

Деструкция ароматических соединений органической электроники под воздействием электронов низких энергий

© М.В. Муфтахов, Р.В. Хатымов, Р.Ф. Туктаров

Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра РАН,
450075 Уфа, Россия
e-mail: rustem@anrb.ru

(Поступило в Редакцию 6 декабря 2017 г. В окончательной редакции 5 марта 2018 г.)

Для репрезентативного ряда ароматических соединений, представляющих интерес для органической электроники и фотоники, исследована стойкость молекул к разрушению под воздействием низкоэнергетических электронов (0–15 eV). Методом масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов установлены энергетические области наиболее эффективного взаимодействия свободных электронов с изолированными молекулами, приводящего к диссоциативному распаду молекул вследствие возникновения временноживущих молекулярных отрицательных ионов, нестабильных по отношению к фрагментации. Для отдельных групп соединений выявлены характеристичные каналы фрагментации молекулярных ионов, оценены пороговые энергии наиболее значимых фрагментационных процессов. Полициклические ароматические углеводороды и олигофенилы устойчивы к воздействию электронов в диапазоне энергии электронов $\sim 0\text{--}3\text{ eV}$, выше которого они распадаются по единственному каналу отщепления атома водорода. Для соединений, содержащих в своей структуре гетероциклы (производные оксадиазола и малеимида), диапазон устойчивости сужается до $\sim 0\text{--}1\text{ eV}$. Превышение этого диапазона энергии электронов инициирует распад молекул (анионов) по разнообразным каналам, среди которых наиболее интенсивным и разрушительным является отрыв от гетероциклического ядра цианат-аниона NCO(-).

DOI: 10.21883/JTF.2018.12.46795.2588

Введение

Перспективным направлением развития электронных и лазерных технологий является переход на компонентную базу из органических материалов. В связи с этим актуальной становится задача создания новых функциональных материалов с заданными регулируемые физико-химическими свойствами. Среди основных требований, предъявляемых к таким материалам, — их устойчивость к внешним воздействиям: агрессивной среде (вода, кислород, кислоты и пр.), электромагнитному облучению, перепадам температуры, механическим нагрузкам, давлению и пр. [1,2]. Одним из малоизученных, но важных аспектов стабильности материалов, является их устойчивость к воздействию низкоэнергетических электронов, возникающих в молекулярной системе в объеме или на поверхности материала, например, при фотоэффекте, протекании электрического тока, переносе или инжекции носителей зарядов. Молекулы в органических материалах, будучи связанными лишь слабыми ван-дер-ваальсовыми силами и/или водородными связями, в определенной степени обособлены от окружения [3]. Известно, что взаимодействие изолированных органических молекул с низкоэнергетическими свободными электронами сопровождается резонансным присоединением электронов к молекулам, при котором возникают временноживущие молекулярные отрицательные ионы (ОИ) [4]. Дальнейшая эволюция этих метастабильных образований приводит к спонтанному выбросу добавочного электрона

с сохранением целостности молекул [5], или же к их диссоциативному распаду (простым разрывом межатомных связей или посредством перегруппировок [6,7]). В отличие от декомпозиции молекул непосредственно в нейтральной форме (фотолиз, термодеструкция) или посредством ионизации (с образованием положительных ионов) деструкция молекул через образование отрицательных ионов возможна при гораздо меньших энергетических затратах [8]; имеются экспериментальные свидетельства того, что для разрушения некоторых видов молекул достаточно прилипания к ним электронов практически с нулевой кинетической энергией (см., например, [9–12]).

В настоящей работе методом масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного диссоциативного захвата электронов [13] исследован представительный ряд полициклических ароматических углеводородов (ПАУ), ряд фенилпроизводных бензола и триазина, некоторые производные оксадиазола и малеимида. Выбранные для исследования объекты относятся к классам соединений с развитой π -электронной структурой, перспективных для создания мономолекулярных переходов, зарядотранспортных слоев и активных сред в устройствах органической электроники, фотоники, молекулярной электроники и плазмоники различного назначения (в диодах, светодиодах, солнечных панелях, лазерах, переключателях, сенсорах и др.) [14–18].

