

02;05;07;11;12

Спектроскопические состояния отрицательных ионов PTCDA и их связь с максимумами плотности вакантных состояний зоны проводимости

© С.А. Пшеничнюк,¹ А.В. Кухто,² И.Н. Кухто,² А.С. Комолов³

¹ Институт физики молекул и кристаллов, Уфимский научный центр РАН, 450075 Уфа, Россия
e-mail: sapsh@anrb.ru

² Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Белоруссии, 220072 Минск, Белоруссия

³ Санкт-Петербургский государственный университет, 198504 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 21 июля 2010 г.)

Методом спектроскопии электронного захвата показано, что рассеяние медленных (0–15 eV) электронов молекулами диангидрида перилентетракарбоновой кислоты (PTCDA) в газовой фазе приводит к образованию по резонансным механизмам молекулярных и фрагментарных отрицательных ионов, регистрируемых в масс-спектрометрическом эксперименте. Токи анионов, в зависимости от энергии электронов, имеют выраженные максимумы при 0.14, 1.9, 3.0, 4.8 и 5.7 eV. Кроме того, резонансные состояния обнаружены при тепловой энергии (0 eV) рассеивающихся электронов, а также около 0.4 и 1 eV, в виде перегибов на экспериментальных кривых. Спектроскопические состояния анионов PTCDA при энергиях > 0 eV интерпретированы в терминах образования резонансов формы на основе расчетных значений энергий вакантных молекулярных орбиталей π^* -типа. Обнаружено, что положения вакантных орбиталей изолированной молекулы PTCDA соотносятся с максимумами плотности состояний зоны проводимости пленок PTCDA при условии сдвига энергий орбиталей на 1.4 eV. Последнее значение может интерпретироваться как энергия связи молекулы в пленке за счет поляризационного взаимодействия с окружением.

Введение

Одним из перспективных в области органической электроники объектов является молекула диангидрида перилентетракарбоновой кислоты (3,4,9,10-perylene-tetracarboxylic dianhydride, PTCDA) благодаря своим многообещающим оптическим и электронным свойствам [1], а также способности формировать тонкие слои кристаллической структуры на различных поверхностях [2]. Характеристики пленок PTCDA, имеющих очевидные перспективы практического применения, например в фотогальванических преобразователях энергии и светоизлучающих устройствах [3], во многом определяются электронными свойствами молекулы PTCDA, тем более что вызывающие интерес поверхностные структуры представляют собой несколько монослоев, пленку островковой структуры, а часто и отдельные адсорбированные молекулы [2,4]. В свете этого одним из возможных подходов к интерпретации поведения этого соединения в кристаллическом состоянии можно считать выявление электронной структуры обособленной молекулы PTCDA.

Электронная структура тонких пленок PTCDA на различных поверхностях интенсивно исследуется в течение нескольких десятилетий [1]. В работах [5–7] на основе результатов, полученных методом спектроскопии полного тока (Total Current Spectroscopy) [8,9], обсуждается возможная связь наблюдаемых спектральных особенностей с типом и энергиями молекулярных ор-

биталей, что позволяет также сделать вывод о сохранении электронной структуры отдельных молекул при их объединении в пленку. Исследования проводятся *in situ* путем записи спектров при разной толщине пленок и материалах подложек. В частности, в [7] показано, что в случае пленки PTCDA, выращенной на поверхности кристалла ZnO (0001), существуют узкие максимумы плотности незаполненных электронных состояний в зоне проводимости при энергии 2.5 и 4.3 eV выше уровня вакуума, ассоциируемые с вакантными орбиталями молекулы PTCDA π^* -типа. Группа широких максимумов, расположенных при энергиях 5.8, 8.1, 10.6 и 14.4 eV, соотносится с вакантными σ^* -орбиталями [7].

В данной работе методом спектроскопии электронного захвата (Electron Attachment Spectroscopy) [10,11] исследован процесс образования отрицательных ионов молекулы PTCDA в газовой фазе путем резонансного захвата медленных (с энергией до 15 eV) электронов на вакантные молекулярные орбитали. Представленные экспериментальные результаты, совместно с *ab initio* квантово-химическими расчетами, позволяют судить об электронной структуре отдельной, не связанной с окружением, молекулы PTCDA, основываясь на сложившихся представлениях [12–14] о процессе резонансного рассеяния электронов. Отметим также, что положения и ширины состояний анионов, наблюдаемые в газовой фазе, преобразуются вполне определенным образом при адсорбции на поверхности [15].

