

М.П. ГОРІШНИЙ

Інститут фізики НАН України, відділ молекулярної фотоелектроніки
(Просп. Науки, 46, Київ 03028; e-mail: miron.gorishny@gmail.com)**АПРОКСИМАЦІЯ ДОВГОХВИЛЬОВОГО КРАЮ
СПЕКТРІВ ПОГЛИНАННЯ СУМОЮ ФУНКЦІЙ ГАУСА
І ВИЗНАЧЕННЯ ВЕЛИЧИН ЕНЕРГІЇ УРБАХА E_u
ТА ОПТИЧНОЇ ШИРИНИ ЗАБОРОНЕНОЇ ЗОНИ
 E_g ПЛІВОК C_{60} ТОВЩИНОЮ 5000 І ~ 1000 НМ**УДК 535.343.2,
539.234, 537.533.35

Довгохвильовий край спектрів поглинання плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм апроксимовано сумою функцій Гауса (гаусіанів) в області 1,414–1,998 еВ і 1,448–2,371 еВ, відповідно. У плівках C_{60} товщиною 5000 нм цей край формується сумою гаусіанів 1,829 і 2,026 еВ, а в плівках C_{60} товщиною ~ 1000 нм – сумою гаусіанів 1,800; 1,894; 2,025 і 2,382 еВ. Основний внесок у поглинання плівок C_{60} товщиною 5000 нм дає гаусіан 2,026 еВ, а в плівках C_{60} товщиною ~ 1000 нм – гаусіани 1,894; 2,025 і 2,382 еВ. Величини E_u змінюються в межах 12,15–47,69 меВ і 28,04–108,44 меВ, а E_g – в межах 1,653–1,718 еВ і 1,524–1,769 еВ для плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм, відповідно.

Ключові слова: плівка, спектр поглинання, фулерени C_{60} і C_{70} , апроксимація, функція Гауса, гаусіан.

1. Вступ

Молекули фулеренів C_{60} і C_{70} , які відкрито в 1985 році [1], є замкненими кластерами з симетрією I_h і D_{5h} і за формою близькі до сфери й еліпсоїда обертання відповідно.

У процесі синтезу фулеренів утворюються молекули з різною кількістю атомів карбону С. Основними компонентами цієї суміші є найбільш стабільні молекули фулеренів C_{60} і C_{70} . Синтезовані молекули C_{60} і C_{70} розглядаються як суміші C_{60}/C_{70} або C_{70}/C_{60} , де перша і друга компоненти означа-

ють основну речовину й головну домішку відповідно [2]. Досліджено динаміку змін складу плівок суміші C_{60}/C_{70} у процесі їх термічного напилення у вакуумі [3].

C_{60} застосовувався в сонячних елементах [4], фотоелектричних пристроях [5], фотокаталізаторах [6], фототерапії [7] і біодатчиках [8].

Довгохвильовий край поглинання плівок C_{60} подібний до довгохвильового краю поглинання плівок на основі аморфного Si (a -SiC і a -Si:H). Величини E_g і E_u плівок C_{60} становлять 1,64 еВ і 61 меВ відповідно [9, 10].

Виявлено, що під дією зовнішнього тиску відбувається збільшення інтенсивності й червоне зміщення краю поглинання полікристалічних гранул суміші C_{60}/C_{70} . Величина E_g зменшується і наближається до нуля коли тиск дорівнює 20,5 ГПа. Після зняття цього тиску край поглинання цих гранул відновлюється до початкового вигляду, що свідчить про відсутність деструкції молекул C_{60}

Цитування: Горішний М.П. Апроксимація довгохвильового краю спектрів поглинання сумою функцій Гауса і визначення величин енергії Урбаха E_u та оптичної ширини забороненої зони E_g плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм. *Укр. фіз. журн.* **71**, № 9, 709 (2026).

© Видавець ВД “Академперіодика” НАН України, 2026. Стаття опублікована за умовами відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

і C_{70} . Припускаємо, що коли тиск $\geq 20,5$ ГПа гранули C_{60}/C_{70} можуть мати металічну провідність [11].

Існує три структурні фази плівок C_{60} залежно від температури: орієнтаційна заморожена фаза 1 ($T \leq 150$ K); фаза 2 орієнтаційної неупорядкованості ($150 < T \leq 260$ K) і фаза 3 вільного обертання молекул C_{60} ($260 < T < 470$ K). Величини E_g і E_u плівок C_{60} товщиною 1,0–8,5 мкм не змінюються у фазі 1 і змінюються повільно у фазі 2 та швидко у фазі 3. У фазах 2 і 3 зі зростанням температури плівки C_{60} товщиною 8,5 мкм величина E_g зменшується від 1,7 до 1,6 еВ, а величина E_u збільшується в межах 30–59 меВ відповіно. На величину E_u сильно впливає орієнтаційна неупорядкованість молекул C_{60} , а інтеркаляція O_2 не змінює її, тобто хвостовий параметр E_u є внутрішньою характеристикою плівок C_{60} [12]. Комплексні оптичні й електронно-мікроскопічні дослідження показали, що полікристалічні плівки C_{60} мають край фундаментального поглинання поблизу 1,65 еВ і залежність (dE_g/dP) від величини механічного напруження P становить $-2,8 \cdot 10^{-10}$ еВ/Па. В аморфних плівках C_{60} механічне напруження зменшується і край їхнього поглинання розташований поблизу 2,2 еВ [13].

Досліджено край поглинання і вперше визначено величини E_g і E_u субмікронних плівок C_{60} товщиною 20–900 нм [14, 15]. Такі ж дослідження проведено для плівок C_{60} у розширеному діапазоні товщин 20–5000 нм [16]. В цих роботах встановлено, що E_u зменшується, а E_g збільшується зі збільшенням товщини плівок C_{60} і C_{70} .

Отже, наведені вище в роботах [9–16] дані свідчать про те, що величини E_u , E_g плівок C_{60} залежать від зовнішнього тиску, температури і товщини цих плівок. Крім того, енергетична структура краю довгохвильового поглинання цих плівок свідчить про формування його контура декількома електронними переходами. У літературі енергетична структура цього краю практично не досліджена.

Актуальність цих досліджень полягає в тому, що величина E_u визначає крутизну нахилу довгохвильового краю поглинання і необхідна для оцінки ступеня структурованості плівок C_{60} , зумовленого електронними станами дефектів у забороненій зоні. За величиною E_g можна оцінювати можливе значення порогів поглинання цих плівок, що ду-

же важливо для визначення ефективності перетворення світлової енергії на електричну енергію сонячних елементів та інших подібних пристроїв на основі гетероструктур (ГС) з шарами C_{60} і композитів C_{60} з різними напівпровідниками p -типу.

У роботах [14–16] припускається, що енергетична структура довгохвильового краю поглинання плівок C_{60} товщиною ~ 1000 нм, яку вперше описано в роботі [9], може бути зумовлена вібронною прогресією триплетного екситона. Це припущення треба розглядати як один з варіантів пояснення природи енергетичної структури, оскільки на форму краю довгохвильового поглинання плівок C_{60} можуть також впливати домішки фулеренів C_n ($n > 60$), що утворюються в процесі синтезу [2]. Це вказує на необхідність більш детального дослідження енергетичної структури цього краю з метою виявлення впливу на нього інших електронних переходів C_{60} , зокрема електронних переходів можливих домішок фулеренів, особливо C_{70} . Довгохвильове поглинання цієї домішки значно більше, ніж у основної речовини C_{60} [17].

З урахуванням викладеного вище, метою нашої роботи є дослідження енергетичної структури довгохвильового краю поглинання товстих плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм, в яких ця структура може проявлятися краще, ніж у плівках субмікронної товщини. Крім того, буде визначено величини E_u і E_g для електронних переходів, які формують довгохвильовий край поглинання плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм. Ця робота є продовженням наших робіт [14–16].