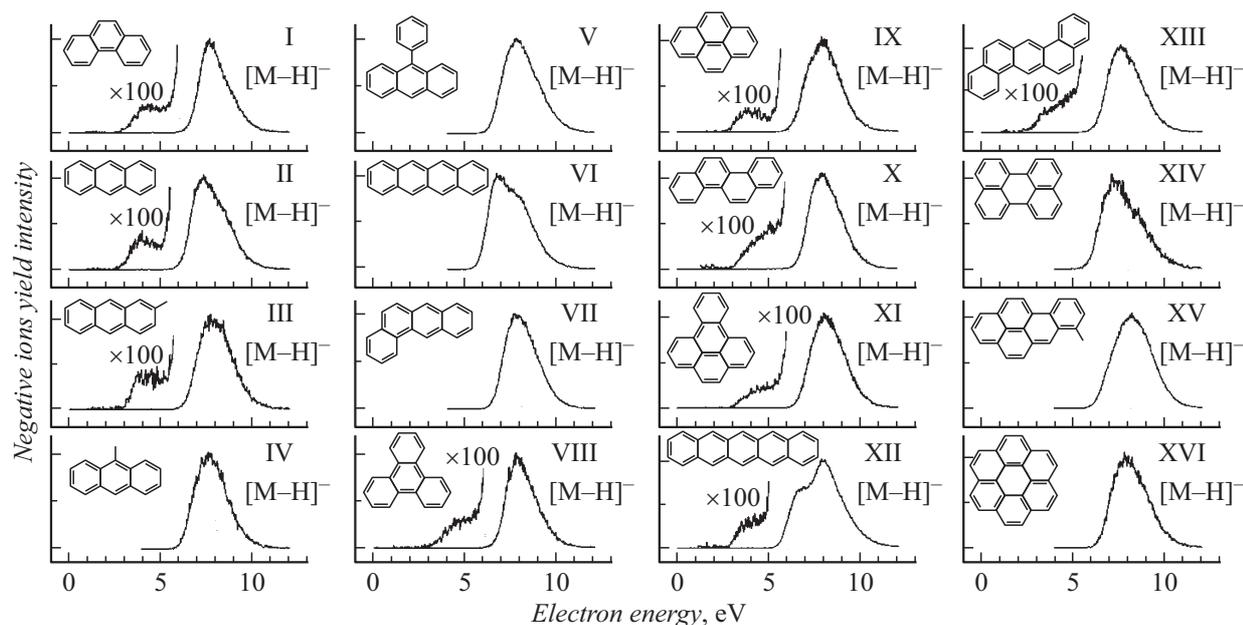


Рис. 1. Кривые эффективного выхода ионов $[M-H]^-$ из полициклических ароматических углеводородов I–XVI в функции от энергии электронов.

Метод и объекты исследования

Эксперимент выполнен на магнитном масс-спектрометре МИ–1201В (Украина, г.Сумы), модифицированном для работы с ОИ (см. блок-схему в [19]). Вкратце, электроны, эмитируемые вольфрамовым проволочным катодом, с заданной кинетической энергией попадают в камеру ионизации, где взаимодействуют с парами исследуемого образца, что приводит к образованию ОИ. Последние извлекаются из камеры, формируются в пучок, ускоряются, анализируются по массам и регистрируются вторично-электронным умножителем. Управление энергией электронного пучка осуществляется компьютером, в который синхронно заносится регистрируемый ионный сигнал. Для калибровки шкалы электронной энергии и контроля ее линейности мы использовали максимумы кривых эффективного выхода молекулярных ионов SF_6^- из гексафторида серы (~ 0 eV) и фрагментных ионов CH_3COO^- из уксусной кислоты (~ 1.55 eV [20]). Погрешность определения энергии максимумов пиков отрицательных ионов при этом составляет не более ± 0.05 eV. Энергия появления ионов определялась относительно энергии появления SF_6^-/SF_6 (~ 0 eV) с точностью ± 0.15 eV по методике, изложенной в [21]. Разрешение по энергии электронов составляло $\Delta E_{1/2} = 0.5\text{--}0.6$ eV.

В круг исследуемых объектов вошли молекулы ПАУ и некоторые их производные: фенантрен (I), антрацен (II), 2-метилантрацен (III), 9-метилантрацен (IV), 9-фенилантрацен (V), тетрацен (VI), бензо[а]антрацен (VII), трифенилен (VIII), пирен (IX), хризен (X), бензо[е]пирен (XI), пентацен (XII), дибензо[а,с]антрацен (XIII),

перилен (XIV), 7-метилбензо[а]пирен (XV), коронен (XVI); ряд олигофенилов: пара-кватерфенил (XVII), 1,3,5-трифенилбензол (XVIII), 2,4,6-трифенил-1,3,5-триазин (XIX); производные оксадиазола: 2,5-дифенил-1,3,4-оксадиазол (XX), 2-(4-бифенил)-5-(терт-бутилфенил)-1,3,4-оксадиазол (XXI), 2,5-бис(1-нафтил)-1,3,4-оксадиазол (XXII); производные малеимида: фталимид (XXIII), 2,3-нафталиндикарбосимид (XXIV), 1,8-нафталимид (XXV) и индиго (XXVI). Структурные формулы исследованных соединений показаны на рис. 1–4.

Образцы соединений I–XXVI чистотой не ниже 97% были приобретены в Sigma/Aldrich Chemical Co. и исследовались без дополнительной очистки. Для напуска в камеру ионизации применялся шток прямого ввода, подогреваемый до температуры оптимальной сублимации вещества (в пределах $90\text{--}150^\circ\text{C}$), при этом температура камеры поддерживалась на $10\text{--}30^\circ\text{C}$ выше. После экспериментов проверяли цвет образцов, неизменность которого служила косвенной гарантией отсутствия процессов термодеструкции во время эксперимента.