Эксперимент

Подробное описание экспериментального метода приведено в монографии [11], схематическое изображение спектрометра можно найти в работе [16]. Пучок электронов определенной энергии пропускается через пары исследуемого вещества в вакууме. Образующиеся по резонансным механизмам [12–14] отрицательные ионы анализируются с использованием масс-спектрометрической техники, т.е. время регистрации анионов находится в микросекундном диапазоне. В частности, время пролета аниона $[\text{PTCDA}]^-$ ($m/e = 392$) от момента его образования при захвате электрона до регистрации в данном эксперименте оценивается величиной $47 \mu\text{s}$. Ток отрицательных ионов, прошедших масс-спектрометр, регистрируется в зависимости от энергии электронов, меняющейся в диапазоне от нуля (тепловая энергия) до 15 eV .

Полуширина распределения электронов по энергии в падающем пучке оценивается величиной 0.4 eV , ток пучка $1 \mu\text{A}$. Точность определения положений резонансных пиков на экспериментальных кривых равна $\pm 0.1 \text{ eV}$. Калибровка шкалы энергии электронов производится по максимуму тока анионов $[\text{SF}_6]^-$, образующихся захватом электронов тепловой энергии молекулами SF_6 [11,14]. Напуск в ячейку столкновений гексафторида серы осуществляется одновременно с исследуемым веществом. Молекулы РТСДА испарялись в вакуум при температуре 200°C . При этом достигалась удовлетворительная интенсивность тока молекулярных отрицательных ионов $[\text{PTCDA}]^-$, являющихся наиболее интенсивными в масс-спектре этого соединения, и соблюдались условия однократных взаимодействий. Температура ячейки столкновений устанавливалась на 10°C выше температуры испарения для предотвращения конденсации паров РТСДА. В работе исследовался стандартный образец, приобретенный в компании Sigma-Aldrich (продукт № 77350). Спектр оптического поглощения получен на спектрофлуориметре Cary 500 Scan UV-VIS-NIR с использованием диметилформамида в качестве растворителя.

Пленки РТСДА толщиной 10 nm наносились *in situ* при скорости 0.1 nm/min из ячейки Кнудсена на поверхности поликристаллического Au и $(\text{SiO}_2) n\text{-Si}$, как это обсуждается более подробно в работах [7,9]. Экспериментальное определение плотности незаполненных состояний в пленках проводили при базовом давлении 10^{-7} Pa методом спектроскопии полного тока [7,9]. При этом изменения значений коэффициента рассеяния падающих электронов на поверхности образца связаны с плотностью незаполненных электронных состояний исследуемой поверхности.

Квантово-химические расчеты проводились методом теории функционала плотности с помощью программного пакета Gaussian [17]. Оптимизация геометрии молекулы РТСДА и ее аниона, а также расчет энергий орбиталей выполнялись с использованием функ-

ционала B3LYP [18] и стандартного базисного набора 6-31G(d). Энергии низколежащих возбужденных состояний рассчитывались методом TD-B3LYP [19] в том же базисном наборе.

Результаты

1. Резонансные состояния анионов

На рис. 1 приведены зависимости токов отрицательных ионов, обнаруженных в масс-спектре РТСДА, от энергии электронов в падающем пучке (структура молекулы РТСДА также показана на рисунке). Нормированный по величине ток анионов $[\text{SF}_6]^-$, представляющий одно резонансное состояние при тепловой энергии, изображен для сравнения штриховой линией. С достаточной интенсивностью наблюдались отрицательный молекулярный ион $[\text{PTCDA}]^-$ ($m/e = 392$) и фрагментарные анионы с массовыми числами $m/e = 348$, 336 и 320 . Наиболее вероятная структура последних соответствует отрыву от молекулярного аниона карбонильных групп и диоксида углерода, а именно образованию фрагментов $[\text{PTCDA}-\text{CO}_2]^-$, $[\text{PTCDA}-2(\text{CO})]^-$ и $[\text{PTCDA}-\text{CO}-\text{CO}_2]^-$ соответственно.

