

14,13

## Плотность электронных состояний в зоне проводимости сверхтонких пленок дикарбоксильно замещенного и тетракарбоксильно замещенного нафталина на поверхности окисленного кремния

© А.С. Комолов<sup>1</sup>, Э.Ф. Лазнева<sup>1</sup>, Н.Б. Герасимова<sup>1</sup>, Ю.А. Панина<sup>1</sup>,  
А.В. Барамыгин<sup>1</sup>, Г.Д. Зашихин<sup>1</sup>, С.А. Пшеничнюк<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный университет,  
Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра РАН,  
Уфа, Россия

E-mail: a.komolov@spbu.ru

(Поступила в Редакцию 27 сентября 2017 г.)

Приведены результаты исследования электронной структуры зоны проводимости пленок дикарбоксильно замещенного нафталина (NDCA) в процессе их осаждения на поверхность окисленного кремния методом спектроскопии полного тока (СПТ) в энергетическом диапазоне от 5 до 20 eV выше уровня Ферми. На основе результатов СПТ экспериментов и теоретических расчетов установлено энергетическое положение основных максимумов плотности незаполненных электронных состояний (DOUS) пленки NDCA и проведено сравнение с положением максимумов DOUS пленки тетракарбоксильно замещенного нафталина (NTCDA). Теоретический анализ включал в себя расчет энергий и пространственного распределения орбиталей исследованных молекул методом теории функционала плотности (DFT) на уровне B3LYP/6-31G(d) и последующую корректировку рассчитанных значений энергий орбиталей по методу, зарекомендовавшему себя ранее при исследованиях зоны проводимости пленок малых сопряженных органических молекул. В исследованном диапазоне энергий от 5 до 20 eV выше уровня Ферми максимумы DOUS пленки NTCDA сдвинуты в сторону меньших энергий электрона на 1–2 eV относительно соответствующих максимумов DOUS пленки NDCA.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ (15-29-05786, 18-03-00020). В работе использовали оборудование научного парка СПбГУ „Методы анализа состава вещества“ и „Диагностика функциональных материалов для медицины, фармакологии и нанoeлектроники“.

Авторы благодарят ООО „ЭФА медика“ и генерального директора Артемова В.В. за предоставление ксенонного осветительного оборудования.

DOI: 10.21883/FTT.2018.04.45696.281

### 1. Введение

Формирование поверхностных структур на основе сопряженных органических материалов и явления переноса электронного заряда в таких материалах представляет широкие возможности для устройств органической электроники [1–4]. В качестве возможных вариантов оптимизации приборных характеристик органических электронных устройств рассматривают введение в состав молекул электрически активных замещающих групп и воздействие на сверхтонкий органический слой со стороны поверхности твердотельной подложки [5–7]. Это представляет значительный фундаментальный интерес в плане установления закономерностей формирования энергетических зон электронных состояний в органических полупроводниках и в пограничной области в гибридных и поверхностных структурах [8–11]. Поверхности оксидов металлов, диоксида кремния, оксида графена рассматривают как перспективные для нанесе-

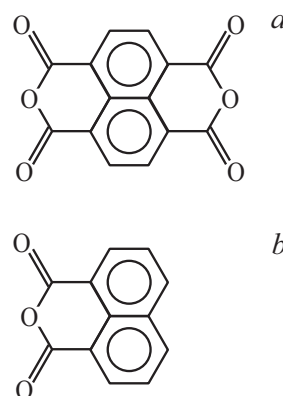
ния сплошных и наноструктурированных сопряженных органических покрытий [11–16]. Достаточно перспективными считают тонкие и сверхтонкие покрытия на основе молекул замещенных периленов и нафталинов, такие как перилен-тетракарбоновый диангидрид (PTCDA) и нафталин-тетракарбоновый диангидрид (NTCDA) [6,17–20]. В результате исследований методами спектроскопии оптического поглощения и методами электронной спектроскопии было показано, что введение в молекулы перилена и нафталина электрон-акцепторных заместителей, содержащих диангидрид или имид карбоновой кислоты, приводит к понижению положения энергетических уровней, соответствующих энергетической зоне проводимости в этих материалах [21,22].

