

13,14

Прохождение низкоэнергетических электронов и плотность незаполненных состояний сверхтонких слоев TCNQ на поверхности окисленного кремния

© А.С. Комолов¹, Э.Ф. Лазнева¹, Н.Б. Герасимова¹, В.С. Соболев¹, Ю.А. Панина¹,
С.А. Пшеничнюк², Н.Л. Асфандиаров², В. Handke³

¹ Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия

² Институт физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра РАН,
Уфа, Россия

³ AGH University of Science and Technology, Faculty of Material Science and Ceramics,
Kraków, Poland

E-mail: a.komolov@spbu.ru

Поступила в Редакцию 10 марта 2020 г.

В окончательной редакции 10 марта 2020 г.

Принята к публикации 17 марта 2020 г.

Приведены результаты исследования формирования незаполненных электронных состояний и пограничного потенциального барьера при термическом осаждении пленок тетрацианохинодиметана (TCNQ), толщиной до 7 нм, на поверхность (SiO₂)*n*-Si. Измерения электронных характеристик исследованной поверхности проводили методом спектроскопии полного тока (TCS) с использованием тестирующего электронного пучка с энергиями в диапазоне от 5 до 20 eV выше уровня Ферми. Формирование пограничного потенциального барьера в структуре (SiO₂)*n*-Si/TCNQ сопровождалось увеличением работы выхода поверхности от 4.2 ± 0.1 до 4.7 ± 0.1 eV. На основе результатов TCS экспериментов построены зависимости DOUS исследованных пленок TCNQ. Для анализа экспериментальных зависимостей DOUS проведен расчет энергий орбиталей исследованных молекул TCNQ методом теории функционала плотности (DFT) на уровне B3LYP/6-31G(d), с последующей корректировкой и учетом энергии поляризации среды в конденсированном состоянии. В исследованном энергетическом диапазоне DOUS пленок TCNQ имеет четыре основных максимума. Максимум DOUS при энергии 7.0 eV над E_F образован преимущественно π^* -орбиталями. Три максимума DOUS, расположенные в диапазоне энергий от 8.0 до 20 eV выше E_F , сформированы примерно одинаковым количеством орбиталей π^* - и σ^* -типа.

Ключевые слова: сопряженные органические молекулы, ультратонкие пленки, электронные свойства, низкоэнергетическая электронная спектроскопия, расчеты методом теории функционала плотности, плотность электронных состояний.

DOI: 10.21883/FTT.2020.07.49481.048

1. Введение

Изучение электронных свойств молекулярных структур на основе малых сопряженных органических молекул, осажденных на поверхность органических и неорганических полупроводников предоставляет значительный интерес в плане применения результатов этих исследований в разработке устройств органической электроники [1–5]. Органические материалы на основе молекул тетрацианохинодиметана (7,7,8,8-tetracyano-*p*-quinodimethane или TCNQ) привлекают значительный интерес, так как молекулы TCNQ формируют комплексы переноса заряда, могут быть использованы в качестве допанта для других органических материалов с целью повышения подвижности носителей заряда в органических полупроводниковых устройствах [6–8]. Двухкомпонентные материалы на основе TCNQ и щелочных металлов могут быть перспективны при использовании в качестве катодов в Li-ионных батареях [9]. При исследованиях с помо-

щью ряда методик физики поверхности было установлено, что сверхтонкие слои термически осажденных пленок TCNQ формируют сплошное покрытие ряда подложек как при комнатной температуре подложек, так и при их охлаждении [6]. Установлено, что пленки TCNQ обладают достаточно большими значениями электронной работы выхода, около 5 eV [6,9,10]. Значение электронного сродства установлено как 4.2 eV [6]. С помощью теоретических расчетов и экспериментально было установлено, что в диапазоне энергий электрона до 6 eV выше границы зоны проводимости в пленках TCNQ расположена группа максимумов плотности незаполненных электронных состояний (DOUS), обладающих π^* -симметрией [6,11]. А при более высоких значениях энергии предполагали наличие DOUS-максимумов σ^* -характера.