Приведенные результаты позволяют заключить, что отрицательный ион молекулы РТСДА наблюдается как минимум в пяти резонансных состояниях при энерги-

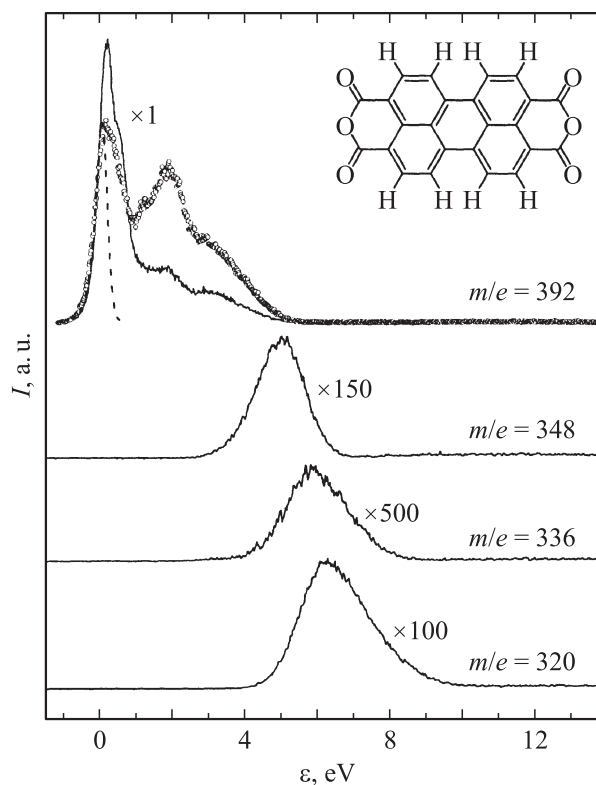


Рис. 1. Зависимость токов отрицательных ионов, образующихся при захвате электронов молекулами РТСДА, от энергии рассеивающихся электронов.

ях 0, 0.14, 0.4, 1.9 и 3.0 eV. Ток анионов [PTCDA]⁻, записанный при более низкой температуре (180°C) изображен на рис. 1 кружками. Не останавливаясь здесь на причинах резкой температурной зависимости относительных интенсивностей резонансов, наблюдаемых на токе молекулярных анионов, о чем достаточно сказано, например в [14], укажем лишь, что в данном случае кривая, записанная при более низкой температуре, выявляет еще одно резонансное состояние при энергии около 1 eV. Еще два резонансных состояния, проявляющиеся на токе фрагментарных анионов, расположены при энергиях 4.8 и 5.7 eV (см. рис. 1), причем правый фронт максимума (~ 6 eV) на кривой, соответствующей $m/e = 320$, тянется до 9 eV и, очевидно, содержит как минимум два широких перекрывающихся пика.

Наблюдение ионов [PTCDA]⁻ при тепловой энергии электронов (0 eV) свидетельствует о наличии в молекуле вакантных орбиталей, лежащих в связанной области, захват избыточного электрона на которые, по механизму колебательно-возбужденного резонанса Фешбаха (Vibrational Feshbach Resonance) [13], приводит к образованию молекулярного аниона, живущего десятки микросекунд с момента захвата электрона. Для интерпретации резонансных пиков, наблюдаемых при энергии электронов > 0 eV, строго говоря, необходимы значения энергии образования короткоживущих состояний анионов, ассоциируемых с захватом избыточного электрона на вакантные орбитали, лежащие в несвязанной области, по механизму резонанса формы (Shape Resonance) [13]. Энергии образования таких резонансов непосредственно определяются методом спектроскопии проходящих электронов (Electron Transmission Spectroscopy) [20] и однозначно соотносятся с энергиями вакантных молекулярных орбиталей [21,22]. Однако в случае PTCDA запись спектра проходящих электронов осуществить не удалось, поскольку необходимое давление паров в ячейке столкновений требует высоких температур испарения, при которых не исключена возможность термического разложения вещества.

