

**ВИЗНАЧЕННЯ ЕНЕРГІЇ ШИРИНИ ЗАБОРОНЕНОЇ ЗОНИ ХЛОРИДУ  
2-((ДИХЛОРО(4-МЕТОКСИФЕНІЛ)- $\lambda^4$ -ТЕЛАНІЛ)МЕТИЛ)-5-ОКСО-8-  
(ТРИФЛУОРОМЕТИЛ)-2,3-ДИГІДРО-5Н-ТІАЗОЛО[2,3-В]ХІНАЗОЛІН-10-ІО**

Кут Д. Ж., Погодін А. І., *Кут М. М.*

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород, Україна  
mykola.kut@uzhnu.edu.ua

Енергія ширини забороненої зони ( $E_{\text{gap}}$ ) є важливою характеристикою електронної структури матеріалів, яка часто визначає їхнє потенційне застосування. Одним із перших хто запропонував метод оцінки енергії ширини забороневої зони аморфних матеріалів за допомогою спектрів поглинання був Тауц. Метод Тауца базується на співвідношенні між  $E_{\text{gap}}$  та коефіцієнтом оптичного поглинання  $\alpha$ , згідно з рівнянням (1):

$$(\alpha \cdot h\nu)^{1/n} = B(h\nu - E_g) \quad (1)$$

де  $h$  – стала Планка,  $\nu$  – частота фотона,  $E_{\text{gap}}$  – енергія ширини забороневої зони,  $B$  – коефіцієнт пропорційності,  $n$  – коефіцієнт, що залежить від типу електронного переходу, тобто  $n = 1/2$  для прямого дозволеного переходу,  $n = 3/2$  для прямого забороневого переходу,  $n = 2$  для непрямого дозволеного переходу та  $n = 3$  для непрямого забороневого переходу.

В наведеному дослідженні проведено вивчення оптичних властивостей плівки хлориду 2-((дихлоро(4-метоксифеніл)- $\lambda^4$ -теланіл)метил)-5-оксо-8-(трифлуорометил)-2,3-дигідро-5Н-тіазоло[2,3-б]хіназолін-10-ію з використанням УФ-спектроскопії видимого світла.

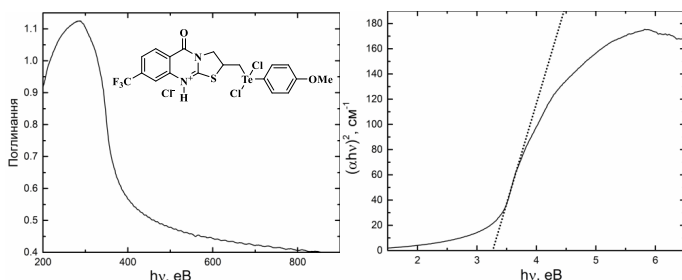


Рис. 1. Спектр поглинання та графічна залежність Тауца хлориду 2-((дихлоро(4-метоксифеніл)- $\lambda^4$ -теланіл)метил)-5-оксо-8-(трифлуорометил)-2,3-дигідро-5Н-тіазоло[2,3-б]хіназолін-10-ію

Із спектрів пропускання плівки для хлориду визначено значення енергії ширини забороневої зони (3.27 eV) з використанням методу Тауца (рівняння 1). Розрахункове значення (TD-DFT)  $E_{\text{gap}}$  (3.11 eV) добре корелює із значеннями  $E_{\text{gap}}$ , отриманими методом Тауца. Експериментальне та розраховане теоретично значення  $E_{\text{gap}}$  плівки для хлориду відрізняються на 5 %, що підтверджує гіпотезу про те, що сполукам даного класу характерний прямий дозволений перехід.

У проведеному дослідженні встановлено, що хлориду 2-((дихлоро(4-метоксифеніл)- $\lambda^4$ -теланіл)метил)-5-оксо-8-(трифлуорометил)-2,3-дигідро-5Н-тіазоло[2,3-б]хіназолін-10-ію характеризується рядом оптичних переходів ( $\pi \rightarrow \pi^*$ ,  $n \rightarrow \pi^*$ ,  $\pi \rightarrow \sigma^*$ , charge-transfer), найменш енергетичне значення яких визначають ширину забороневої зони ( $E_{\text{gap}}$ ). Експериментальні дані, отримані методом УФ-спектроскопії та проаналізовані за допомогою рівняння Тауца, добре узгоджуються з результатами теоретичних DFT-розрахунків.