2. Технологія виготовлення плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм

У роботі [12] вихідний порошок C_{60} чистотою 99,98% попередньо нагрівався за температури 250°C протягом 8 годин з метою вивільнення O_2 і толуолу. Плівки товщиною 5000 нм отримано термічним осадженням цього порошку на скляні й кварцові підкладки у вакуумі $5 \cdot 10^{-6}$ Торр за температури випарника і підкладок 400 і 250°C відповідно. Після цього підкладки з плівками охолоджувались до кімнатної температури. Отримано полікристалічні плівки C_{60} з кристалітами розміром 30–47 нм.

У роботах [9, 10] плівки товщиною ~ 1000 нм нанесено термічним осадженням порошку C_{60} на скляні підкладки у вакуумі $\sim 10^{-6}$ Торр. Поро-

шок C_{60} попередньо очищено кристалізацією з розчину в толуолі і подальшою колонковою хроматографією. Перевірка отриманих плівок мас-спектроскопією і раманівською спектроскопією показала, що ці плівки майже повністю складаються з молекул C_{60} .

3. Методи визначення величини енергії Урбаха E_u і ширини оптичної забороненої зони E_g напівпровідників

Хвіст поглинання Урбаха напівпровідників (зокрема плівок C_{60}) можна описати такою функціональною залежністю [18]:

$$\alpha = \alpha_0 \exp\left(\frac{E - E_g}{E_u}\right), \quad (1)$$

де α_0 – стала величина (вимірюється в см^{-1}); E – енергія фотонів; E_g – ширина оптичної забороненої зони і E_u – енергія Урбаха.

Після логарифмування на десятковій основі формули (1) різниця двох значень $\log \alpha$ дорівнює: $\log \alpha_2 - \log \alpha_1 = ((E_2 - E_1) \cdot \log e) / E_u$. Нехай $\log \alpha_2 - \log \alpha_1 = \Delta(\log \alpha)$ і $E_2 - E_1 = \Delta(E)$. Оскільки $\log e \approx 0,4343$, то $\Delta(\log \alpha) \approx (0,4343 \cdot \Delta(E)) / E_u$ і $E_u \approx 0,4343 / \kappa_u$, де $\kappa_u = \Delta(\log \alpha) / \Delta(E)$, тангенс кута нахилу графіка функції Урбаха $\log \alpha = f(E)$ до осі абсцис E .

З урахуванням викладеного вище, одержимо формулу для визначення величини E_u (в меВ):

$$E_u \approx \frac{434,3}{\kappa_u}, \quad (2)$$

де коефіцієнт κ_u вимірюється в еВ^{-1} .

Для опису краю поглинання непрямих електронних переходів в аморфних напівпровідниках використовується співвідношення, яке вперше встановлено Тауком (Таус) для плівок аморфного германію [19]. У сучасному трактуванні це співвідношення записується у вигляді рівняння [16]:

$$(\alpha \cdot E)^{0,5} = A_2 \cdot (E - E_g), \quad (3)$$

де A_2 – стала величина, яка чисельно рівна тангенсу кута нахилу функції (3) до горизонтальної осі енергії фотонів E ; E_g – ширина оптичної забороненої зони.

Нехай $y = (\alpha \cdot E)^{0,5}$ і $A_2 = k_g$. Тоді формула (3) набуває вигляду: $y = k_g \cdot (E - E_g)$. Після математичних перетворень одержуємо рівняння для

визначення величини E_g :

$$E_g = E - \frac{y}{k_g} \quad (4)$$

де E і y – абсциси і ординати точок прямолінійної ділянки графіка рівняння (3). E_g і E вимірюються в еВ, а y і коефіцієнт k_g – в $(\text{см}^{-0,5} \cdot \text{еВ}^{0,5})$ і $(\text{см}^{-0,5} \cdot \text{еВ}^{-0,5})$ відповідно.

З рівняння (4) випливає, що коли ордината $y = 0$, абсциса $E = E_g$. Отже, величину E_g можна визначати двома способами. Перший (розрахунковий) метод полягає в обчисленні значення E_g з рівняння (4) для координат $(E; y)$ точок, вибраних на прямолінійній ділянці графіка рівняння (3). За допомогою другого (графічного) способу величина E_g визначається екстраполяцією графіка прямолінійної ділянки рівняння (3) в точку з нульовим значенням ординати y .

4. Край довгохвильового поглинання плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм

Оригінальні спектри поглинання плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм виміряно методом спектроскопії фототермічного відхилення (photothermal deflection spectroscopy) у діапазоні 0,8–2,5 еВ, а також описано функціями $\log \alpha = f(E)$ [12] і $\log D = f(E)$ [9], де $\log \alpha$ і $\log D$ – десяткові логарифми коефіцієнта поглинання α й оптичної густини D плівок C_{60} ; E – енергія фотонів, що падають на поверхню цих плівок.

У цій роботі після перерахунку з допомогою комп'ютерної програми Origin створено вихідні спектри поглинання $D = f(E)$ (рис. 1, а) і $\alpha = f(E)$ (рис. 1, б) в області енергій фотонів E оригінальних спектрів поглинання: 1,414–1,998 і 1,448–2,371 еВ плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм (криві 1 і 2 відповідно).

Оптична густина D або абсорбція характеризує ступінь поглинання світла плівкою C_{60} і вимірюється у відносних одиницях (в. о.). Пропускання $T = I/I_0$, де I_0 – інтенсивність світла, що падає на плівку C_{60} ; I – інтенсивність світла, що проходить крізь неї. У випадку малого розсіювання оптична густина $D = -\log T$. Верхня межа вимірювання D_b більшості спектрофотометрів перебуває в діапазоні від 3 до 4 в.о., що відповідає величині T_b в межах від 0,1 до 0,01% відповідно.

Значення ординати кінцевої точки $D = 3,2965$ в.о. плівки C_{60} товщиною 5000 нм

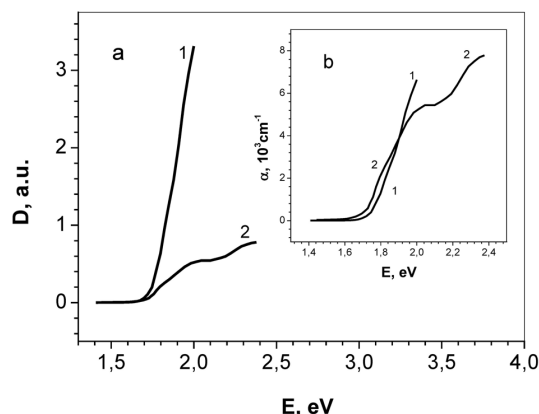


Рис. 1. Вихідні спектри: *a* – оптичної густини D ; *b* – коефіцієнта поглинання α плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм (криві 1 і 2 відповідно). Криві 1 і 2 побудовані на основі оригінальних спектрів [12] і [9] відповідно

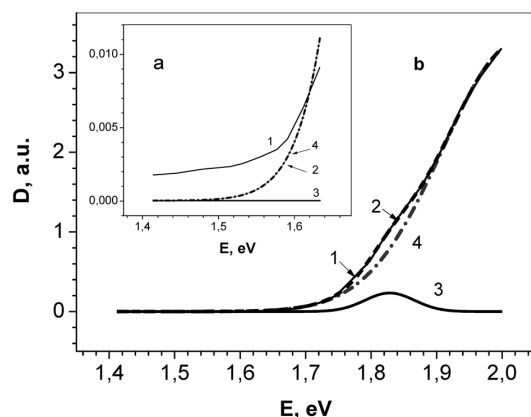


Рис. 2. Апроксимація сумою гаусіанів довгохвильового краю спектра поглинання плівки C_{60} товщиною 5000 нм в області: 1,414–1,633 еВ (*a*); 1,414–2,026 еВ (*b*). Криві 1 і 2 (суцільна й штрихова лінії), 3 і 4 відповідають вихідному спектру й сумарному спектру, гаусіанам 1,829 і 2,026 еВ відповідно