2. Расчет энергий вакантных молекулярных орбиталей

Несмотря на сложности, возникающие при квантово-химических расчетах отрицательных ионов [23,24], во многих случаях существует линейная корреляция [25] между расчетными энергиями вакантных молекулярных орбиталей и экспериментальными значениями энергий резонансов формы, что позволяет воспроизвести спектр проходящих электронов с точностью, близкой к экспериментальной [22,26]. В данной работе для масштабирования рассчитанных энергий орбиталей π^* -типа молекулы PTCDA использованы параметры, установленные в [27] для близких по структуре объектов и расчетов аналогичным методом. В PTCDA ожидается четырнадцать, по числу двойных связей, вакантных молекулярных орбиталей π^* -типа. Рассчитанные для них

Расчетные энергии вакантных орбиталей π^* -типа молекулы PTCDA, их масштабированные значения и наблюдаемые максимумы токов анионов

Орбиталь	B3LYP/6-31G(d)		Максимум тока анионов, eV
	энергия орбитали, eV	энергия резонанса, eV	
π_{14}^*	5.941	5.71	5.7
π_{13}^*	4.725	4.73	4.8
π_{12}^*	2.664	3.07	3.0
π_{11}^*	2.597	3.01	3.0
π_{10}^*	1.713	2.30	1.9
π_9^*	0.896	1.64	1.9
π_8^*	0.276	1.14	~ 1
π_7^*	-0.680	0.37	~ 0.4
π_6^*	-1.033	0.09	0.14
π_5^*	-1.229	-0.07	0
π_4^*	-1.737	-0.48	0
π_3^*	-2.279	-0.92	0
π_2^*	-2.297	-0.93	0
π_1^*	-3.911	-2.23	0

значения энергии приведены в таблице, где указаны масштабированные значения, предсказывающие энергию резонансов формы, и соответствующие максимумы наблюдаемых токов анионов. Отметим, что в этой шкале нулевая энергия соответствует основному электронному состоянию нейтральной молекулы PTCDA.

Согласно расчету, первые пять вакантных молекулярных орбиталей π^* -типа молекулы PTCDA расположены в связанной области (см. таблицу). Эти орбитали ($\pi_1^* - \pi_5^*$) участвуют в образовании отрицательных ионов по механизму колебательно-возбужденного резонанса Фешбаха, с максимумом выхода при тепловой энергии электронов. Наиболее интенсивный пик, наблюдаемый при 0.14 eV, хорошо соответствует первому резонансу формы (захват электрона на орбиталь π_6^*), ожидаемому, в соответствии с расчетом, при энергии 0.09 eV. Выраженный максимум тока молекулярного аниона при энергии 3 eV (см. рис. 1) можно интерпретировать как резонанс формы с захватом электрона на две близкорасположенные, при 3.01 и 3.07 eV, орбитали π_{11}^* и π_{12}^* . Резонансы формы с участием вакантных орбиталей π_9^* (1.64 eV) и π_{10}^* (2.30 eV), по-видимому, не разрешаются в спектре и наблюдаются в виде одного широкого максимума при энергии 1.9 eV. В этой области энергий возможно образование резонансов другого типа, что также затрудняет наблюдение резонансов формы с захватом электрона на орбитали π_9^* и π_{10}^* в виде отдельных пиков. Максимумы выхода фрагментарных анионов при энергии 4.8 и 5.7 eV согласуются с положениями орбиталей π_{13}^* (4.73 eV) и π_{14}^* (5.71 eV).

Отметим также, что некоторую роль в формировании спектра могут играть низколежащие орбитали молекулы PTCDA σ^* -типа, правила линейного преобразования

которых не столь очевидны [22], как для π^* -орбиталей. Однако соответствующие резонансы формы являются более короткоживущими и менее выражены в эксперименте, нежели резонансы с захватом на орбитали π^* -типа. Кроме того, в соответствии с расчетом, первые девять вакантных орбиталей PTCDA — π^* -типа, т.е. вклад σ^* -орбиталей в образование анионов возможен при достаточно высоких энергиях, где резонансы формы с захватом избыточного электрона на орбитали этого типа являются широкими и слабо проявляются в эксперименте [13].

