2-тиапирантион	1,26	1,29	0,03	2,68			
	1,3-дитиолен-2-тион	0,83	0,87	0,05	5,48			
	4,5-циклогексено-1,3-дитиолен-2-тион	0,85	0,88	0,03	3,32			
	4-фенил-1,3-дитиолен-2-тион	0,94	0,87	0,07	7,11			
	Нафто[1,2-b]-1,3-дитиолен-2-тион	0,97	0,87	0,10	10,26			
	4,5-диметил-1,2-дитиолен-3-тион	1,12	1,04	0,08	6,83			
	4,5-циклопентено-1,2-дитиолен-3-тион	1,18	1,17	0,01	0,78			
	4,5-циклогексено-1,2-дитиолен-3-тион	1,12	1,13	0,00	0,20			
	4,5-циклогептено-1,2-дитиолен-3-тион	1,18	1,21	0,02	2,05			
	Тиолан-3,4-дитион	1,01	1,02	0,00	0,13			

Из данных табл. 5 следует, что для полупроводников, содержащих три и пять линейно-аннелированных бензольных колец, и полупроводников ряда перилена абсолютные отклонения значений СЭ, определенных известным методом и по ЦХ, находятся в пределах 0,00—0,21 эВ, а относительные отклонения в пределах 0,04—18,19 %. Незначительно отклонение значений СЭ, полученных этими методами, для 1,2-3,4-5,6-трибензкоронена. Достаточно малы абсолютные отклонения СЭ для

пентацена и 1,2-11,12-добензперилена, которые не превышают 0,01 эВ.

Для полупроводников ряда бисантена и антантрена абсолютные отклонения значений СЭ, определенных известным методом и по ЦХ, находятся в пределах 0,01—0,23 эВ, а относительные отклонения в пределах 0,65—17,75 %. Абсолютные отклонения значений СЭ, полученные этими методами, для 3,4-11,12-добензбисантена и бисантена не превышают 0,01 и 0,02 эВ, соответственно.

Для полупроводников ряда пирена абсолютные отклонения значений СЭ, определенные известным методом и по ЦХ, находятся в пределах 0,01—0,15 эВ, а относительные отклонения в пределах 0,90—17,19 %. Незначительны отклонения между методами определения СЭ для 3,4-9,10-дибензпирена, 3,4-бензнафт[2",3":9,10]пирена и 5,6-15,16-дибензгексацена и составляют 0,01 эВ.

Для гетероциклических полупроводников абсолютные отклонения значений СЭ, определенных спектроскопическим методом и по ЦХ, находятся в пределах 0,00—0,12 эВ, а относительные отклонения составляют 0,13—15,53 %. Для 4,5-циклогексено-1,2-дитиолена-3-тиона и тиолана-3,4-дитиона отклонения значений СЭ, полученных данными методами, минимально. Достаточно малы эти значения для полупроводников: 9-антрацентиола и 4,5-циклопентено-1,2-дитиолена-3-тиона — 0,01 эВ, а 4,5-циклогептено-1,2-дитиолена-3-тиона — 0,02 эВ.

Наибольшие отклонения значений СЭ, полученных обычными спектроскопическими методами и по ЦХ, наблюдались для: 1,2-7,8-дибензперилена (полупроводник ряда перилена) — 0,21 эВ, антантрена (полупроводник ряда антантрена) — 0,18 эВ; 2,3-8,9-дибензантантрена (полупроводник ряда антантрена) — 0,23 эВ; фенантreno[2',3':3,4]пирена (полупроводник ряда пирена) — 0,15 эВ; 1,2-бис-(фенилтио)этилена (гетероциклический полупроводник) — 0,12 эВ. Наблюдаемые расхождения между определениями ПИ и СЭ по ЦХ и известными методами, по-видимому, связаны с образованием молекулами данных веществ коллоидных дисперсных систем в соответствующих растворителях, что, в свою очередь, приводит к наложению процессов рассеяния на процессы поглощения излучения. Кроме того, не исключены эффекты ассоциации молекул, которые также искажают коэффициенты поглощения в видимой области спектра.

Применяя критерий Фишера для сравнения дисперсий двух выборок, можно утверждать, что предлагаемый метод по своей точности не уступает известному, так как для табл. 4 и 5 критерий Фишера меньше табличного значения при доверительной вероятности 0,95.

Выводы

1. В исследованиях получены полуэмпирические зависимости, которые позволяют оценивать энергию верхней и нижней МО молекул органических полупроводников и, следовательно, ширину зоны проводимости. Последнее обстоятельство имеет значение не только для молекулярной электроники, но и химии, так как ПИ и СЭ являются важнейшими характеристиками реакционной спо-

собности молекул в орбитально контролируемых реакциях.

2. В отличие от сложных методов фотоэлектронной спектроскопии и спектроскопии резонансного захвата электрона данный способ оценки ширины зоны проводимости позволяет использовать электронные абсорбционные спектры поглощения растворов в видимой области.

3. Полученные результаты количественно подтверждают качественные выводы о связи ЦХ с энергиями высшей занятой и низшей свободной МО. В дальнейшем предполагается расширение указанного подхода на другие классы веществ и материалов, например, на полимерные полупроводники.