(рис. 1, *a*, крива 1) є верхньою межею D_b , яку можна виміряти оптичними спектрофотометрами без спотворення її величини. Абсциса E кінцевої точки величиною 1,998 еВ близька до енергії 1,999 еВ синглетного $A_g \rightarrow 1T_{1g}$ -переходу плівок C_{60} [3] і [17]. Ордината D_0 початкової точки цього спектра становить $1,777 \cdot 10^{-3}$ в.о. Ординати D_0 і D початкової і кінцевої точок спектра поглинання плівки C_{60} товщиною ~ 1000 нм дорівнюють $3,552 \cdot 10^{-3}$ і $0,777$ в.о. відповідно (рис. 1, *a*, крива 2). Графіки спектрів $\alpha = f(E)$ плівок C_{60} перети-

наються в точці з абсцисою 1,903 еВ і ординатою 3914 cm^{-1} (рис. 1, *b*). Графік цього спектра плівки C_{60} товщиною ~ 1000 нм проходить вище і нижче від графіка для плівки C_{60} товщиною 5000 нм коли $E < 1,903$ еВ і $E > 1,903$ еВ (рис. 1, *b*, криві 1 і 2 відповідно).

5. Енергетична структура довгохвильового краю поглинання плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм

У цій роботі для дослідження енергетичної структури довгохвильового краю вихідних спектрів поглинання плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм (рис. 1, *a*, криві 1 і 2 відповідно) використано метод апроксимації контурів відповідних спектральних ліній сумою функцій Гауса за допомогою програми Origin без віднімання базової лінії. Нижче для зручності отримано контури окремих функцій Гауса та їхньої суми позначено як гаусіан (Gaussian) і сумарний (summary, total або cumulative) відповідно.

Виконано апроксимацію вихідного спектра плівки C_{60} товщиною 5000 нм (рис. 2, *b*, крива 1) з допустимим значенням середньоквадратичного відхилення $1 \cdot 10^{-9}$ (Chi-Square) і коефіцієнтом детермінації $R^2 = 0,9998$. Відносна похибка вимірювання величини абсциси E_m максимумів гаусіанів 1,829 і 2,026 еВ становить 0,14 і 0,16% відповідно. На рис. 2, *b* зображено повний контур гаусіана 1,829 еВ (крива 3) і довгохвильову половину контура гаусіана 2,026 еВ (крива 4). Величина максимуму E_m гаусіана 2,026 еВ більша на 0,027 еВ від енергії 1,999 еВ синглетного $A_g \rightarrow 1T_{1g}$ -переходу плівки C_{60} .

Внески гаусіанів 1,829 і 2,026 еВ у вихідний спектр плівки C_{60} товщиною 5000 нм (рис. 2, криві 3 і 4) оцінено за їхніми площами, які становили 0,022 і 0,4925 в.о. (вся площа і половина площі гаусіанів 1,829 і 2,026 еВ відповідно). Відношення площ цих гаусіанів до сумарної площі складає 4 і 96%, тобто основний внесок дає гаусіан 2,026 еВ.

Для $E_0 = 1,414$ еВ ординати початкових точок D_0 сумарного спектра і гаусіанів 1,829 і 2,026 еВ однакові і становлять $2,807 \cdot 10^{-5}$ в.о. (рис. 2, *a*, криві 2, 3 і 4 відповідно), а для вихідного спектра ордината $D_0 = 1,777 \cdot 10^{-3}$ в.о. (крива 1) приблизно на два порядки більша. Встановлено різке зростання й близькі за величиною значення D вихідного,

сумарного спектрів і гаусіана 2,026 еВ для значень E , що перевищують 1,510 і 1,620 еВ відповідно.

У роботі [9] вперше описано вібронну прогресію з оціночними значеннями максимумів смуг 1,51 (0 → 0-перехід); 1,68; 1,83; 1,93 і 2,00 еВ у спектрах $\log D = f(E)$ плівки C_{60} товщиною ~1000 нм, проте природа цієї прогресії залишилася нез'ясованою. З метою в'яснення її природи довгохвильовий край спектра $\log \alpha = f(E)$ плівки C_{60} товщиною 5000 нм апроксимовано сумою гаусіанів з відніманням базової лінії. Отримано прогресію 1,536 (0 → 0-перехід); 1,640; 1,757; 1,855 і 1,938 еВ і висловлено припущення, що вона зумовлена триплетним екситоном [15–18]. Смуга 2,00 еВ близька до смуги 1,999 еВ $A_g \rightarrow 1T_{1g}$ -переходу плівки C_{60} [3], тобто вона не належить вібронній прогресії. Порівняння показує, що у випадку плівки C_{60} товщиною 5000 нм видно додаткову смугу 1,757 еВ. Водночас вібронні смуги 1,536; 1,640; 1,855 і 1,938 еВ зміщені на 0,026; –0,040; 0,025 і 0,008 еВ відносно відповідних смуг для плівки C_{60} товщиною ~1000 нм відповідно, що зумовлено різними способами визначення положення їх максимумів. Середня енергія коливального кванта вібронної прогресії плівки C_{60} товщиною 5000 нм становить 0,1005 еВ (811 cm^{-1}).

Максимум гаусіана 1,829 еВ практично співпадає з вібронною смугою 1,830 еВ плівки C_{60} товщиною ~1000 нм і батохромно зміщений на 0,026 еВ відносно вібронної смуги 1,855 еВ плівки C_{60} товщиною 5000 нм. Енергії перших довгохвильових електронних переходів C_{60} і C_{70} становлять 1,999 і 1,889 еВ [3]. Таким чином, при переході від C_{60} до C_{70} π -електронна система збільшується, що зумовлює червоний зсув першої довгохвильової смуги на 0,110 еВ. Оскільки гаусіан 1,829 еВ не лежить у межах енергетичного проміжку 1,889–1,999 еВ, він не може бути пов'язаний з поглинанням фулеренів C_{62} , C_{64} [2], π -системи яких є проміжними за розмірами порівняно з C_{60} і C_{70} , а їх довгохвильові смуги повинні належати діапазону енергій фотонів 1,889–1,999 еВ. Отже, можна припустити, що гаусіан 1,829 еВ є вібронною смугою триплетного екситона C_{60} .

У роботі [3] виділяються смуги 2,022 і 2,176 еВ плівки C_{70} і 1,999 еВ плівки C_{60} товщиною 20 нм кожна. У нашій роботі ці смуги представлено одним гаусіаном 2,026 еВ (рис. 2, *b*, крива 4) внаслідок їх сильного перекривання. Можна припу-

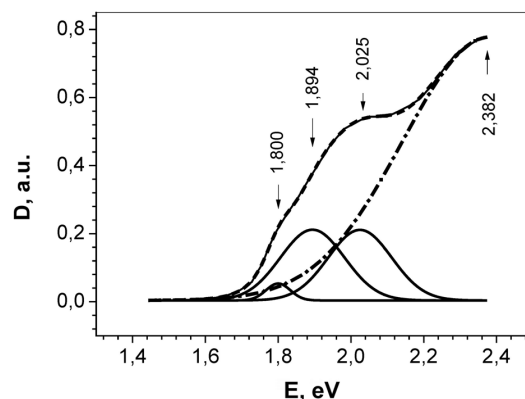


Рис. 3. Апроксимація сумою гаусіанів довгохвильового краю спектра поглинання плівки C_{60} товщиною ~1000 нм: суцільна тонка лінія – вихідний спектр; штрихова лінія – сумарний спектр; суцільні товсті лінії – гаусіани 1,800; 1,894; 2,025, а штрих-пунктирна лінія – гаусіан 2,382 еВ

стити, що гаусіан 2,026 еВ зумовлений спільним поглинанням молекул основної речовини C_{60} і домішки C_{70} .