Одним из экспериментальных подходов к изучению плотности незаполненных электронных состояний (DOUS) является методика спектроскопии полного тока (СПТ), дающая возможность исследования энергетических состояний в зоне проводимости посредством тести-

рующего пучка медленных электронов [23]. Одновременный теоретический анализ с использованием результатов *ab initio* расчетов позволяет установить природу обнаруженных максимумов DOUS. Ранее мы проводили исследование DOUS пленок PTCDA и NTCDA с помощью СПТ-методики и методики спектроскопии электронного захвата, и было показано, что при толщине пленки более 6 nm DOUS практически не зависит от материала подложки и достаточно хорошо соответствует структуре вакантных орбиталей изолированных молекул [22,24,25]. В данной статье приведены результаты исследования электронной структуры зоны проводимости в процессе формирования интерфейса сверхтонких пленок дикарбоксильно замещенного нафталина (NDCA), молекул, отличающихся от NTCDA меньшим количеством замещающих функциональных групп (рис. 1). Приведено сравнение результатов исследования плотности незаполненных электронных состояний пленок NTCDA и NDCA в диапазоне от 5 до 20 eV выше уровня Ферми ( $E_F$ ), полученной на основе экспериментальных исследований методом СПТ и на основе результатов теоретических расчетов с использованием методов теории функционала плотности (DFT).

## 2. Эксперимент

Для приготовления исследованных пленок использовали реактивы нафталин-1,4,5,8-тетракарбонный диангидрид (NTCDA) и нафталин-1,8-дикарбонный ангидрид (NDCA) (рис. 1), доступные коммерчески (Sigma-Aldrich). Обезгаживание реактивов проводили путем их выдержки в течение нескольких часов в вакуумной камере при базовом давлении  $10^{-6}$  Pa и температуре  $100^\circ\text{C}$ . В качестве подложек для нанесения пленок использовали пластины ( $\text{SiO}_2$ )/*n*-Si, предварительно очищенные в 10% растворе HF и смеси  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{H}_2\text{SO}_4$ . После такой процедуры очистки на поверхности кремния формируется слой оксида кремния толщиной около 3–5 nm с составом, близким к стехиометрическому [7,12]. Для формирования пленок проводили термическое осаждение в вакууме органического материала, NDCA или NTCDA, на поверхность подложки со скоростью примерно 0.1 nm/min. Непосредственно в процессе увеличения толщины органического покрытия до 6–7 nm проводили измерения методом СПТ [23]. Во время осаждения пленок допускали повышение давления на порядок от базового давления в вакуумной камере, при этом не производилось дополнительного нагрева подложки или отжига осажденного органического слоя. Как было показано для ряда различных пленок замещенных нафталинов и периленов, такая процедура осаждения приводит к формированию неупорядоченного органического слоя [25–27]. В методике СПТ параллельный пучок электронов площадью поперечного сечения 0.2–0.4 nm<sup>2</sup> направляется по нормали к исследуемой поверхности