Результаты и обсуждение

ПАУ и их замещенные. Ранние масс-спектрометрические исследования ОИ из молекул ПАУ (M) показали их чрезвычайную устойчивость по отношению к диссоциативному распаду [22–24]. Было установлено, что единственным каналом фрагментации короткоживущих молекулярных ОИ ПАУ является выброс атома водорода, что подтверждается и нашими данными, полученными для более широкого круга объектов I–XVI. При регистрации масс-спектров метил- и фенил-замещенных

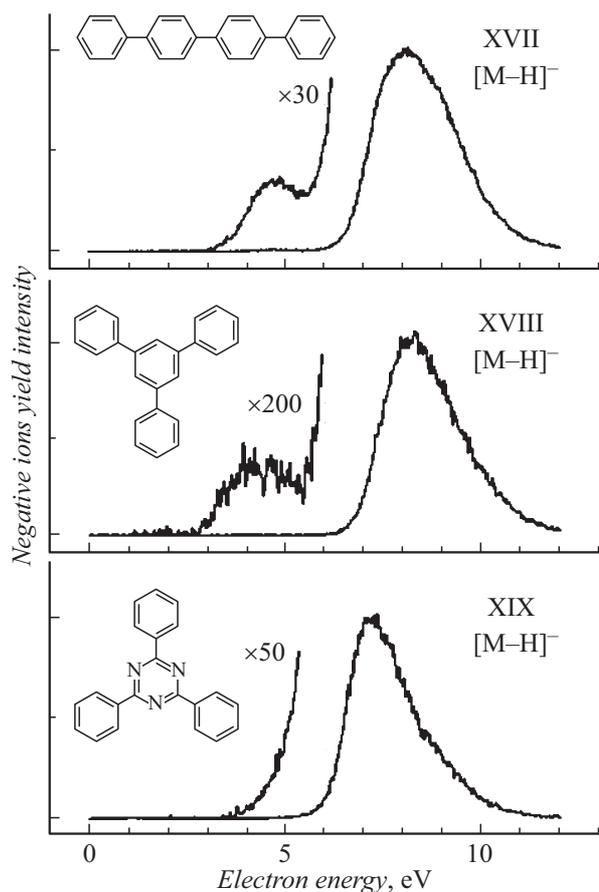


Рис. 2. Кривые эффективного выхода ионов $[M-H]^-$ из олигофенилов XVII–XIX в зависимости от электронной энергии.

ПАУ мы ожидали обнаружить пики ионов, отвечающих отрыву заряженных или нейтральных заместителей. Однако для объектов III, IV, XV ионы $[M-CH_3]^-$ или CH_3^- обнаружены не были. Лишь в масс-спектрах объекта V был обнаружен выход фенид-ионов $C_6H_5^-$ в области высоких энергий с интенсивностью на уровне приборного фона. Однако, скорее всего, происхождение этих ионов связано с примесями в образце, поскольку в некоторых незамещенных ПАУ они так же обнаруживались практически в той же области энергии.

Образование ионов $[M-H]^-$ ранее фиксировалось для ПАУ исключительно при энергиях электронов выше 5.5 eV [22–25]. Тщательные эксперименты позволили нам обнаружить наличие дополнительного процесса образования ионов $[M-H]^-$ при более низкой энергии, в области 3–5 eV (рис. 1). Его интенсивность оказалась в 300–500 раз ниже, чем для основного процесса в области 7–8 eV, а для некоторых соединений он не регистрировался вовсе, что требует своего объяснения.

Малый эффективный выход осколочных ионов в области низких энергий может быть следствием порогового характера процесса, в котором они образуются. Фрагментация, происходящая вблизи термохимического порога, как правило, характеризуется невысокой кон-

стантой скорости распада ввиду относительно малой внутренней энергии распадающихся ионов и наличия активационного барьера. Как известно, неотъемлемым свойством молекулярных отрицательных ионов является автоотщепление электрона, и этот процесс вблизи порога может выступить серьезным конкурирующим фактором для процесса образования ионов $[M-H]^-$.

Действительно, состоятельность предположения о пороговом характере образования ионов $[M-H]^-$ подтверждается оценочными расчетами. Анализ литературы показал, что энергия гомолитического разрыва связи $D(C-H)$ практически для всего ряда незамещенных ПАУ близка к 4.7 eV [26–28]. Электронное сродство (electron affinity) $EA([M-H]^\bullet)$ (остаточных) арильных радикалов было оценено с помощью теоретических расчетов [29]: оно варьирует вместе со сродством исходных молекул $EA(M)$, превосходя последнее в среднем на 1 eV. Зная величину $EA(M)$ (см., например, в [30,31]), для ионов $[M-H]^-$ из ПАУ можно ожидать вариацию величины энергетического порога появления АЕ (appearance energy, [8]) $AE_{calc}([M-H]^-) = D(C-H) - EA([M-H]^\bullet)$ в пределах от 4.7 – 2.4 \approx 2.3 eV (для пентацена XII с максимальным в ряду исследованных ПАУ сродством $EA(M) \approx 1.4$ eV) до 4.70 – 1.12 \approx 3.6 eV (для фенантрена I, обладающего в ряду минимальным значением $EA(M) = 0.12$ eV). Экспериментальные же величины $AE_{exper}([M-H]^-)$, измеренные для ПАУ по кривым на рис. 1, составляют от 2.8 до 3.2 eV и укладываются в расчетный диапазон, что и служит доказательством порогового характера образования обсуждаемых ОИ.