3. Влияние электронно-возбужденных резонансов

В молекуле PTCDA возможны низколежащие возбужденные состояния, которые могут служить материнскими для образования анионов по механизму электронно-возбужденного резонанса (Core-Excited Resonance) [13]. Согласно расчету методом TD-B3LYP, значения энергии возбужденных состояний нейтральной молекулы PTCDA, соответствующие синглетным переходам $\pi \rightarrow \pi^*$, равны 2.472 и 3.394 eV. Энергии триплетных переходов $\pi \rightarrow \pi^*$ и $\sigma \rightarrow \pi^*$ равны 2.987 и 3.147 eV соответственно. Наименьшее вычисленное значение энергии перехода (2.472 eV) подтверждается спектром оптического поглощения PTCDA в растворе, приведенном на рис. 2. Первый максимум длинноволновой полосы расположен при энергии 2.4 eV в хорошем согласии с ранее полученным [28] значением 2.39 eV для энергии 0–0-перехода, ассоциируемого с образованием возбуждения, локализованного на одной молекуле (экситон Френкеля). Аналогичное возбужденное состояние проявляется в спектроскопии потерь энергии электронов в тонких пленках PTCDA при энергии 2.6 eV [29].

Таким образом, в молекуле PTCDA образование электронно-возбужденных резонансов в газовой фазе

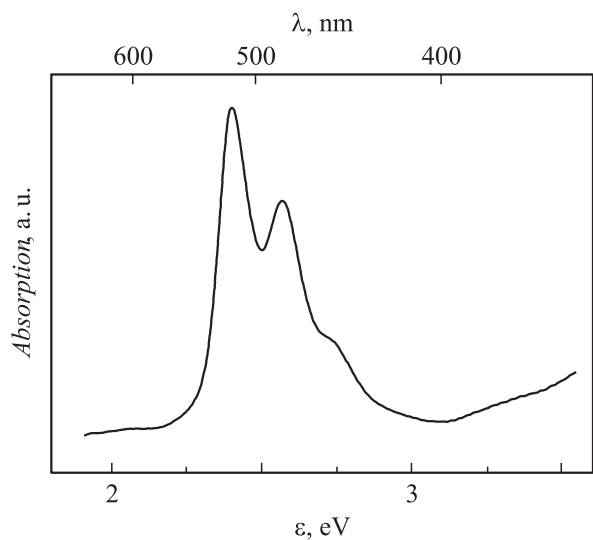


Рис. 2. Спектр оптического поглощения PTCDA в растворе.

ожидается начиная с энергий рассеивающего электрона около 2 eV, поскольку возбужденное материнское состояние нейтральной молекулы, как правило, обладает положительным сродством к электрону около 0.5–1 eV [13,14]. Заметим, однако, что максимумы токов анионов, наблюдаемые в настоящем эксперименте при энергии > 0 eV, достаточно хорошо описываются одними только резонансами формы с участием вакантных орбиталей π^* -типа, которые обычно образуются с более высокими сечениями, чем электронно-возбужденные.

Обсуждение

Рассмотрим предполагаемую структуру зоны проводимости пленки PTCDA, как схематически показано на рис. 3. Начало отсчета энергии здесь соответствует уровню вакуума, электронное сродство оценивается величиной 4.1 eV [30,31]. Ниже уровня вакуума в пленке существуют два максимума плотности состояний, обозначенные на рис. 3 как π_a^* и π_b^* , на расстояниях 0.5 и 1.5 eV [32] от дна зоны проводимости, причем первый из них ассоциируется с нижней вакантной орбиталью молекулы PTCDA. Кроме того, над уровнем вакуума обнаружен [32] максимум плотности состояний (π_d^* на рис. 3), расположенный на 6 eV выше дна зоны проводимости. Переходами из валентной зоны в состояния π_a^* и π_d^* объясняются спектры характеристических потерь энергии электронов, полученные в процессе формирования пленок PTCDA на поверхности ZnO (0001) [33]. В спектрах полного тока пленок, выращенных на аналогичных подложках, выявляются состояния зоны проводимости пленки PTCDA, расположенные выше уровня вакуума, на расстоянии от него 2.5, 4.3 и 5.8 eV [7], обозначенные на рис. 3 как π_e^* , π_f^* и σ_a^* . Полуширина последнего состояния свидетельствует о том [7], что оно отвечает вакантной орбитали σ^* -типа. Экспериментальная зависимость плотности вакантных состояний в зоне проводимости пленки PTCDA от энергии (рис. 3), полученная с использованием метода спектроскопии полного тока [7,9], выявляет еще один максимум (π_c^* на рис. 3) при энергии около 0.8 eV выше уровня вакуума.