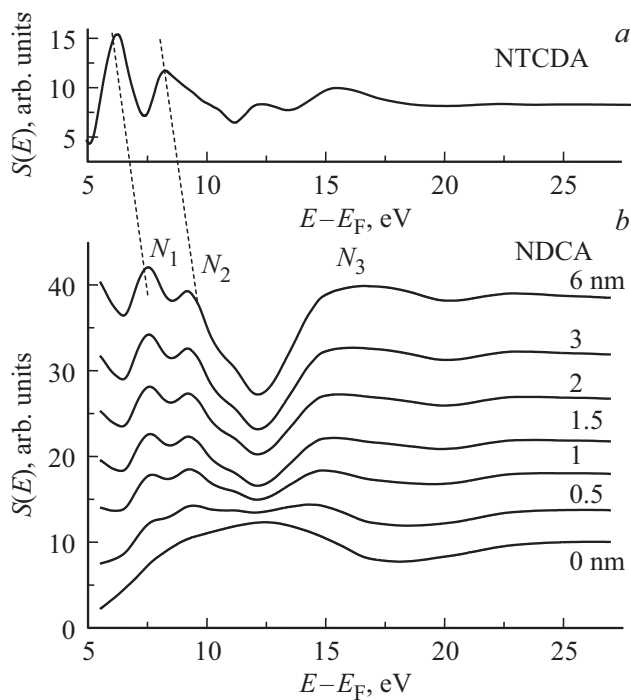


**Рис. 1.** Структурные формулы молекул нафталин-1,4,5,8-тетракарбонного диангидрида (NTCDA) (a) и нафталин-1,8-дикарбонного ангидрида (NDCA) (b).

и регистрируется производная по энергии от полного тока  $S(E)$ , проходящего через образец, как функция энергии падающих электронов, которую варьируют в диапазоне от 0 до 25 eV [23]. Зависимость  $S(E)$ , тонкая структура спектров полного тока (ТССПТ), отражает изменения вероятности входа падающих низкоэнергетических электронов в исследуемый образец, которая связана с зависимостью плотности незаполненных электронных состояний (DOUS) от энергии исследуемой поверхности [23,24,28]. Теоретический анализ DOUS исследованных пленок проводили путем расчетов методом DFT с помощью гибридного функционала B3LYP [29] в базисе 6-31G(d), реализованном в программном пакете Gaussian [30]. На основе схематических представлений вакантных орбиталей, их симметрии и формы, полученные из расчета, определяли их  $\pi^*$ - и  $\sigma^*$ -характер, так как  $\sigma^*$ -орбиталь симметрична относительно линии связи, а  $\pi^*$ -орбиталь симметрична относительно плоскости, проходящей через линию связи. К рассчитанным значениям энергий орбиталей (virtual orbital energies, VOE) применяли процедуру корректировки, подробно рассмотренную и опробованную для малых сопряженных органических молекул в работах [31–33]. В результате этой процедуры получают скорректированные значения энергий орбиталей (scaled virtual orbital energies, SVOE). В случае  $\pi^*$ -молекулярных орбиталей применяют выражение  $\text{SVOE} = (\text{VOE} + 1.14)/1.24$ , а в случае  $\sigma^*$ -орбиталей — выражение  $\text{SVOE} = (\text{VOE} + 0.97)/0.79$  [31,32,34].

## 3. Результаты и обсуждение

Серия зависимостей тонкой структуры спектров полного тока (ТССПТ), измеренная в процессе осаждения покрытия NDCA на поверхность ( $\text{SiO}_2$ )/*n*-Si, представлена на рис. 2, b. ТССПТ, измеренная до начала осаждения NDCA-пленки, соответствует обозначению „0 nm“ толщины органического покрытия (рис. 2, b), исходит



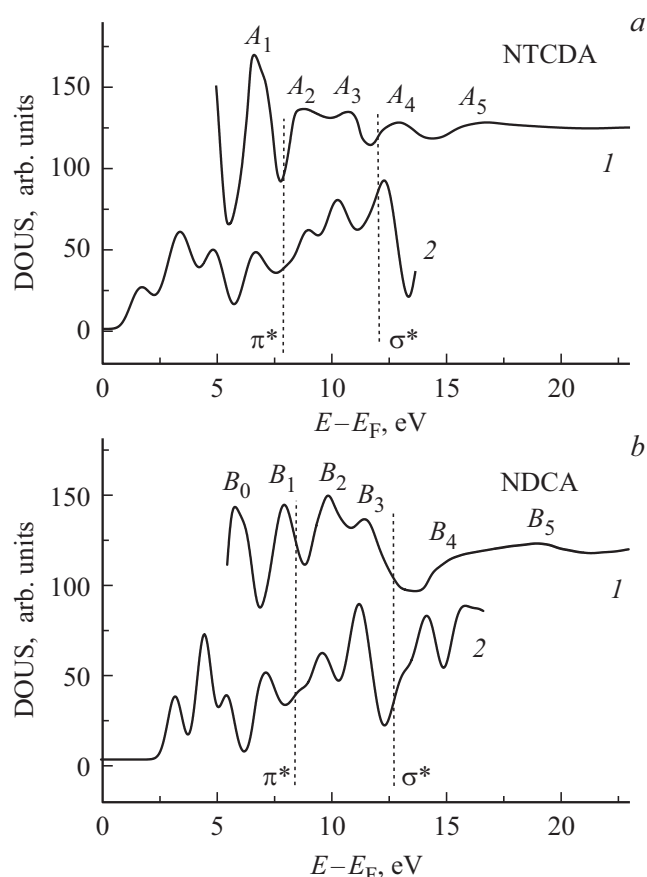
**Рис. 2.** *a* — ТССПТ пленки NTCDA толщиной 6 нм на поверхности  $(\text{SiO}_2)_n\text{-Si}$ . *b* — ТССПТ в процессе осаждения пленки NDCA на поверхность  $(\text{SiO}_2)_n\text{-Si}$ .  $N_1$ – $N_3$  — максимумы ТССПТ, характерные для слоя NDCA. Подписи около кривых указывают соответствующую толщину пленки NDCA. Пунктирные линии показаны для удобства сравнения положений максимумов.