Еще одной альтернативной или дополнительной причиной исчезающе низкой интенсивности выхода ионов $[M-H]^-$ в области ниже 5.5 eV может быть изначально низкое сечение захвата электронов молекулами, что, возможно, обусловлено особенностями формирования электронно-возбужденных резонансов при этих электронных энергиях.

Олигофенилы. При исследовании *n*-кватерфенила (XVII) и 1,3,5-трифенилбензола (XVIII) мы не обнаружили каких-либо существенных отличий в характере масс-спектров по сравнению с таковыми для ПАУ — регистрировался интенсивный пик ионов $[M-H]^-$ в области энергии электронов свыше 6 eV (рис. 2). Как и для ПАУ, в области энергии ниже 6 eV процесс образования этих ионов происходит с меньшей интенсивностью — в ~ 90 и почти в 600 раз соответственно. В масс-спектре 2,4,6-трифенил-1,3,5-триазина (XIX) пик обсуждаемых ионов в области низких энергий не был обнаружен, но дополнительно к ионам $[M-H]^-$ был зарегистрирован пик ионов CN^- с максимумом выхода в районе 1.7 eV. На рис. 2 кривая выхода этих ионов не показана, поскольку они имеют примесное происхождение. Этот вывод основан на результатах многочисленных предыдущих экспериментов с азотсодержащими соединениями из разных классов: во всех случаях регистрировались цианид-анионы CN^- с максимумом выхода при 1.7–1.9 eV и с энергией появления ниже расчетного порогового

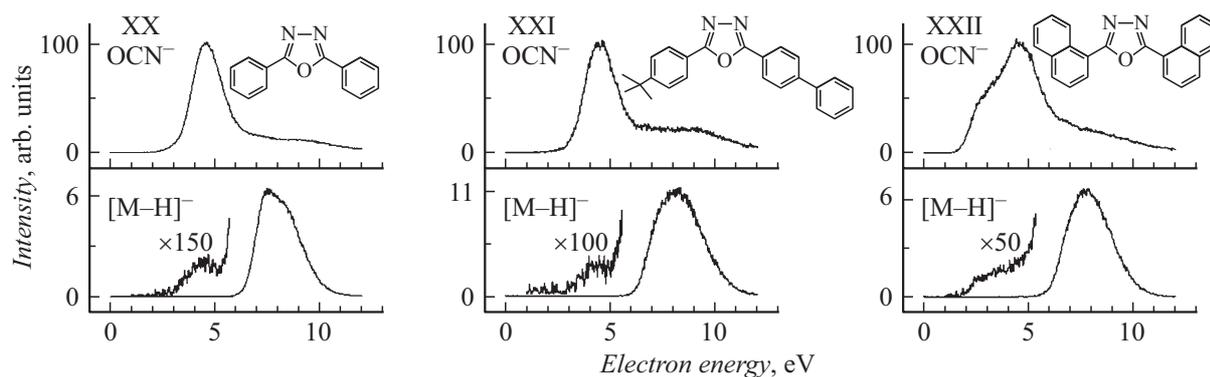


Рис. 3. Кривые эффективного выхода ионов OCN^- и $[\text{M-H}]^-$ из производных оксадиазола XX–XXII в функции от электронной энергии.

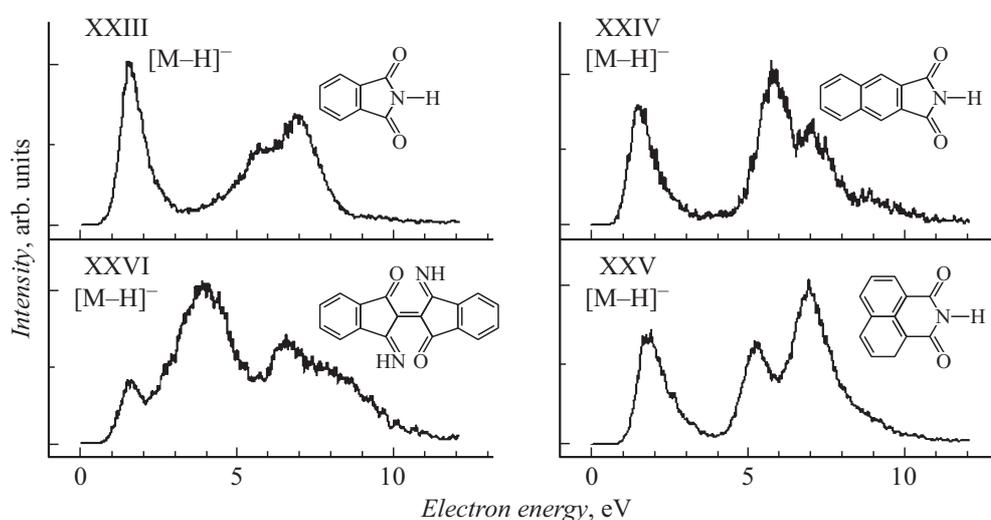
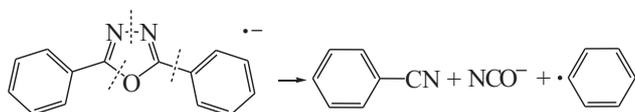


Рис. 4. Кривые эффективного выхода ионов $[\text{M-H}]^-$ из производных малеимида XXIII–XXVI в функции от электронной энергии.