Вихідний спектр поглинання плівки C_{60} товщиною ~1000 нм (рис. 1, *a*, крива 2) апроксимовано сумою гаусіанів без віднімання базової лінії. Виконано апроксимацію з допустимим значенням середньоквадратичного відхилення $1 \cdot 10^{-9}$ (χ^2 -Square) і коефіцієнтом детермінації $R^2 = 0,9999$. У програмі Origin відображено повні контури гаусіанів 1,800; 1,894 і 2,025 еВ, а також довгохвильову половину контура гаусіана 2,382 еВ з відносними похибками вимірювання їхніх максимумів E_m , що становлять 0,15; 0,22 і 1,86 та 0,27 % відповідно (рис. 3).

Площі гаусіанів 1,800; 1,894; 2,025 і 2,382 еВ відносно площі їхньої суми становлять 1,3; 14,0; 13,9 і 70,8% відповідно, тобто найбільші внески в поглинання вихідного спектра (рис. 3, суцільна тонка лінія) дають гаусіани 1,894; 2,025 і 2,382 еВ.

Абсциси E_m гаусіанів 2,025 і 2,382 еВ більша на 0,026 еВ і менша на 0,087 еВ за енергії 1,999 і 2,469 еВ $A_g \rightarrow 1T_{1g}$ – і $A_g \rightarrow 1T_{1u}$ -переходу C_{60} відповідно. Водночас, абсциса максимуму гаусіана 2,382 еВ приблизно рівна енергії 2,344 еВ $e_2'' \rightarrow e_1''$ -переходу C_{70} [3]. Це означає, що, гаусіани 2,025 і 2,382 еВ зумовлені спільним поглинанням молекул C_{60} і C_{70} . Абсциса максимуму гаусіана 1,894 еВ приблизно дорівнює енергії 1,889 еВ $a_2'' \rightarrow a_1''$ -переходу молекули C_{70} [3], тобто він зумовлений поглинанням молекул C_{70} . Це свідчить

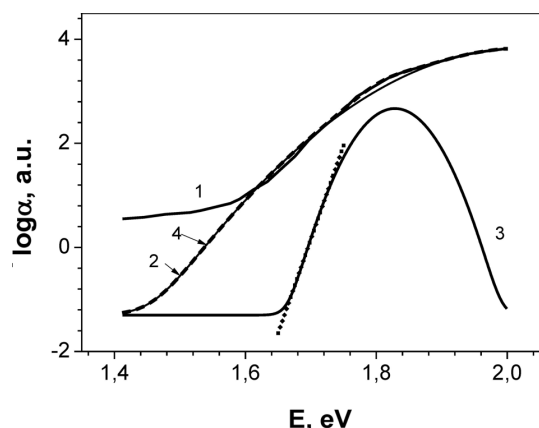


Рис. 4. Довгохвильовий край спектрів $\log \alpha = f(E)$ плівки C_{60} товщиною 5000 нм: 1 – вихідний спектр; 2 – сумарний спектр (штрихова лінія); 3 – гаусіан 1,829 еВ та 4 – довгохвильова половина гаусіана 2,026 еВ. Пунктирна лінія позначає екстрапольовану прямолінійну ділянку кривої 3

Таблиця 1. Значення E_m і площ A під гауссовими лініями плівок C_{60} товщиною 5000 та ~ 1000 нм у різних спектральних областях

d , нм	5000		~ 1000			
E_m , еВ	1,829	2,026	1,800	1,894	2,025	2,382
Відносна похибка, %	0,14	0,22	0,15	2,24	1,86	0,27
Площа A , в.о.	0,022	0,985	0,004	0,046	0,045	0,464
Відносна похибка, %	21,7	3,24	29,3	5,78	6,89	5,86
Спектральна область, еВ	1,414–1,998		1,448–2,371			

про те, що плівка C_{60} товщиною ~ 1000 нм містить більше домішки C_{70} порівняно з плівкою C_{60} товщиною 5000 нм, у спектрі поглинання якої цей гаусіан відсутній.

Максимум гаусіана 1,800 еВ розташований поблизу смуги 1,83 еВ плівки C_{60} товщиною ~ 1000 нм, тобто він може бути другою вібральною смугою триплетного екситона 1,51 еВ ($0 \rightarrow 0$ перехід).

Положення величин E_m і площ A під контурами гаусіанів (рис. 2, b і 3), наведено в табл. 1. Порівняння показує, що величини E_m гаусіанів визначено в програмі Origin з відносною похибкою вимірювання в межах 0,14–2,24%. Максимуми гаусіанів 1,829; 2,026; 1,800 і 2,382 еВ апроксимовано з найбільшою точністю (відносна похибка вимірювання менша за 1% і становить 0,14–0,27%). Відносна

похибка вимірювання максимумів гаусіанів 1,894 і 2,025 еВ більша за 1% і становить 2,24 і 1,86% відповідно. За величиною площ A можна оцінювати величини інтегральних інтенсивностей гаусіанів. Площі гаусіанів 1,829 і 1,800 еВ визначено з відносними похибками 21,7 і 29,3% відповідно. Для інших гаусіанів ця похибка не перевищує 6,89%.

Наведені у табл. 1 дані щодо апроксимації сумою гаусіанів вихідних спектрів плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм показують, що енергетична структура довгохвильового краю цих спектрів формується декількома електронними переходами. Становить науковий інтерес визначення величин E_u і E_g цих переходів за формулами (2) і (4) відповідно.

6. Визначення величин E_u і E_g електронних переходів довгохвильового краю плівки C_{60} товщиною 5000 нм

Спектри $\log \alpha = f(E)$ плівки C_{60} товщиною 5000 нм (рис. 4) отримано за допомогою програми Origin шляхом логарифмування на десятковій основі ординат спектра $\alpha = f(E)$ (рис. 1, b , крива 1).

Контури сумарного спектра й гаусіана 2,026 еВ збігаються в області 1,414–1,998 еВ (рис. 4, криві 2 і 4 відповідно). В області 1,414–1,619 еВ контур вихідного спектра проходить вище контура для сумарного спектра (криві 1 і 2 відповідно). Сумарний спектр (крива 2) проходить вище від вихідного спектра (крива 1) в областях 1,619–1,698 еВ і 1,747–1,864 еВ. Контури цих спектрів збігаються в області 1,864–1,998 еВ. Основний внесок у вихідний спектр дає довгохвильовий край гаусіана 2,026 еВ (крива 4). Внесок гаусіана 1,829 еВ (крива 3) у вихідний спектр проявляється в області 1,640–1,998 еВ. Крутизна довгохвильового краю гаусіана в точці 1,829 еВ більша порівняно з крутизною для гаусіана 2,026 еВ (криві 3 і 4 відповідно).