от подложки и обладает характерной для поверхности  $(\text{SiO}_2)_n\text{-Si}$  формой, наблюдавшейся ранее для других образцов  $(\text{SiO}_2)_n\text{-Si}$  [7,23]. Так, для ТССПТ поверхности  $(\text{SiO}_2)_n\text{-Si}$  характерен широкий максимум в области энергий от 6 до 16 eV, в котором можно различить по крайней мере два компонента при 9 и 12.5 eV. По мере осаждения органического покрытия ТССПТ  $(\text{SiO}_2)_n\text{-Si}$  подложки затухала, одновременно нарастала интенсивность новой ТССПТ, отражающей электронную структуру зоны проводимости NDCA покрытия (рис. 2, *b*). Для ТССПТ NDCA-пленки характерны максимумы  $N_1$ ,  $N_2$ , расположенные при энергиях 7.5, 9.0 eV, и достаточно широкий максимум  $N_3$  с двумя выраженными компонентами при 15.0 и 17.5 eV (рис. 2, *b*). Для анализа характера изменения интенсивности ТССПТ осаждаемого покрытия удобно выбрать максимум  $N_2$  при энергии 9.0 eV. Для электронов с энергией 9 eV выше уровня  $E_F$  длина свободного пробега ( $\lambda$ ) составляет приблизительно 4 nm [23,35]. Для оценки изменений интенсивности ТССПТ сигнала, исходящего от  $(\text{SiO}_2)_n\text{-Si}$  подложки, удобно выбрать разницу между высотой максимума на 12.5 eV относительно минимума, расположенного на 17.5 eV (рис. 2, *b*). При этих значениях энергии электрона  $\lambda$  составляет приблизительно 3 nm. Было обнаружено, что в зависимости

от толщины осаждаемого покрытия NDCA интенсивность максимумов подложки экспоненциально убывает, а интенсивность максимума  $N_2$  растет экспоненциально, что свидетельствует о формировании сплошного напыляемого органического покрытия NDCA, как подробно обсуждалось в работах [7,23]. По достижении NDCA-пленки толщины 6 nm сформировалась стабильная ТССПТ с характерными максимумами  $N_1$ ,  $N_2$  и  $N_3$ , которая практически не изменялась при увеличении толщины органического покрытия до 8–11 nm. Дальнейшее осаждение органического покрытия приводило к искажениям в ТССПТ вследствие зарядки поверхности под действием падающего электронного пучка.