значения для исследуемого соединения. В этой области энергии ионы CN^- могут образовываться довольно интенсивно даже при следовых количествах примесей нитрилов ввиду исключительно высокого электронного сродства циана, $\text{EA}(\text{CN}^\bullet) = 3.86 \text{ eV}$ [31].

Производные оксадиазола. Отличительной чертой соединений XX–XXII по сравнению с предыдущими группами соединений является присутствие в структуре молекул пятичленного гетероцикла. Наличие в нем атома кислорода может привести к образованию интенсивных оксид-ионов в области низких энергий, что наблюдалось ранее для фурана [32], дибензо-*n*-диоксина и его хлорпроизводных [25,33,34], фенолов [7,35] и др. [13]. В масс-спектрах XX–XXII основной пик соответствует цианат-анионам OCN^- с максимумом выхода в районе энергии 4.5 eV (рис. 3).

Образование этих ионов в XX может реализоваться посредством выброса молекулы бензонитрила и фенил-радикала:



Среди прочих проанализированных возможных фрагментационных маршрутов данная схема оказалась энергетически наиболее выгодной: расчетная пороговая энергия появления NCO^- по разным термодинамическим оценкам составила всего ~ 0.6 или 1.1 eV. Вполне вероятно, разрушение отщеплением ионов OCN^- может происходить по такой же схеме и в любых других производных оксадиазола, причем со сравнимой пороговой энергией. Однако в XX и XXI эти ионы интенсивно образуются в области энергии выше 3 eV, а в диапазоне энергии 2–3 eV наблюдается слабый подъем на кривой эффективного выхода (рис. 3). В XXII этот подъем превращается в отчетливое плечо и тем не менее в области ожидаемой пороговой энергии ионы OCN^- не регистрируются. Возможно, это связано с возникновением высокого активационного барьера при одновременной диссоциации трех межатомных связей в молекулярном ионе.

Реакции выделения ионов $[\text{M-H}]^-$ не отличаются разнообразием как среди объектов обсуждаемой группы оксадиазолов, так и в сравнении с предыдущими группами, а относительная интенсивность пиков ионов в масс-спектрах (в области энергии свыше 6 eV) составляет

6–11% от основного пика OCN^- (рис. 3). Кроме ионов OCN^- , $[\text{M}-\text{H}]^-$ в области энергии выше 2 eV регистрировались и ионы, образовавшиеся распадом гетероцикла. Относительная интенсивность пиков этих ионов в масс-спектрах не превышает 1%, и их кривые эффективного выхода на рис. 3 не представлены.

Производные малеимида. Молекулы ароматических производных малеимида (XXIII–XXV) включают гетероцикл с атомом азота. В масс-спектрах ионы $[\text{M}-\text{H}]^-$ регистрировались, начиная с энергии ~ 1 eV (рис. 4). Первый резонансный пик с максимумом выхода ионов при 1.5–1.8 eV обусловлен выбросом атома водорода в результате разрыва связи N–H. Этот вывод был сделан для фталимида при исследовании его N-замещенных производных [36]. Заметим, что аналогичным образом возникают ионы $[\text{M}-\text{H}]^-$ в области низких электронных энергий в индоле [37,38], карбазоле [25], пирроле и лактамах [39]. Эксперимент с индиго XXVI, проведенный дополнительно к производным малеимида, также выявил процесс фрагментации молекулярных ОИ выбросом атома водорода, начиная с энергии ~ 1 eV (рис. 4). В масс-спектрах XXIII–XXVI кроме пиков ионов $[\text{M}-\text{H}]^-$ регистрировались низкоинтенсивные пики других ионов (например, OCN^-) в области энергии выше 2 eV. Вероятно, ионы OCN^- для индиго имеют примесное происхождение, поскольку „готовая“ структура OCN в молекуле отсутствует, а их перегруппировочное образование наверняка сопряжено с преодолением стерических препятствий.

Заключение

В наших предыдущих исследованиях [30,40] было установлено, что при столкновении с электронами тепловых энергий (~ 0 eV) большинство молекул ПАУ эффективно присоединяют электроны и образуют долгоживущие, т.е. „доживающие“ до момента масс-спектрометрической регистрации, молекулярные ОИ (за исключением фенантрена и трифенилена). Для некоторых соединений (тетрацен, пентацен, фенилантрацен) долгоживущие молекулярные ОИ обнаруживались в диапазоне энергий электронов от 0 eV вплоть до 2–3 eV, что представляет достаточно непростой и редкий феномен. Была выявлена корреляция между измеренным средним временем жизни отрицательных ионов, которое может быть принято за меру их кинетической стабильности, и адиабатическим электронным сродством молекул — параметром, отражающим термодинамическую стабильность анионов. Надо полагать, после такого временного присоединения электрона целостность молекул не нарушается. Действительно, как показано в настоящей работе, молекулы ПАУ устойчивы также и относительно диссоциативного распада (фрагментации, электродеструкции) как минимум вплоть до энергий электронов ~ 3 eV. Эти экспериментальные факты позволяют принять ПАУ в качестве модельных соединений,

представляющих образец устойчивости к воздействию низкоэнергетических электронов. Отметим, что такой же, если не более ярко выраженной, устойчивостью к воздействию низкоэнергетических электронов обладают, пожалуй, только фуллерены [41–43], молекулярная структура которых может быть формально представлена, как пространственная сборка таких же полициклических составных элементов, как и молекулы ПАУ.