У нашій роботі довгохвильові половини всіх контурів спектрів на рис. 4 апроксимовано прямими лініями за допомогою програми Origin. Для прикладу, ця лінія наведена на рис. 4 лише для гаусіана 1,829 еВ (пунктирна лінія до кривої 3). Для інших кривих апроксимовані прямі лінії не наведено, щоб не ускладнювати рис. 4. Виділяються дві прямолінійні ділянки для контурів вихідного і сумарного спектрів і гаусіана 2,026 еВ. Кінець

Таблиця 2. Координати E_0 і D_0 початкової точки спектра $D(E)$; енергії фотонів E_1 і E_2 початку й кінця прямолінійної ділянки; коефіцієнт k_u , його похибка $\Delta k_u/k_u$ й енергія Урбаха E_u для всіх спектрів $\log \alpha(E)$ плівки C_{60} товщиною 5000 нм

№	E_0 , еВ	$D_0 \cdot 10^3$ а.о.	E_1 , еВ	E_2 , еВ	k_u , еВ ⁻¹	$\Delta k_u/k_u$, %	E_u , меВ	Контур
1	1,414	1,777	1,633	1,770	11,6394	2,28	37,31	Вихідний
2	1,414	1,777	1,633	1,696	12,4839	4,21	34,79	Вихідний 1
3	1,414	1,777	1,696	1,770	11,3237	2,83	38,34	Вихідний 2
4	1,414	0,028	1,451	1,789	12,7119	0,29	34,16	Сумарний
5	1,414	0,028	1,451	1,625	14,5082	0,09	29,93	Сумарний (1)
6	1,414	0,028	1,625	1,789	10,8108	0,12	40,17	Сумарний (2)
7	1,414	0,025	1,667	1,726	35,7342	0,39	12,15	Гаусіан 1,829 еВ
8	1,414	0,028	1,442	1,737	12,2899	0,39	35,34	Гаусіан 2,026 еВ
9	1,414	0,028	1,442	1,636	14,3588	0,12	30,25	Гаусіан 2,026 еВ (1)
10	1,414	0,028	1,636	1,737	9,1062	0,44	47,69	Гаусіан 2,026 еВ (2)

першої (довгохвильової) ділянки збігається з початком другої (короткохвильової) ділянки). Величину E_u визначено для трьох ділянок: довгохвильової, короткохвильової і об'єднаної. Об'єднана ділянка містить усі точки контура між початком довгохвильової і кінцем короткохвильової області. Отримані дані наведено в таблиці 2. Жирним курсивом виділено дані для об'єднаних областей вихідного і сумарного спектрів і гаусіана 2,026 еВ.

В об'єднаній спектральній області контура вихідного спектра отримана величина k_u становить 11,6394 еВ⁻¹ з відносною похибкою 2,28%, а визначена за формулою (2) величина E_u дорівнює 37,31 меВ з такою ж похибкою (табл. 2, комірки (1, 6), (1, 7) і (1, 8) відповідно, де перша цифра відповідає номеру рядка, а друга – номеру стовпчика). Це значення E_u близьке до значення 37,00 меВ, наведеного в роботі [12]. У довгохвильовій і короткохвильовій областях величина k_u становить 12,4839 і 11,3267 еВ⁻¹ з похибками 4,21 і 2,38% (комірки (2, 6) і (3, 6)), а величина E_u дорівнює 34,79 і 38,34 меВ (комірки (2, 8) і (3, 8) відповідно). Середнє значення E_u для цих областей, що дорівнює 36,57 меВ, є близьким до значення для об'єднаної області 37,31 меВ (комірка (1, 8)). Координати початкової точки вихідного спектра E_0 і D_0 становлять 1,414 еВ і $1,777 \cdot 10^{-3}$ в.о. (комірки (1, 2) і (1, 3) відповідно).

В об'єднаній області для контура сумарного спектра отримано значення $k_u = 12,7119$ еВ⁻¹ з похибкою 0,29%, а E_u становить 34,16 меВ (комірки (4, 6), (4, 7) і (4, 8) відповідно). Порівняно з вихідним спектром величина k_u більша і має значно

меншу похибку, а E_u менша (комірки (1, 6), (1, 7) і (1, 8) відповідно). Величина D_0 сумарного спектра становить $2,8 \cdot 10^{-5}$ в.о. (комірка (4, 3) і приблизно на два порядки менша порівняно з відповідною величиною для вихідного спектра (комірка (1, 3)). У довгохвильовій і короткохвильовій областях контура сумарного спектра коефіцієнти k_u становлять 14,5082 і 10,8108 еВ⁻¹ з похибками 0,09 і 0,12%, а величини E_u дорівнюють 29,93 і 40,17 меВ з такими ж похибками (комірки (5, 6) і (6, 6), (5, 7) і (6, 7), (5, 8) і (6, 8) відповідно). Середнє значення E_u для цих областей, що дорівнює 35,05 меВ, є близьким до значення 34,16 меВ (комірка (4, 8)) для об'єднаної області.

Для гаусіана 1,828 еВ в області 1,667–1,726 еВ величина k_u дорівнює 35,7342 еВ⁻¹ з похибкою 0,39%, а значення E_u становить 12,15 меВ (комірки (7, 6), (7, 7) і (7, 8) відповідно). Ці значення k_u і E_u є значно вищі і нижчі порівняно з відповідними значеннями для вихідного і сумарного спектрів. Величина D_0 становить $2,5 \cdot 10^{-5}$ в.о. (комірка (7, 3)).

Для гаусіана 2,026 еВ в об'єднаній області k_u , і E_u становлять 12,2899 еВ⁻¹ і 35,34 меВ (комірки (8, 6) і (8, 8) відповідно). Вони близькі до значень для сумарного спектра (комірки (4, 6) і (4, 8) відповідно). У довгохвильовій і короткохвильовій областях для гаусіана 2,026 еВ значення k_u , і E_u становлять 14,3588 і 9,1062 еВ⁻¹ з похибками 0,12 і 0,44%; 30,25 і 47,69 меВ (комірки (9, 6) і (10, 6), (9, 7) і (10, 7), (9, 8) і (10, 8) відповідно) і близькі до відповідних значень для сумарних спектрів 1 і 2 (на перетині рядків 5 і 6 та стовпчиків 6, 7 і

Таблиця 3. Значення енергії фотонів E_1 і E_2 на початку й наприкінці прямолінійної ділянки; коефіцієнта k_g і його похибки $\Delta k_g/k_g$; енергії оптичної забороненої зони E_g й енергії Урбаха E_u для всіх спектрів функції Таука $(\alpha^*E)^{0,5} = f(E)$ плівки C_{60} товщиною 5000 нм

№	E_1 , eV	E_2 , eV	k_g , $\text{cm}^{-0,5} \cdot \text{eV}^{0,5}$	$\Delta k_g/k_g$, %	E_g , eV	E_u , меВ	Контур
1	1,722	1,939	374,44274	1,81	1,670	37,31	Вихідний
2	1,746	1,822	425,13565	3,35	1,683	34,79	Вихідний (1)
3	1,822	1,939	347,32178	2,43	1,653	38,34	Вихідний (2)
4	1,730	1,932	377,78141	0,29	1,670	34,16	Сумарний
5	1,745	1,838	427,10408	0,24	1,684	29,93	Сумарний (1)
6	1,838	1,932	427,10408	0,24	1,670	40,17	Сумарний (2)
7	1,742	1,802	307,18546	0,47	1,718	12,15	Гаусіан 1,829 eB
8	1,727	1,952	389,85058	0,29	1,686	35,34	Гаусіан 2,026 eB
9	1,727	1,826	327,96487	0,55	1,669	30,25	Гаусіан 2,026 eB (1)
10	1,826	1,952	396,29183	0,35	1,687	47,69	Гаусіан 2,026 eB (2)

8 відповідно). Середнє значення E_u для цих областей, що дорівнює 38,97 меВ, більше за значення для об'єднаної області (35,34 меВ).