ТССПТ, отражающая электронную структуру зоны проводимости пленок NTCDA, при толщине пленки примерно 6 nm на  $(\text{SiO}_2)_n\text{-Si}$  подложке представлена на рис. 2, *a*. Как нами было показано ранее при исследованиях NTCDA покрытий, эта ТССПТ соответствует сформировавшейся пленке и не зависит от материала выбранной подложки [22,24]. Это хорошо соответствует и результатам исследований интерфейсов при формировании пленок NTCDA и пленок на основе других малых сопряженных органических молекул с поверхностями металлов и полупроводников, согласно которым влияние поверхности подложки в большинстве случаев ограничено тонким пограничным слоем толщиной до 2 nm [2,12,17,19]. ТССПТ пленки NTCDA представлена четырьмя основными максимумами с вершинами при 6.5, 8.0, 12.5 и 15.5 eV. Первые два максимума отражают границы энергетических зон  $\pi^*$ -состояний, согласно результатам теоретических расчетов и исследований методом обращенной фотоэмиссионной спектроскопии [19,36]. Максимумы при энергиях выше 12 eV над  $E_F$  обладают преимущественно  $\sigma^*$ -характером, согласно результатам работ [18,22]. В результате сравнения ТССПТ NTCDA и NDCA пленок авторы делают предположение, что максимумы  $N_1$  и  $N_2$  ТССПТ пленки NDCA являются аналогами  $\pi^*$ -максимумов пленки NTCDA и сдвинуты в сторону больших значений энергий электрона примерно на 1 eV (рис. 2, см. также пунктирные линии). Максимум  $N_3$  ТССПТ пленки NDCA, вероятно, имеет  $\sigma^*$ -природу, аналогично максимумам при энергиях 12.5 и 15.5 eV.

Экспериментальные ТССПТ можно использовать в качестве основы для построения зависимостей плотности незаполненных электронных состояний в зоне проводимости (DOUS). Как было показано в ряде работ, структура максимумов DOUS соответствует структуре максимумов ТССПТ и может быть построена в виде производной зависимости  $S(E)$  с обратным знаком:  $-dS(E)/dE$  [24,28,34]. В случае исследованных пленок NTCDA и NDCA для построения экспериментальной DOUS использовали зависимости ТССПТ, представленные на рис. 2. Таким образом, было установлено, что DOUS пленок NTCDA в энергетическом диапазоне от 5 до 20 eV выше  $E_F$  представлена максимумами



**Рис. 3.** DOUS исследованных сопряженных органических пленок. *a* — пленок NTCDA и *b* — пленок NDCA. Кривые 1 — DOUS зависимости, построенные на основе экспериментальных ТССПТ. Кривые 2 — DOUS зависимости, построенные на основе результатов расчетов с использованием методов DFT на уровне B3LYP/6-31G(d).  $A_1$ – $A_5$  — обозначения основных максимумов DOUS пленок NTCDA,  $B_0$ – $B_5$  — обозначения основных максимумов DOUS пленок NDCA. Вертикальные пунктирные линии разделяют области преимущественного обнаружения максимумов DOUS  $\pi^*$ - и  $\sigma^*$ -типа и переходную область, где максимумы DOUS имеют вклады и от  $\pi^*$ -, и от  $\sigma^*$ -электронных орбиталей.

$A_1$ – $A_5$ , а DOUS пленок NDCA в этом энергетическом диапазоне представлена максимумами  $B_0$ – $B_5$  (рис. 3, кривые 1). Для анализа экспериментальных зависимостей DOUS проведен расчет энергий орбиталей исследованных молекул NTCDA и NDCA методом на уровне B3LYP/6-31G(d) и последующая корректировка [31–33], как обсуждалось подробнее в разд. 2. В результате операции свертки рассчитанных энергий орбиталей с функцией Гаусса, полушириной 0.5 eV построены зависимости DOUS (рис. 3, кривые 2). При сравнении теоретических и экспериментальных DOUS зависимостей достаточно хорошее соответствие энергетического расположения максимумов наблюдается в диапазоне от 6 до 12 eV выше  $E_F$  (рис. 3). Так, экспериментальным DOUS максимумам  $A_1$ – $A_3$  в случае пленок NTCDA и