Как и для ПАУ, для соединений XIX–XXVI, содержащих гетероциклы, долгоживущие молекулярные ОИ тоже были обнаружены, но их обсуждение выходит за рамки настоящей работы. В отличие от ПАУ производные оксадиазола начинают распадаться при энергиях электронов ~ 2 eV, а производные малеимида — даже при меньших, начиная с ~ 1 eV. В первую очередь, это связано с повышенным значением электронного сродства окси- и имид-радикалов по сравнению с арильными и фенильными радикалами [31], отрицательно заряженные формы которых и становятся продуктами распада молекулярных ионов. Соотношение энергий диссоциации различных связей в молекулах [26] так же оказывает влияние на пороговую энергию фрагментации, но в меньшей степени. Для производных малеимида низкоэнергетический канал фрагментации обусловлен диссоциацией связи N–H. Как и для всех представленных здесь соединений, в этом процессе в паре с ионом $[\text{M}-\text{H}]^-$ выделяется атомарный водород, представляющий собой чрезвычайно реакционную частицу, которая может быть вовлечена в процессы структурной перестройки или фрагментации других окружающих молекул. Одним из способов блокировки этого первичного энергетически малозатратного, довольно интенсивного процесса и связанных с ним вторичных нежелательных деструктивных явлений может стать введение заместителя к атому азота. Например, известно, что N-метилирование пиррола и индола закрывает канал фрагментации молекулярных ионов с образованием имид-ионов при энергии 1.5–2.3 eV [37,39]. Аналогичный эффект обнаружен и для N-замещенных производных фталимида [36]. Этот простой и легко осуществимый способ оправдывает себя, если N-замещение не влияет кардинально на функциональные свойства молекул, используемых в электронных и оптоэлектронных устройствах. Например, на зарядотранспортные свойства органических материалов свое влияние оказывают в том числе и слабые межмолекулярные взаимодействия. Поэтому в случае производных малеимида необходимо учитывать, что упомянутое N-замещение имидного атома водорода может ослабить/аннулировать межмолекулярные водородные связи с атомом азота из-за возникновения стерического эффекта.

Альтернативным способом повышения устойчивости молекул с гетероциклическими фрагментами к воздействию низкоэнергетических электронов может быть замена NH-группы на атом кислорода. Так, при переходе от фталимида к его аналогу фталиевому ангидриду порог фрагментации молекулярных ионов „сдвигается“ в область энергий, превышающих 2 eV [44].

Благодарности

Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Республики Башкортостан в рамках научного проекта № 17-42-020643 с использованием оборудования Центра коллективного пользования „Спектр“ ИФМК УФИЦ РАН, включенного в „Перечень уникальных научных установок Российской Федерации“ (<http://ckp-rf.ru/usu/353466/>).