Спектральні залежності функції Таука $(\alpha^*E)^{0,5} = f(E)$ і отримані на їх основі величини E_1 , E_2 , k_g , $\Delta k_g/k_g$, E_g і E_u наведено на рис. 5 і в табл. 3 відповідно. На рис. 5 апроксимовану пряму лінію прямолінійної ділянки наведено (пунктирна лінія) лише для кривої 3. Для інших кривих ці лінії не наведено, щоб не ускладнювати рис. 5. Величину E_g для всіх контурів плівки C_{60} товщиною 5000 нм отримано двома методами: на основі розрахунку за формулою (4) для точок лінійних ділянок і екстраполяцією прямих ліній цих ділянок до нульового значення функції Таука $y = (\alpha^*E)^{0,5}$. В обох випадках отримані значення E_g практично збіглися. Для зручності нижче

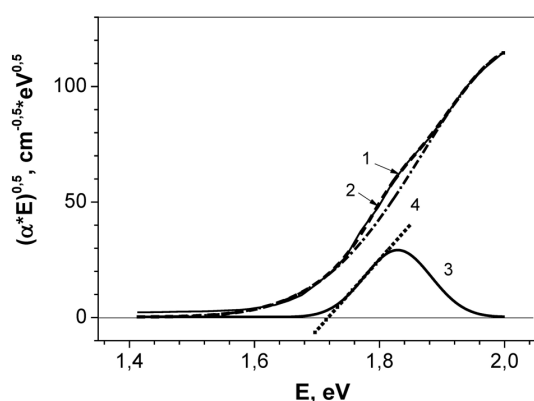


Рис. 5. Спектральні залежності функції Таука $(\alpha^*E)^{0,5} = f(E)$ плівки C_{60} товщиною 5000 нм. Всі позначення такі, як на рис. 4

наведено лише одне із цих значень E_g . Відносна похибка величини E_g дорівнювала відносній похибці коефіцієнта k_g . Значення E_g контурів вихідного й сумарного спектрів і гаусіана 2,026 eB виділено жирним курсивом.

Для контура вихідного спектра в об'єднаній, довгохвильовій і короткохвильовій областях отримано значення E_g : 1,670; 1,683 і 1,653 eB (табл. 3, комірки (1, 6), (2, 6) і (3, 6) відповідно). Значення $E_g = 1,670$ eB близьке до середнього значення E_g величиною 1,668 eB для двох останніх областей.

В об'єднаній, довгохвильовій і короткохвильовій областях контура сумарного спектра значення E_g становлять 1,670; 1,684 і 1,670 eB (табл. 3, комірки (4, 6), (5, 6) і (6, 6) відповідно), тобто збігаються для об'єднаної і короткохвильової області.

Для контура гаусіана 1,829 eB отримане значення E_g становить 1,718 eB (комірка (7, 6)). Це значення є найбільшим порівняно з рештою контурів.

Значення E_g для контура гаусіана 2,026 eB становлять 1,686; 1,669 і 1,687 eB (комірки (8, 6), (9, 6) і (10, 6) відповідно), тобто близькі за величиною для об'єднаної і короткохвильової областей. Усім наведеним у табл. 3 значенням E_g (стовпчик 6) відповідають визначені раніше значення E_u (стовпчик 7), які наведено в табл. 2 (стовпчик 8).

Аналіз наведених у табл. 3 даних для E_g і E_u (стовпчики 6 і 7 відповідно) показав, що для всіх контурів плівки C_{60} товщиною 5000 нм більшому значенню E_u відповідає менше або таке саме значення E_g . Різниця $\Delta E_u/E_u$ між найбільшим і найменшим значенням E_u відносно його найбільшого значення становить 9,26; 25,42 і 36,56%, а відповід-

на відносна різниця $\Delta E_g/E_g$ дорівнює 1,78; 0,83 і 1,07% для контурів вихідного і сумарного спектрів і гаусіана 2,026 еВ відповідно. Отже, розбіжність отриманих у програмі Origin значень E_g для окремих контурів є значно меншою, ніж для E_u .

Величини $D_0 \cdot 10^3$, E_u і E_g вихідного спектра плівки C_{60} товщиною 5000 нм становлять 1,777 в.о., 37,31 меВ і 1,670 еВ (табл. 2 і 3, рядки 1), а сумарного спектра – 0,028 в.о., 34,16 меВ і 1,670 еВ (табл. 2 і 3, рядки 4). Співвідношення величин $D_0 \cdot 10^3$ цих спектрів велике і становить $1,777/0,028 \approx 63,5$. Зі збільшенням величини $D_0 \cdot 10^3$ вихідного спектра цієї плівки від 1,777 до 3,547 в.о. значення E_u і E_g становлять 37,76 меВ і 1,675 еВ. У цьому випадку значення $D_0 \cdot 10^3$, E_u і E_g сумарного спектра становлять 1,800 в.о., 41,12 меВ і 1,669 еВ, а співвідношення величин $D_0 \cdot 10^3$ вихідного і сумарного спектрів значно менше і становить $3,547/1,800 \approx 1,97$. При подальшому збільшенні величини $D_0 \cdot 10^3$ вихідного спектра до 5,327 в.о. E_u і E_g становлять 39,26 меВ і 1,675 еВ. У цьому випадку величини $D_0 \cdot 10^3$, E_u і E_g сумарного спектра становлять 3,578 в.о., 42,48 меВ і 1,670 еВ, а співвідношення величин $D_0 \cdot 10^3$ вихідного і сумарного спектрів ще менше і становить $5,327/3,578 \approx 1,49$. Отже, при збільшенні величини $D_0 \cdot 10^3$ вихідного спектра в межах 1,777 ... 5,327 в.о. значення E_u і E_g змінюються незначно. Водночас, співвідношення величин $D_0 \cdot 10^3$ вихідного і сумарного спектрів зменшується від 63,5 до 1,49.

7. Визначення величин E_u і E_g електронних переходів довгохвильового краю плівки C_{60} товщиною ~ 1000 нм

Вихідний спектр $\log \alpha(E)$ плівки C_{60} товщиною ~ 1000 нм (рис. 6) отримано за допомогою програми Origin шляхом логарифмуванням на десятиковій основі ординат спектра $\alpha = f(E)$ (рис. 1, b, крива 2) і апроксимовано сумою гаусіанів у точках 1,800; 1,894; 2,025 і 2,382 еВ.

Конттури вихідного і сумарного спектрів практично збігаються (рис. 6, криві 1 і 2 відповідно). Отримані результати наведено в табл. 4. Жирним курсивом виділено дані для об'єднаних областей вихідного і сумарного спектрів. Значення E_u , що дорівнює 57,36 меВ для контура вихідного спектра (комірка (1, 8)), менше значення 61 меВ, отриманого в роботі [9]. Значення E_u , рівне 57,36 меВ, у 1,537 раза більше, ніж значення для плівки C_{60}

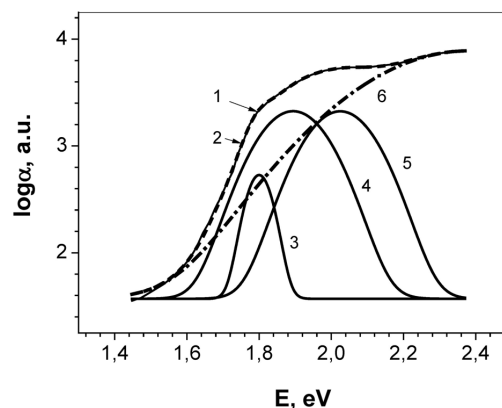


Рис. 6. Довгохвильовий край спектрів $\log \alpha = f(E)$ плівки C_{60} товщиною ~ 1000 нм: 1 – вихідний спектр (суцільна тонка лінія); 2 – сумарний спектр (штрихова лінія); 3, 4 і 5 – гаусіани 1,800; 1,894 і 2,025 еВ; 6 – довгохвильова половина гаусіана 2,382 еВ