экспериментальным DOUS максимумам  $B_0$ – $B_3$  в случае пленок NDCA (рис. 3, кривые 1) соответствуют максимумы на теоретически рассчитанных DOUS зависимостях (рис. 3, кривые 2). Значения энергий ниже 5–6 eV над  $E_F$  выходят за рамки диапазона, в котором DOUS может быть установлена с использованием результатов СПТ эксперимента. При энергии выше 12 eV над  $E_F$  экспериментальные DOUS демонстрируют достаточно широкие максимумы  $A_4$ ,  $A_5$  в случае пленок NTCDA и максимумы  $B_4$ ,  $B_5$  в случае пленок NDCA (рис. 3). Вместе с этим расчетные зависимости DOUS имели при энергиях выше 12 eV над  $E_F$  отчетливую структуру, состоящую из более узких максимумов. Это различие следует связывать с тем, что при увеличении энергии падающего электрона более 12 eV выше  $E_F$  происходит существенное размытие экспериментальной ТССПТ.

Результаты проведенного DFT-расчета позволили также визуализировать форму, симметрию и локализацию вакантных орбиталей молекул NTCDA и NDCA с помощью используемого программного пакета [30]. Это позволило установить  $\pi^*$ - или  $\sigma^*$ -характер максимумов в рассчитанных DOUS зависимостях. Для обеих пленок, NTCDA и NDCA, установлено, что при энергиях менее 8.0 eV над  $E_F$  расположены преимущественно  $\pi^*$ -орбитали, а в диапазоне энергий от 8.0 до 12.5 eV располагается переходная область, в которой присутствуют и  $\pi^*$ - и  $\sigma^*$ -орбитали. Таким образом, максимумы DOUS  $A_1$ ,  $B_0$  и  $B_1$  (рис. 3) сформированы  $\pi^*$ -орбиталями, максимумы  $A_2$ ,  $A_3$ ,  $B_2$  и  $B_3$  имеют смешанную,  $\pi^*$  и  $\sigma^*$ , природу. Более высоколежащие максимумы  $A_4$ ,  $A_5$ ,  $B_4$  и  $B_5$  (рис. 3) имеют преимущественно  $\sigma^*$ -характер. О наличии максимумов DOUS, имеющих смешанную,  $\pi^*$  и  $\sigma^*$ , природу, сообщалось в литературе ранее [37,38]. Так, при замещении молекул бензола электрон-притягивающими функциональными группами было обнаружено, что происходил энергетический сдвиг части низколежащих  $\sigma^*$ -орбиталей в область, характерную для расположения DOUS максимумов  $\pi^*$ -типа [37]. Смешанные,  $\pi^*$  и  $\sigma^*$ , энергетические области DOUS при энергиях около 10 eV выше  $E_F$ , шириной в несколько eV были также обнаружены нами ранее в результате исследований пленок замещенных фуллеренов и ряда производных периленов [27,34].

Рассмотрим влияние введения дополнительной замещающей группы, дикарбоксильного диангидрида, в молекуле NDCA и формирование, таким образом, молекулы NTCDA (рис. 1) путем сравнения зависимостей DOUS (рис. 3) пленок на основе этих молекул. В области энергий выше 12.5 eV  $\sigma^*$ -максимумы  $A_4$ ,  $A_5$  пленки NTCDA сдвинуты на 1.5–2 eV в сторону меньших энергий электрона относительно  $\sigma^*$ -максимумов  $B_4$ ,  $B_5$  пленки NDCA. В диапазоне энергий от 6 до 12.5 eV максимумы  $A_1$ – $A_3$  пленки NTCDA также сдвинуты в сторону меньших энергий электрона до 1 eV относительно соответствующих максимумов  $B_1$ – $B_3$  пленки NDCA.

Максимуму  $V_0$  при энергии 5.5 eV пленки NDCA, видимо, соответствует максимум пленки NTCDA, расположенный при энергии 4.8 eV, однако в случае NTCDA этот максимум удалось зарегистрировать только в расчетной зависимости DOUS (рис. 3, а, кривая 2). Относительный энергетический сдвиг расположения  $\pi^*$ - и низлежащих  $\sigma^*$ -максимумов наблюдался для случаев NTCDA и NDCA ранее в результатах исследований методом спектроскопии электронного захвата [24], это различие следует связывать с изменением области сопряжения в области нафталинового остова исследованных молекул [39].