Согласно расчетам (см. таблицу), нижняя вакантная молекулярная орбиталь PTCDA расположена при энергии -2.23 eV. Для совмещения ее положения с максимумом плотности состояний π_a^* необходимо сдвинуть расчетные положения орбиталей к низким энергиям на 1.4 eV. Максимумы образования отрицательных ионов, нормированные по величине токи анионов, выявляющие резонансные состояния, и расчетные положения вакантных орбиталей, с учетом сдвига на 1.4 eV, изображены на рис. 3. Сдвиг всех значений энергии на одинаковую величину предполагает сохранение электронной структуры отдельной молекулы PTCDA в пленке и находится в согласии с работами [6,7], где утверждается, что твердотельный спектр PTCDA мало отличается от молекулярного, а тонкая структура спектра полного

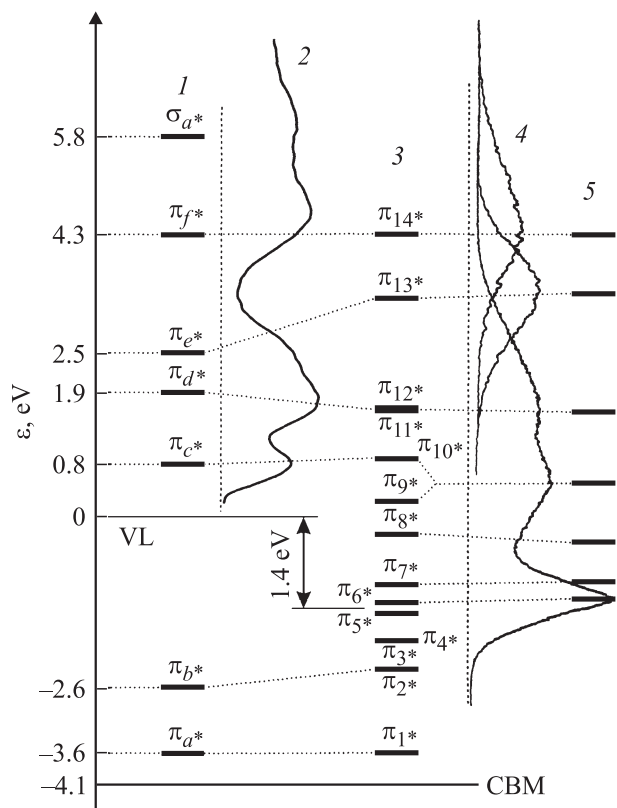


Рис. 3. Структура зоны проводимости пленки PTCDA в сравнении с энергиями вакантных молекулярных орбиталей π^* -типа молекулы PTCDA. VL (vacuum level) — уровень вакуума, CBM (conduction band minimum) — дно зоны проводимости, 1 — максимумы плотности состояний, 2 — плотность состояний, 3 — энергии вакантных орбиталей, 4 — токи анионов, 5 — максимумы токов анионов.

тока определяется вакантными орбиталями отдельной молекулы. Величина сдвига, т.е. энергия стабилизации орбиталей, может быть интерпретирована как энергия связи молекулы PTCDA в пленке за счет сил поляризованного взаимодействия с окружением. Полученное значение (1.4 eV) видится адекватным в свете результатов работы [34].