4. Следует отметить, что данная методика неприменима к веществам, не имеющим поглощения в видимой области, т. е. не обладающих цветностью. Кроме того, она требует корректировки применительно к веществам, образующим дисперсные системы, в которых существуют ярко выраженные эффекты Релеевского рассеяния излучения, искажающие полученные в эксперименте коэффициенты поглощения. Таким образом, предлагаемый способ оценки ПИ и СЭ по ЦХ применим для молекул ароматических и гетероароматических полупроводников, способных образовывать молекулярные растворы в оптически прозрачных растворителях.

Литература

1. *Iechi H., Watanabe Y., Yamauchi H., Kudo K.* Characterization of zinc oxide and pentacene thin film transistors for CMOS inverters IEICE trans electron//Oxford journal Mathematics&Physical Sciences. V.E91-C. 2008. No. 12. P. 1843—1847.
2. *Ming L. Tang, Anna D. Reichardt, Nobuyuki Miyaki, Randall M. Stoltenberg, Zhenan Bao//J. Am. Chem. Soc.* 2008. V. 130 (19). P. 6064, 6065.
3. *Грибов Л. А., Муштаков С. П.* Квантовая химия. Учебник. — М.: Гардарики, 1999.
4. *Пентин Ю. А., Вилков Л. В.* Физические методы исследования в химии. — М.: Мир, 2006.
5. *Степанов Б. И.* Введение в современную оптику. Квантовая теория взаимодействия света и вещества. — г. Минск, 1990.
6. *Травень В. Ф.* Электронная структура и свойства органических молекул. — М.: Химия, 1989.
7. *Доломатов М. Ю.* Фрагменты теории реального вещества. — М.: Химия, 2005.
8. *Dolomatov M. Yu.* Simple estimation methods of electron structures and physical properties of materials and compounds// ElecMol-08. The abstracts of fourth international meeting on molecular electronics. Grenoble, France, 2008. P.108.
9. *Доломатов М. Ю., Ярмухаметова Г. У.*//Прикладная физика. 2009. № 5.
10. *Dolomatov M. Yu., Mukaeva G. R., Jarmuhametova G. U., Shulyakovskaya D. O.* Simple definition methods of electron structures of materials and molecules for nanoelectronics // Nanotech Europe 2009. The abstracts of the Europe's largest annual

nanotechnology conference and exhibition. Berlin, Germany, 2009. P. 172.

11. Клар Э. Полициклические углеводороды: пер. с англ. — М., 1971. Т. 1, 2.

12. Science-softCon UV/Vis⁺ Spectra Data Base (UV/Vis⁺ Photochemistry Database). <http://www.science-softcon.de/spectra/aromatics/arocom1.htm>.

13. Доломатов М. Ю., Доломатова Л. А., Маврин А. В. База данных по исследованию свойств и идентификации многокомпонентных органических систем в УФ-, видимой и ближней ИК-области спектра. Свидетельство об официальной регистрации базы данных для ЭВМ № 2005620293, 2005.

14. Доломатов М. Ю., Мукаева Г. Р. Способ определения потенциалов ионизации и сродства к электрону атомов и молекул методом электронной спектроскопии // Журнал Прикл. спектроскопия. 1992. Т. 6. № 4. С. 570.

15. Гурвич Л. В., Карачевцев Г. В., Кондратьев В. Н., Лебедев Ю. А., Медведев В. А. и др. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. — М.: Наука, 1974.

16. Марушкин А. Б., Доломатов М. Ю., Ахметов С. А., Гимаев Р. Н., Запорин В. П. // Журнал физическая химия. 1987. Т. 36. № 6. С. 1647—1649.

17. Доломатов М. Ю., Ярмухаметова Г. У., Доломатова Л. А. // Прикладная физика. 2008. № 4. С. 43—47.

18. ISO/CIE 10526. CIE standard illuminants for colorimetry.

19. Mark D. Fairchild. Color appearance models. Second Edition. Munsell Color Science Laboratory. Rochester Institut of Technology. USA. 2004.

20. Применение цветопведения в текстильной промышленности, ч. 1, изд. 2-е/Под ред. Л. И. Беленького, Н. С. Овечки-са. — М.: Легпромиздат, 1970.

21. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. Расчет физико-химических свойств углеводородных систем по зависимостям спектр—свойства и цвет—свойства/Доломатов М. Ю., Ярмухаметова Г. У., Доломатова Л. А., Гареев Р. Р. Заявка 2008614324. зарегистрировано 10 сентября 2008 г.

22. Кричевский Г. Е. Методы исследования в текстильной химии: Учеб. пособие-справочник. — М.: Легпромбытиздат, 1993. С. 247—274.

The estimation of the first ionization potentials and electron affinity of the molecules of polycyclic organic semiconductors applying the color characteristics in colorimetric systems XYZ and RGB

M. Yu. Dolomatov, G. U. Jarmuhametova

Ufa State Academy of Economic and Service 145 Chernishevskiy str., Ufa, 450077, Russia

E-mail: dolomatov@gmail.ru

D. O. Shulyakovskaya

Bashkir Institute of Social Technologies (Branch) of the Academy of Labor & Social Relations

74/2 October prospect, Ufa, 450054, Russia

E-mail: shibaeva@bk.ru

The color characteristics of the polycyclic organic semiconductors are determined and investigated in colorimetric systems XYZ and RGB. Linear dependences are confirmed between the color characteristics and ionization potentials and electron affinity of the molecules. The conclusions are confirmed by statistical data processing.

PACS: 32.10.Hq

Keywords: color characteristics, ionization potential, electron affinity, linear correlation.

Bibliography — 22 references.

Received February 26, 2010