#### 4. Заключение

Исследованы закономерности формирования электронной структуры зоны проводимости пленок дикарбоксильно замещенного нафталина (NDCA) на поверхности окисленного кремния в энергетическом диапазоне от 5 до 20 eV над уровнем Ферми при использовании методики низкоэнергетической электронной СПТ и установлена структура максимумов ТССПТ пленок NDCA. На основе результатов СПТ экспериментов и теоретических расчетов на уровне ВЗЛР/6-31G(d) с дополнительной корректировкой установлено энергетическое положение основных максимумов DOUS пленки NDCA и проведено сравнение с положением максимумов DOUS пленки NTCDA. Для обеих пленок, NTCDA и NDCA, установлено, что при энергиях менее 8.0 eV над  $E_F$  расположены преимущественно  $\pi^*$ -орбитали, а в диапазоне энергий от 8.0 до 12.5 eV располагается переходная область, в которой присутствуют  $\pi^*$ - и  $\sigma^*$ -орбитали. В исследованном диапазоне энергий от 5 до 20 eV относительно  $E_F$  максимумы DOUS пленки NTCDA сдвинуты в сторону меньших энергий электрона на 1–2 eV относительно соответствующих максимумов DOUS пленки NDCA.

#### Список литературы

- [1] P.A. Troshin, D.K. Susarova, E.A. Khakina, A.A. Goryachev, O.V. Borshchev, S.A. Ponomarenko, V.F. Razumov, N. Serdar Sariciftci. *J. Mater. Chem.* **22**, 18433 (2012).
- [2] M. Gruenewald, L.K. Schirra, P. Winget, M. Kozlik, P.F. Ndione, A.K. Sigdel, J.J. Berry, R. Forker, J.-L. Brédas, T. Fritz, O.L.A. Monti. *J. Phys. Chem. C* **119**, 4865 (2015).
- [3] A.N. Aleshin, I.P. Shcherbakov, A.S. Komolov, V.N. Petrov, I.N. Trapeznikova. *Organic Electron.* **16**, 186 (2015).
- [4] A.C. Комолов, Э.Ф. Лазнева, Н.Б. Герасимова, Ю.А. Панина, А.В. Барамыгин, Г.Д. Зашихин. *ФТТ* **58**, 1216 (2016).
- [5] J.L. Bredas, A.J. Heeger. *Chem. Phys. Lett.* **217**, 507 (1994).
- [6] R. Tonner, P. Rosenowa, P. Jakob. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 6316 (2016).
- [7] A.S. Komolov, E.F. Lazneva, S.N. Akhremtchik. *App. Surf. Sci.* **256**, 2419 (2010).
- [8] I.S. Yahia, H.Y. Zahran, F.H. Alamri. *Synth. Met.* **222**, 186 (2016).
- [9] C. Farley, N.V.S.D.K. Bhupathiraju, B.K. John, C.M. Drain. *J. Phys. Chem. A* **120**, 7451 (2016).
- [10] B. Handke, L. Klita, J. Niziol, W. Jastrzebski, A. Adamczyk. *J. Molec. Struct.* **1065–1066**, 248 (2014).
- [11] B. Handke, L. Klita, W. Niemiec. *Surf. Sci.* (2017). DOI: 10.1016/j.susc.2017.08.23
- [12] L. Grzadziel, M. Krzywiecki, H. Peisert, T. Chassé, J. Szuber. *Organic Electron.* **13**, 1873 (2012).
- [13] И.А. Аверин, А.А. Карманов, В.А. Мошников, И.А. Пронин, С.Е. Игошина, А.П. Сигаев, Е.И. Теруков. *ФТТ* **12**, 2304 (2015).
- [14] M. Krzywiecki, L. Grzadziel, A. Sarfraz, D. Iqbal, A. Szwajca, A. Erbe. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 10004 (2015).