Принимая корректность процедуры сдвига орбиталей, заметим, что максимумы плотности состояний π_b^* и π_d^* хорошо соотносятся с положениями соответственно близкорасположенных орбиталей π_2^* , π_3^* и π_{11}^* , π_{12}^* (см. рис. 3), причем π_d^* расположена выше на 0.2 eV, а π_b^* — ниже на 0.3 eV соответствующих пар вакантных орбиталей. В пределах ошибок расчета и эксперимента можно считать, что именно этими близкорасположенными орбиталями описываются максимумы плотности состояний π_b^* и π_d^* . Орбитали π_{10}^* и π_{14}^* хорошо соответствуют максимумам плотности состояний π_c^* и π_f^* соответственно. В согласии с предположениями, высказанными в работе [7], максимумы плотности состояний в зоне проводимости при более высоких энергиях описываются орбиталями σ^* -типа,

что полностью соответствует приведенной на рис. 3 картине и может служить доказательством адекватности расчета, масштабирования и сдвига на 1.4 eV положения вакантных орбиталей π^* -типа. Вероятно, что множество близкорасположенных вакантных орбиталей между π_3^* и π_9^* не формирует выраженных максимумов плотности состояний в зоне проводимости.

Отметим также не совсем ясную на данный момент роль вакантной орбитали π_{13}^* в образовании конденсированного состояния PTCDA. Предсказанная расчетом энергия (4.73 eV) этой орбитали достаточно хорошо согласуется с максимумом образования (4.8 eV) фрагментарных анионов $[\text{PTCDA}-\text{CO}_2]^-$. Однако соответствующий максимум плотности состояний (π_e^* на рис. 3) расположен почти на 0.9 eV ниже, тогда как рассчитанные значения энергии остальных π^* -орбиталей отличаются от положений максимумов плотности состояний не более чем на 0.3 eV, с учетом сдвига на 1.4 eV. Дополнительная стабилизация энергии вакантной орбитали π_{13}^* может свидетельствовать о ее участии в образовании связей молекул PTCDA в пленке.

Заключение

На основе исследования резонансного рассеяния электронов молекулами PTCDA в газовой фазе методом спектроскопии электронного захвата можно сделать следующие выводы.

1. Молекулы PTCDA эффективно захватывают электроны в области энергий от тепловых до 8 eV. Множество низколежащих вакантных орбиталей π^* -типа и высокое сродство к электрону (оценка вертикального сродства дает величину 2.23 eV) позволяют наблюдать молекулярные анионы $[\text{PTCDA}]^-$ до 4 eV. При более высокой энергии возможна фрагментация PTCDA по механизмам диссоциативного захвата, однако относительная интенсивность образования фрагментов не превышает десятых долей процента.

2. Максимумы образования отрицательных ионов при энергии электронов > 0 eV согласуются с расчетными энергиями образования резонансов формы. Пик при тепловой энергии электронов ассоциируется с захватом на орбитали, лежащие в связанной области, по механизму колебательно-возбужденного резонанса Фешбаха. Вклад электронно-возбужденных резонансов, ожидаемый начиная с энергий около 2 eV, трудно оценить, поскольку в этой области существуют также резонансы формы, сечения образования которых, как правило, намного (порядок величины) выше.

3. Предсказанные положения вакантных орбиталей π^* -типа изолированной молекулы PTCDA согласуются с положениями максимумов плотности состояний зоны проводимости, что свидетельствует о сохранении электронной структуры молекулы при адсорбции на поверхности. Необходимость сдвига всех орбиталей как целого к низким значениям энергии на 1.4 eV можно

интерпретировать в терминах энергии связи молекулы РТСДА в пленке.

В заключение отметим, что представленный экспериментальный метод — спектроскопия электронного захвата — может быть использован для выявления особенностей зоны проводимости молекулярных органических кристаллов начиная с энергии ниже уровня вакуума на величину энергии связи молекулы в пленке при условии, что анализируемое вещество испаряется в вакуум в неповрежденном виде.

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 08-03-00270).