Список литературы

- [1] Scholz S., Kondakov D., Lüssem B., Leo K. // Chem. Rev. 2015. Vol. 115. N 16. P. 8449–8503. DOI: 10.1021/cr400704v
- [2] Grossiord N., Kroon J.M., Andriessen R., Blom P.W.M. // Organic Electronics. 2012. Vol. 13. N 3. P. 432–456. <https://doi.org/10.1016/j.orgel.2011.11.027>
- [3] Silinsh E.A., Capek V. Organic Molecular Crystals: Interaction, Localization and Transport Phenomena. N.Y.: AIP Press, 1994. 402 p.
- [4] Electron-Molecule Interactions and their Applications. Vol. 2. / Ed. L.G. Christophorou. N.Y.: Academic Press, 1984. 699 p. ISBN: 978-0-12-174402-1
- [5] Christophorou L.G. // Advan. Electron. Electron Phys. 1978. Vol. 46. P. 55–129. [https://doi.org/10.1016/S0065-2539\(08\)60411-4](https://doi.org/10.1016/S0065-2539(08)60411-4)
- [6] Fabrikant I.I., Eden S., Mason N.J., Fedor J. // Advan. Atom. Molecul. Opt. Phys. Eds. E. Arimondo, C.C. Lin, S.F. Yelin. Academic Press, 2017. Vol. 66. P. 545–657. <https://doi.org/10.1016/bs.aamop.2017.02.002>
- [7] Muftakhov M.V., Khatymov R.V., Shchukin P.V., Pogulay A.V., Mazunov V.A. // J. Mass Spectrometry. 2010. Vol. 45. N 1. P. 82–88. DOI: 10.1002/jms.1693
- [8] Ponomarev D.A., Takhistov V.V. // J. Molecul. Struct. 2006. Vol. 784. N 1–3. P. 198–213. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2005.07.035>
- [9] Sailer W., Pelc A., Matejcek S., Illenberger E., Scheier P., Märk T.D. // J. Chem. Phys. 2002. Vol. 117. N 17. P. 7989–7994. <https://doi.org/10.1063/1.1510446>
- [10] Хатымов Р.В., Муфтахов М.В., Мазунов В.А., Недопекин Д.В., Галютдинов И.В., Одинокоев В.Н. // Изв. АН. Сер. Хим. 2002. № 2. С. 291–294. [Khatymov R.V., Muftakhov M.V., Mazunov V.A., Nedopekin D.V., Galyautdinov I.V., Odinokov V.N. // Russian Chem. Bulletin. 2002. Vol. 51. N 2. P. 306–310. <https://doi.org/10.1023/A:1015411928216>]
- [11] Шукин П.В., Муфтахов М.В., Хатымов Р.В. // Масс-спектрометрия. 2013. Т. 10. № 3. С. 158–166. [Shchukin P.V., Muftakhov M.V., Khatymov R.V. Mass-Spektrometria. 2013. Vol. 10. N 3. P. 158–166.]
- [12] Pshenichnyuk S.A., Modelli A. // Intern. J. Mass Spectrometry. 2010. Vol. 294. N 2–3. P. 93–102. DOI: 10.1016/j.ijms.2010.05.025
- [13] Мазунов В.А., Шукин П.В., Хатымов Р.В., Муфтахов М.В. // Масс-спектрометрия. 2006. Т. 3. № 1. С. 11–32. [Mazunov V.A., Shchukin P.V., Khatymov R.V., Muftakhov M.V. // Mass-Spektrometria. 2006. Vol. 3. N 1. P. 11–32.]
- [14] Organic Electronics Materials and Devices / Ogawa S. (Ed.) Tokio: Springer Japan, 2015. 245 p. DOI: 10.1007/978-4-431-55654-1
- [15] Forget S., Chénais S. Organic Solid-State Lasers / Springer Series in Optical Sciences (Book 175), 2013. 169 p. DOI: 10.1007/978-3-642-36705-2
- [16] Борисевич Н.А., Толкачев В.Л. // УФН. 1982. Т. 138. № 4. С. 545–572. [Borisevich N.A., Tolkachev V.A. // Sov. Phys. Usp. 1982. Vol. 25. P. 865–880. DOI: 10.1070/PU1982v025n12ABEH005001]
- [17] Wilson A.J., Willets K.A. // Annual Rev. Analyt. Chem. 2016. Vol. 9. N 1. P. 27–43. DOI: 10.1146/annurev-anchem-071015-041612
- [18] Printed Organic and Molecular Electronics / Gamota D.R., Brazis P., Kalyanasundaram K., Zhang J. (Eds.) Springer US, 2004. 695 p. DOI: 10.1007/978-1-4419-9074-7
- [19] Khatymov R.V., Markov V.Yu., Tuktarov R.F., Ioffe I.N., Muftakhov M.V., Avdoshenko S.M., Pogulay A.V., Sidorov L.N. // Int. J. Mass Spectrom. 2008. Vol. 272. P. 119–126. DOI: 10.1016/j.ijms.2008.01.007
- [20] Muftakhov M.V., Vasil'ev Yu.V., Mazunov V.A. // Rapid Commun. Mass Spectrom. 1999. Vol. 13. N 12. P. 1104–1108. DOI: 10.1002/(SICI)1097-0231(19990630)13:12<1104::AID-RCM619>3.0.CO;2-C
- [21] Muftakhov M.V., Khatymov R.V., Mazunov V.A., Ponomarev D.A., Takhistov V.V., Vatlina L.P. // Rapid Commun. Mass Spectrom. 2000. Vol. 14. N 16. P. 1482. DOI: 10.1002/1097-0231(20000830)14:16<1482::AID-RCM50>3.0.CO;2-E
- [22] Аминев И.Х., Хвостенко В.И., Юрьев В.П., Толстиков Г.А. // Известия АН СССР. Сер. хим. 1973. № 8. С. 1885–1886. [Aminev I.Kh., Khvostenko V.I., Yur'ev V.P., Tolstikov G.A. // Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR Division of Chemical Science. Vol. 22. P. 1831–1832. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF00932128>]
- [23] Tobita S., Meinke M., Illenberger E., Christophorou L.G., Baumgärtel H., Leach S. // Chem. Phys. 1992. Vol. 161. P. 501–508. DOI: 10.1016/0301-0104(92)80165-R
- [24] Denijl S., Ptasíńska S., Sonnweber P., Scheier D., Liu F., Hagelberg J., Mack L., Scott T., Märk T.D. // J. Chem. Phys. 2005. Vol. 123. P. 104308. <https://doi.org/10.1063/1.2008947>
- [25] Муфтахов М.В., Хатымов Р.В., Мазунов В.А., Тахистов В.В., Пономарев Д.А. // Химическая физика. 2000. Т. 19. № 12. С. 42–48 [Muftakhov M.V., Khatymov R.V., Mazunov V.A., Takhistov V.V., Ponomarev D.A. // Chem. Phys. Reports. 2001. Vol. 19. N 12. P. 2287–2300.]
- [26] Luo Y.-R. Handbook of Bond Dissociation Energies in Organic Compounds. Boca Raton: CRC Press LLC, 2003. 380 p.
- [27] Cioslowski J., Liu G., Martinov M., Piskorz P., Moncrieff D. // J. Am. Chem. Soc. 1996. Vol. 118. P. 5261–5264. DOI: 10.1021/ja9600439
- [28] Blanquart G. // Int. J. Quan. Chem. 2015. Vol. 115. P. 796–801. DOI: 10.1002/qua.24904
- [29] Papas B.N., Wang S., DeYonker N.J., Woodcock H.L., Schaefer H.F.III. // J. Phys. Chem. A. 2003. Vol. 107. N 32. P. 6311–6316. DOI: 10.1021/jp030494x
- [30] Khatymov R.V., Muftakhov M.V., Shchukin P.V. // Rapid Commun. Mass Spectrom. 2017. Vol. 31. P. 1729–1741. <https://doi.org/10.1002/rcm.7945>