- [15] I.B. Olenych, O.I. Aksimentyeva, L.S. Monastyrskii, Y.Y. Horbenko, M.V. Partyka, A.P. Luchchko, L.I. Yarytska. *Nanoscale Res. Lett.* **11**, 43 (2016).
- [16] A.S. Komolov, Y.M. Zhukov, E.F. Lazneva, A.N. Aleshin, S.A. Pshenichnuk, N.B. Gerasimova, Yu.A. Panina, G.D. Zashikhin, A.V. Baramygin. *Mater. Des.* **113**, 319 (2017).
- [17] C.K. Chan, E.G. Kim, J.L. Bredas, A. Kahn. *Adv. Funct. Mater.* **16**, 831 (2006).
- [18] J. Taborski, P. Vaterlein, U. Zimmermann, E. Umbach. *J. Electron. Spectr. Rel. Phen.* **75**, 129 (1995).
- [19] I.G. Hill, J. Schwartz, A. Kahn. *Organic Electron.* **1**, 5 (2000).
- [20] D. Ozdal, N.P. Aydinlik, J.B. Bodapati, H. Icil. *Photochem. Photobiol. Sci.* **16**, 262 (2017).
- [21] F. Wurthner, C. Thalacker, S. Diele, C. Tschierske. *Chem. Eur. J.* **7**, 2245 (2001).
- [22] A.S. Komolov, P.J. Møller, Y.G. Aliaev, E.F. Lazneva, S. Akhremtchik, F.S. Kamounah, J. Mortenson, K. Schaumburg. *J. Molec. Struct.* **744/747**, 145 (2005).
- [23] A.S. Komolov, E.F. Lazneva, S.N. Akhremtchik, N.S. Chepilko, A.A. Gavrikov. *J. Phys. Chem. C* **117**, 24, 12633 (2013).
- [24] S.A. Pshenichnyuk, A.S. Komolov. *J. Phys. Chem. A* **116**, 1, 761 (2012).
- [25] С.А. Пшеничнюк, А.В. Кухто, И.Н. Кухто, А.С. Комолов. *ЖТФ* **81**, 6, 8 (2011).
- [26] S. Heutz, A.J. Ferguson, G. Rumbles, T.S. Jones. *Organic Electron.* **3**, 119 (2002).
- [27] А.С. Комолов, Э.Ф. Лазнева, Н.Б. Герасимова, Ю.А. Панина, А.В. Барамыгин, Г.Д. Зашихин, С.А. Пшеничнюк. *ФТТ* **59**, 359 (2017).
- [28] I. Bartos. *Progr. Surf. Sci.* **59**, 197 (1998).
- [29] A.D. Becke. *J. Chem. Phys.* **98**, 5648 (1993).
- [30] M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson et al. *Gaussian 09, Revision D.01*, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
- [31] P.D. Burrow, A. Modelli. *SAR and QSAR in Env. Res.* **24**, 647 (2013).
- [32] A.M. Scheer, P.D. Burrow. *J. Phys. Chem. B* **110**, 17751 (2006).

- [33] N.L. Asfandiarov, S.A. Pshenichnyuk, A.S. Vorob'ev, E.P. Nafikova, A. Modelli. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **29**, 910 (2015).
- [34] A.S. Komolov, E.F. Lazneva, N.B. Gerasimova, Yu.A. Panina, G.D. Zashikhin, A.V. Baramygin, P. Si, S.N. Akhremtchik, A.A. Gavrikov. *J. Electron Spectr. Rel. Phen.* **205**, 52 (2015).
- [35] T. Graber, F. Forster, A. Schoell, F. Reinert. *Surf. Sci.* **605**, 878 (2011).
- [36] T. Maruyama, A. Hirasawa, T. Shindow, K. Akimoto, H. Kato, A. Kakizaki. *J. Lumin.* **87–89**, 782 (2000).
- [37] A.P. Hitchcock, P. Fischer, A. Gedanken, M.B. Robin. *J. Phys. Chem.* **91**, 531 (1987).
- [38] J.G. Chen. *Surf. Sci. Rep.* **30**, 1 (1997).
- [39] A. Schoell, Y. Zou, D. Huebner, S.G. Urquhart, T. Schmidt, R. Fink, E. Umbach. *J. Chem. Phys.* **123**, 044509 (2005).