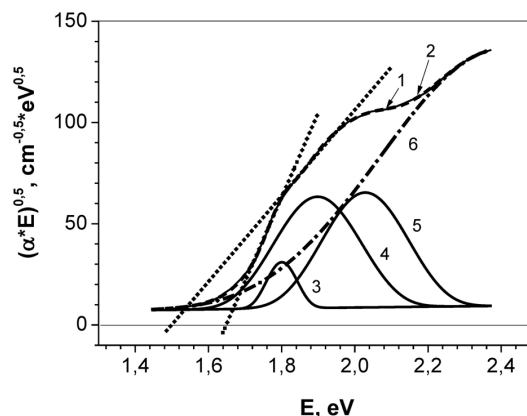


Рис. 7. Спектральні залежності функції Таука $(\alpha * E)^{0,5} = f(E)$ плівки C_{60} товщиною ~ 1000 нм. Позначення такі самі, як на рис. 6. Пунктирними лініями позначено екстрапольовані прямолінійні ділянки кривої 1

товщиною 5000 нм (37,31 еВ), що може свідчити про менший ступінь упорядкованості структури плівок C_{60} товщиною ~ 1000 нм.

Для контура сумарного спектра отримане значення E_u , що дорівнює 52,88 меВ (табл. 4, комірка (4, 8)), є меншим за значення для контура вихідного спектра (57,36 меВ). Найменше і найбільше значення E_u , що дорівнюють 28,04 і 108,44 меВ, отримано для гаусіанів 1,800 і 2,382 еВ відповідно.

Спектральні залежності функції Таука $(\alpha * E)^{0,5} = f(E)$ й отримані на їх основі величини E_1 , E_2 , k_g , $\Delta k_g/k_g$, E_g і E_u наведено на рис. 7 і в табл. 5 відповідно. На рис. 7 апрокси-

Таблиця 4. Координати E_0 і D_0 початкової точки спектрів $D(E)$; енергії фотонів E_1 та E_2 на початку й наприкінці прямолінійної ділянки; коефіцієнт k_u , його похибки $\Delta k_u/k_u$; енергія Урбаха E_u для всіх спектрів $\log \alpha(E)$ плівки C_{60} товщиною ~ 1000 нм

№	E_0 , eV	$D_0 \cdot 10^3$ а.о.	E_1 , eV	E_2 , eV	k_u , eV ⁻¹	$\Delta k_u/k_u$, %	E_u , меВ	Контур
1	1,448	3,550	1,611	1,794	7,5709	2,42	57,36	Вихідний
2	1,448	3,550	1,611	1,728	6,8999	1,56	62,94	Вихідний 1
3	1,448	3,550	1,728	1,794	8,2005	7,59	52,96	Вихідний 2
4	1,448	4,100	1,637	1,790	8,2129	0,37	52,88	Сумарний
5	1,448	4,100	1,637	1,720	7,6512	0,40	56,76	Сумарний 1
6	1,448	4,100	1,720	1,790	8,3946	0,65	51,74	Сумарний 2
7	1,448	3,707	1,708	1,758	15,4911	0,83	28,04	Гаусіан 1,800 eV
8	1,448	3,707	1,644	1,761	8,5436	0,22	50,93	Гаусіан 1,894 eV
9	1,448	3,707	1,776	1,896	8,6383	0,22	50,28	Гаусіан 2,025 eV
10	1,448	4,093	1,636	1,901	4,0051	0,09	108,44	Гаусіан 2,382 eV

Таблиця 5. Значення енергій фотонів E_1 і E_2 на початку й наприкінці прямолінійної ділянки; коефіцієнта k_g , його похибки $\Delta k_g/k_g$; енергії оптичної забороненої зони E_g та енергії Урбаха E_u для всіх спектрів функції Таука $(\alpha^*E)^{0,5} = f(E)$ плівки C_{60} товщиною ~ 1000 нм

№	E_1 , eV	E_2 , eV	k_g , см ^{-0,5} · eV ^{0,5}	$\Delta k_g/k_g$, %	E_g , eV	E_u , меВ	Контур
1	1,661	1,893	285,86578	5,71	1,598	57,36	Вихідний
2	1,725	1,793	438,21003	3,29	1,655	62,94	Вихідний 1
3	1,793	1,944	226,27075	2,07	1,524	52,96	Вихідний 2
4	1,649	1,894	285,44894	1,02	1,596	52,88	Сумарний
5	1,724	1,800	427,03104	0,44	1,652	56,76	Сумарний 1
6	1,800	1,944	287,62332	0,29	1,524	51,74	Сумарний 2
7	1,728	1,781	324,31559	0,81	1,692	28,04	Гаусіан 1,800 eV
8	1,707	1,838	279,13911	0,41	1,634	50,93	Гаусіан 1,894 eV
9	1,843	1,966	296,79682	0,27	1,769	50,28	Гаусіан 2,025 eV
10	1,876	2,234	224,85533	0,23	1,699	108,44	Гаусіан 2,382 eV

мовані прямі лінії двох прямолінійних ділянок (пунктирні лінії) наведено лише для кривої 1. Для інших кривих ці лінії не наведено, щоб не ускладнювати рис. 7. Значення E_g для об'єднаних областей контурів вихідного і сумарного спектрів виділено жирним курсивом. Усім наведеним у табл. 5 значенням E_g (стовпчик 6) відповідають визначені раніше значення E_u (стовпчик 7), які наведено у табл. 4 (стовпчик 8). Найбільше значення E_g , що дорівнює 1,769 eV, отримано для гаусіана 2,025 eV.

Значення $D_0 \cdot 10^3$, E_u і E_g вихідного спектра плівки C_{60} товщиною ~ 1000 нм становлять 3,550 в.о., 57,36 меВ і 1,598 eV (табл. 4 і 5, рядки 1), а сумарного спектра – 4,100 в.о., 52,88 меВ і 1,596 eV (табл. 4 і 5, рядки 4). Співвідношення значень $D_0 \cdot 10^3$ цих спектрів становить $3,550/4,100 \approx$

$\approx 0,87$. Таким чином, значення ординати $D_0 \cdot 10^3 = 3,550$ в.о. початкової точки вихідного спектра є оптимальним для визначення величин E_u і E_g плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм.

Отже, наведені вище дані досліджень свідчать про те, що плівки C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм містять молекули домішки фулерену C_{70} . Молекули C_{70} утворюються в процесі синтезу C_{60} і не видаляються повністю кристалізацією з розчину і колонковою хроматографією. У процесі термічного осадження вихідного порошку C_{60} на тверді підкладки під дією температури вміст C_{70} може зростати. Електронні переходи, зумовлені C_{70} , впливають на енергетичну структуру довгохвильового краю поглинання плівок C_{60} . Детальне вивчення ступеня чистоти цих плівок на сьогодні є актуальним, бо чистота плівок C_{60} значною мірою впли-

ває на ефективність роботи сонячних елементів та інших пристроїв на основі композитів із шарами C_{60} . Це вказує на необхідність продовження таких досліджень.

8. Висновки

Детально досліджено енергетичну структуру довгохвильового краю спектрів поглинання плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм в області 1,414–1,998 еВ і 1,448–2,371 еВ відповідно. Встановлено, що для плівок C_{60} товщиною 5000 нм ця структура формується сумою гаусіанів 1,829 і 2,026 еВ, а для плівок C_{60} товщиною ~ 1000 нм – сумою гаусіанів 1,800; 1,894; 2,025 і 2,382 еВ.

Основний внесок у довгохвильовий край поглинання плівок C_{60} товщиною 5000 нм дає гаусіан 2,026 еВ, а плівок C_{60} товщиною ~ 1000 нм – гаусіани 1,894, 2,025 і 2,382 еВ.