- [31] *Linstrom P.J., Mallard W.G.* (Eds.) NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899. DOI: 10.18434/T4D303 (retrieved November 30, 2017).
- [32] *Муфтахов М.В., Мазунов В.А., Тахистов В.В.* // Изв. АН. Сер. хим. 1994. № 6. С. 1052–1056. [*Muftakhov M.V., Mazunov V.A., Takhistov V.V.* // Russian Chem. Bulletin. 1994. Vol. 43. N 6. P. 988–992. DOI: 10.1007/BF01558063]
- [33] *Муфтахов М.В., Хатымов Р.В., Мазунов В.А.* // Изв. АН, Сер. хим., 2000. № 8. С. 1494–1495. [*Muftakhov M.V., Khatymov R.V., Mazunov V.A.* // Russian Chem. Bulletin. 2000. Vol. 49. N 8. P. 1489–1489. DOI: 10.1007/BF02495108]
- [34] *Хатымов Р.В., Муфтахов М.В., Щукин П.В., Мазунов В.А.* // Изв. АН. Сер. Хим. 2004. № 4. С. 703–706. [*Khatymov R.V., Muftakhov M.V., Schukin P.V., Mazunov V.A.* // Russian Chem. Bulletin. 2004. Vol. 53. N 4. P. 738–741. DOI: 10.1023/B:RUCB.0000037835.28726.0a]
- [35] *Хатымов Р.В., Муфтахов М.В., Щукин П.В., Мазунов В.А.* // Изв. АН. Сер. Хим. 2003. № 9. С. 1870–1876. [*Khatymov R.V., Muftakhov M.V., Schukin P.V., Mazunov V.A.* // Russian Chem. Bulletin. 2003. Vol. 52. N 9. P. 1974–1981. <https://doi.org/10.1023/B:RUCB.0000009641.29142.3c>]
- [36] *Мавродиев Д.В., Абдуллин М.Ф., Сайниев Д.А., Сахаутдинов И.М., Халилова Л.В., Мавродиев В.К., Фурлей И.И.* // Химия высоких энергий. 2013. Т. 47. № 2. С. 83–88. DOI: 10.7868/S0023119713020087
- [37] *Хвостенко В.И., Фурлей И.И., Кост А.Н., Бudyлин В.А., Юдин Л.Г.* // ДАН СССР. 1969. Т. 189. № 4. С. 817–819. [*Khvostenko V.I., Furlei I.I., Kost A.N., Budylin V.A., Yudin L.G.* // Doklady AN SSSR. 1969. Vol. 189. P. 778.]
- [38] *Modelli A., Jones D., Pshenichnyuk S.A.* // J. Chem. Phys. 2013. Vol. 139. P. 184305. DOI: 10.1063/1.4829057
- [39] *Muftakhov M.V., Asfandiarov N.L., Khvostenko V.I.* // J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 1994. Vol. 69. P. 165–175. DOI: 10.1016/0368-2048(94)02047-4
- [40] *Хатымов Р.В., Туктаров Р.Ф., Муфтахов М.В.* // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 93. № 8. С. 482–487. [*Khatymov R.V., Tuktarov R.F., Muftakhov M.V.* // JETP Lett. 2011. Vol. 93. N 8. P. 437–441. DOI: 10.1134/S002136401108011X]
- [41] *Туктаров Р.Ф., Хатымов Р.В., Щукин П.В., Муфтахов М.В., Марков В.Ю., Соломещ О.А.* // Письма в ЖЭТФ. 2009. Т. 90. № 7. С. 564–568. [*Tuktarov R.F., Khatymov R.V., Shchukin P.V., Muftakhov M.V., Markov V.Yu., Solomeshch O.A.* // JETP Lett. 2009. Vol. 90. N 7. P. 515–518. DOI: 10.1134/S0021364009190047]
- [42] *Khatymov R.V., Shchukin P.V., Tuktarov R.F., Muftakhov M.V., Markov V.Yu., Goldt I.V.* // Int. J. Mass Spectrom. 2011. Vol. 303. P. 55–62. DOI: 10.1016/j.ijms.2010.12.014
- [43] *Khatymov R.V., Markov V.Yu., Tuktarov R.F., Ioffe I.N., Muftakhov M.V., Avdoshenko S.M., Pogulay A.V., Sidorov L.N.* // Int. J. Mass Spectrom. 2008. Vol. 272. P. 119–126. DOI: 10.1016/J.IJMS.2008.01.007
- [44] *Cooper C.D., Compton R.N.* // J. Chem. Phys. 1973. Vol. 59. N 7. P. 3550. <https://doi.org/10.1063/1.1680519>