Список литературы

- [1] *Forrest S.R.* // Chem. Rev. 1997. Vol. 97. P. 1793–1896.
- [2] *Tautz F.S.* // Progr. in Surface Sci. 2007. Vol. 82. P. 479–520.
- [3] *Günes S., Neugebauer H., Sarıçığıcı N.S.* // Chem. Rev. 2007. Vol. 107. P. 1324–1338.
- [4] *Wang Q.H., Hersam M.C.* // Nature Chemistry. 2009. Vol. 1. P. 206–211.
- [5] *Komolov A.S., Lazneva E.F., Akhremtchik S.N.* // Appl. Surf. Sci. 2010. Vol. 256. P. 2419–2422.
- [6] *Morozov A.O., Kampen T.U., Zahn D.R.T.* // Surf. Sci. 2000. Vol. 446. P. 193–197.
- [7] *Komolov A.S., Møller P.J., Aliaev Y.G., Akhremtchik S., Schaumburg K.* // J. Molec. Struc. 2005. Vol. 744–747. P. 145–149.
- [8] *Komolov A.S., Møller P.J., Mortensen J.* et al. // Appl. Surf. Sci. 2007. Vol. 253. P. 7376–7380.
- [9] *Komolov A.S., Møller P.J., Lazneva E.F.* // J. Electron Spec. Rel. Phenom. 2003. Vol. 131–132. P. 67–75.
- [10] *Allan M.* // J. Electron Spec. Rel. Phenom. 1989. Vol. 48. P. 219–351.
- [11] *Хвостенко В.И.* Масс-спектрометрия отрицательных ионов в органической химии. М.: Наука, 1981.
- [12] *Илленбергер Е., Смирнов Б.М.* // УФН. 1998. Т. 168. Вып. 7. С. 731–766.
- [13] *Schultz G.J.* // Rev. Mod. Phys. 1973. Vol. 45/3. P. 423–486.
- [14] *Christophorou L.G.* Electron-Molecule Interactions and their Applications. Orlando: Academic Press, 1984.
- [15] *Palmer R.E., Rous P.J.* // Rev. Mod. Phys. 1992. Vol. 64/2. P. 383–440.
- [16] *Пиеничиюк С.А., Асфандиаров Н.Л., Кухто А.В.* // Химическая физика. 2007. Т. 26. Вып. 7. С. 5–13.
- [17] *Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B.* et al. // Gaussian 03.D.01, Gaussian Inc. Wallingford CT, 2004.
- [18] *Becke A.D.* // J. Chem. Phys. 1993. Vol. 98. P. 5648–5652.
- [19] *Stratmann R.E., Scuseria G.E., Frisch M.J.* // J. Chem. Phys. (1998). Vol. 109. P. 8218.
- [20] *Sanche L., Shulz G.J.* // Phys. Rev. A. 1972. Vol. 5. P. 1672–1683.
- [21] *Jordan K.D., Burrow P.D.* // Chem. Rev. 1987. Vol. 87. P. 557–588.
- [22] *Modelli A.* // Trend. Chem. Phys. 1997. Vol. 6. P. 57–95.
- [23] *Chen D., Gallup G.A.* // J. Chem. Phys. 1990. Vol. 93. P. 8893–8901.
- [24] *Simons J., Jordan K.D.* // Chem. Rev. 1987. Vol. 87. P. 535–555.
- [25] *Staley S.W., Strnad J.T.* // J. Phys. Chem. 1994. Vol. 98. P. 116–121.
- [26] *Пиеничиюк С.А., Асфандиаров Н.Л., Барроу П.Д.* // Изв. РАН. Сер. хим. 2007. Вып. 6. С. 1222–1224.
- [27] *Scheer A.M., Burrow P.D.* // J. Phys. Chem. B. 2006. Vol. 110. P. 17 751–17 756.
- [28] *Bulović V., Burrows P.E., Forrest S.R., Cronin J.A., Thomson M.E.* // Chem. Phys. 1996. Vol. 210. P. 1–12.
- [29] *Wu C.I., Hirose Y., Siringhaus H., Kahn A.* // Chem. Phys. Lett. 1997. Vol. 272. P. 43–47.
- [30] *Park S., Kampen T.U., Zahn D.R.T.* et al. // Appl. Phys. Lett. 2001. Vol. 79/25. P. 4124–4126.
- [31] *Forest S.R., Kaplan M.L., Schmidt P.H.* // J. Appl. Phys. 1984. Vol. 55. P. 1492–1507.
- [32] *Taborski J., Väterlein P., Dietz H.* et al. // J. Elec. Spec. Rel. Phenom. 1995. Vol. 75. P. 129–147.
- [33] *Комолов С.А., Герасимова Н.Б., Сидоренко А.Г.* и др. // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. Вып. 20. С. 19–24.
- [34] *Tsiper E.V., Soos Z.G., Gao W., Kahn A.* // Chem. Phys. Lett. 2002. Vol. 360. P. 47–52.