Для плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм гаусіани 1,829 і 1,800 еВ можуть бути вібронними смугами триплетного екситона, а гаусіани 2,026 і 2,025 еВ – зумовлені спільним поглинанням молекул C_{60} і C_{70} відповідно. У плівках C_{60} товщиною ~ 1000 нм гаусіан 1,894 еВ зумовлений поглинанням молекул C_{70} , а гаусіан 2,382 еВ – спільним поглинанням молекул C_{60} і C_{70} .

Значення E_u і E_g вихідних спектрів плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм становить 37,31 і 57,36 меВ, а E_g – 1,670 і 1,598 еВ відповідно. Менше значення E_u свідчить про більшу впорядкованість плівок C_{60} товщиною 5000 нм.

Виділяються дві прямолінійні ділянки на довгохвильовому краю графіків $\log \alpha(E)$ і $(\alpha \cdot E)^{0,5}(E)$ вихідних і сумарних спектрів плівок C_{60} товщиною 5000 і ~ 1000 нм. Середні значення E_u і E_g цих ділянок близькі до значень для вихідних спектрів цих плівок. Найбільше і найменше значення E_u , що дорівнюють 108,40 і 12,15 меВ, отримано для гаусіанів 2,382 і 1,829 еВ плівок C_{60} товщиною ~ 1000 і 5000 нм відповідно.

Робота виконана за кошти бюджету НАН України (проект № 1.4. В/209).

1. H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley. C_{60} : Buckminsterfullerene. *Nature* **318** (6042), 162 (1985).
2. H. Ajie, M.M. Alvarez, S.J. Anz, R.D. Beck, F. Diederich, K. Fostiropoulos, D.R. Krätschmer, M. Rubin, K.E. Schriver, D. Sensharma, R.L. Whetten. Characterization of the

- soluble all-carbon molecules C_{60} and C_{70} . *J. Phys. Chem.* **94**, 8630 (1990).
3. М.П. Горішний. Морфологія поверхні плівок суміші фулеренів C_{60}/C_{70} . Ідентифікація C_{60} та C_{70} у плівках C_{60}/C_{70} за їх спектрами поглинання. *Укр. фіз. журн.* **68** (5), 318 (2023).
4. Y. Yi, V. Coropceanu, J.-L. Bredas. Exciton-dissociation and charge-recombination processes in pentacene/ C_{60} solar cells: Theoretical insight into the impact of interface geometry. *J. Am. Chem. Soc.* **131** (43), 15777 (2009).
5. P. Brown, P.V. Kamat. Quantum dot solar cells. Electrophoretic deposition of CdSe- C_{60} composite films and capture of photogenerated electrons with nC_{60} cluster shell. *J. Am. Chem. Soc.* **130** (28), 8890 (2008).
6. H. Yi, D. Huang, L. Qin, G. Zeng, C. Lai, M. Cheng, S. Ye, B. Song, X. Ren, X. Guo. Selective prepared carbon nanomaterials for advanced photocatalytic application in environmental pollutant treatment and hydrogen production. *Appl. Catal. B* **239**, 408 (2018).
7. P. Mroz, G.P. Tegos, H. Gali, T. Wharton, T. Sarna, M.R. Hamblin. Photodynamic therapy with fullerenes. *Photoch. Photobid. Sci.* **6** (11), 1139 (2007).
8. S. Afreen, K. Muthoosamy, S. Manickam, U. Hashim. Functionalized fullerene (C_{60}) as a potential nanomediator in the fabrication of highly sensitive biosensors. *Biosens. Bioelectron.* **63**, 354 (2015).
9. A. Scumanich. Optical absorption spectra of carbon 60 thin films from 0.4 to 6.2 eV. *Chem. Phys. Lett.* **182** (5), 486 (1991).
10. A. Scumanich. Optical Spectra of Fullerenes: C_{60} a new amorphous semiconductor? *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **270**, 299 (1992). Material Research Society.
11. V.K. Dolganov, O.V. Zharikov, I.N. Kremenskaja, K.P. Meletov, Yu.A. Ossipyan. High pressure study of the absorption edge of crystalline C_{60}/C_{70} mixture. *Solid State Commun.* **83** (1), 63 (1992).
12. T. Gotoh, S. Nonomura, H. Watanabe, S. Nitta, D. Han. Temperature dependence of the optical-absorption edge in C_{60} thin films. *Phys. Rev. B* **58** (15), 10060 (1998).
13. E.Yu. Kolyadina, L.A. Matveeva, P.L. Neluba, E.F. Venger. Analysis of the fundamental absorption edge of the films obtained from the C_{60} fullerene molecular beam in vacuum and effect of internal mechanical stresses on it. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics* **18** (3), 349 (2015).
14. М.П. Горішний. Determination of the Urbach energy E_u and the optical band gap E_g of submicron C_{60} and C_{70} fullerene films. *Fizyka Nyzykh Temperatur/Low Temperature Physics* **51** (2), 192 (2025).
15. М.П. Горішний. Determination of the Urbach energy E_u and the optical band gap E_g of submicron C_{60} and C_{70} fullerene films. *Low Temp. Phys.* **51**, 174 (2025).
16. М.П. Горішний. Визначення енергії Урбаха E_u і оптичної ширини забороненої зони E_g субмікронних плівок фулеренів C_{60} і C_{70} . Залежності E_u і E_g цих плівок від їх товщини в діапазоні 20–5000 нм. *Укр. фіз. журн.* **70** (5), 305 (2025).

17. S. Pfuetzner, J. Meiss, A. Petrich, M. Riede, K. Leo. Improved bulk heterojunction organic solar cells employing C₇₀ fullerenes. *Appl. Phys. Lett.* **94** (22), 223307 (2009).
18. J. Klein, L. Kampermann, B. Mockenhaupt, M. Behrens, J. Strunk, G. Bacher. Limitations of the Tauc Plot Method. *Adv. Funct. Mater.* **33**, 2304523 (2023).
19. J. Tauc, R. Grigorovici, A. Vancu. Optical properties and electronic structure of amorphous Germanium. *Phys. Stat. Sol.* **15**, 627 (1966).

Одержано 25.12.25

M.P. Gorishnyi

ENERGY STRUCTURE OF THE LONG-WAVELENGTH ABSORPTION SPECTRA EDGE AND ITS RELATIONSHIP TO THE URBACH ENERGY E_u AND THE OPTICAL BAND GAP E_g OF C₆₀ FILMS WITH THICKNESSES OF 5000 AND ~1000 nm

The long-wavelength edge of the absorption spectra of C₆₀ films with a thickness of 5000 and ~1000 nm in the regions

of 1.414–1.998 eV and 1.448–2.371 eV, respectively, was approximated by the sum of Gaussian functions (Gaussians). In C₆₀ films with thickness of 5000 nm, this edge is formed by the sum of Gaussians centered at 1.829 and 2.026 eV, whereas in C₆₀ films with thickness of ~1000 nm, it is formed by the sum of Gaussians centered at 1.800, 1.894, 2.025 and 2.382 eV. The main contribution to the absorption of C₆₀ films with a thickness of 5000 nm is provided by the Gaussian centered at 2.026 eV, whereas in C₆₀ films with a thickness of ~1000 nm – by Gaussians centered at 1.894, 2.025, and 2.382 eV. The E_u values vary within the ranges of 12.15–47.69 meV and 28.04–108.44 meV, and E_g – within the ranges of 1.653–1.718 eV and 1.524–1.769 eV in C₆₀ films with a thickness of 5000 and ~1000 nm, respectively.

Keywords: film, absorption spectrum, C₆₀ and C₇₀ fullerenes, approximation, Gaussian function, Gaussian.