Среди экспериментальных подходов к изучению DOUS органических полупроводников следует упомянуть комплекс методик по изучению резонансного захвата электронов [12–14], направленных на исследования

органических молекул в газовой фазе, и метод спектроскопии полного тока (TCS) [15,16], позволяющий проводить исследования сверхтонких органических покрытий на поверхности твердого тела. При использовании этих двух групп методов в комплексе с теоретическими расчетами методом теории функционала плотности (DFT) было показано достаточно хорошее соответствие между максимумами DOUS ряда полупроводниковых органических материалов и энергиями вакантных орбиталей молекул, формирующих исследованный органический материал [17,18]. Ранее методами резонансного захвата электронов нами и другими авторами были исследованы характеристики вакантных электронных состояний молекул TCNQ в диапазоне энергий до нескольких eV выше потенциала ионизации [19,20]. В настоящей статье приведены результаты исследования методом TCS незаполненных электронных состояний зоны проводимости сверхтонких пленок TCNQ, термически осажденных на поверхность окисленного кремния. Приведены результаты по экспериментальному установлению основных максимумов DOUS в диапазоне от 5 до 20 eV выше уровня Ферми в комплексе с результатами теоретических расчетов из первых принципов DOUS пленок TCNQ.

2. Эксперимент

Для приготовления исследованных пленок использовали реактивы тетрацианохинодиметана (7,7,8,8-tetracyano-p-quinodimethane, TCNQ) (рис. 1), доступные коммерчески (Sigma-Aldrich). Обезгаживание проводили путем выдерживания реактива *in situ* в течение нескольких h в вакуумной камере при базовом давлении 10^{-6} Па и температуре 100°C. Кремниевые пластины (SiO₂)*n*-Si, предварительно очищенные в 10% растворе HF и смеси H₂O₂/H₂SO₄, использовали в качестве подложек для осаждения пленок. После такой процедуры очистки на поверхности кремния формируется слой оксида кремния толщиной 3–5 nm с составом, близким к стехиометрическому [15,21,22]. При использовании метода спектроскопии полного тока (TCS) [15,23] падающий пучок электронов с энергией, которую варьируют в диапазоне от 0 до 25 eV, тестирует электронные характеристики исследуемой поверхности. Падающий пучок был направлен по нормали к исследуемой поверхности и имел площадь поперечного сечения 0.2–0.4 mm². Имеется возможность проводить TCS измерения непосредственно в процессе термического осаждения органического покрытия

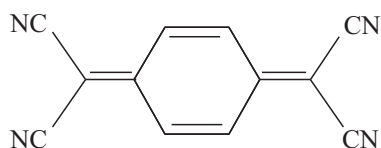


Рис. 1. Структурная формула и оптимальная геометрическая структура молекул 7,7,8,8-tetracyano-p-quinodimethane (TCNQ).

толщиной до 8 nm на поверхность (SiO₂)*n*-Si-подложки. Была выбрана скорость осаждения примерно 0.1 nm/min. Во время осаждения пленок допускали повышение давления в вакуумной камере на порядок от базового давления (10^{-6} Pa). Пучок падающих электронов создает ток через образец, и в методике TCS регистрируется производная по энергии от проходящего тока $S(E)$, как функция энергии падающих электронов [15,23]. TCS предоставляет возможность определять работу выхода исследуемой поверхности относительно уровня Ферми системы, то есть величины $(E_{\text{vac}} - E_{\text{F}})$ с учетом калибровки инструмента [23]. Тонкая структура спектров полного тока (ТССПТ) связана с зависимостью плотности незаполненных электронных состояний (DOUS) от энергии исследуемой поверхности [15,24,25].

Теоретический анализ DOUS исследованных пленок проводили с применением программы Gaussian [26] путем расчетов методом теории функционала плотности (DFT) с помощью гибридного функционала B3LYP в базе 6-31G(d). С учетом пространственного распределения вакантных орбиталей, полученных из расчета, определяли их π^* - и σ^* -характер. К рассчитанным значениям энергий орбиталей (virtual orbital energies, VOE) применяли процедуру корректировки, которую успешно применяли и ранее при исследованиях малых сопряженных органических молекул в работах [27–29]. В результате этой процедуры получают скорректированные значения энергий орбиталей (scaled virtual orbital energies, SVOE). В случае π^* -молекулярных орбиталей применяют выражение $\text{SVOE} = (\text{VOE} + 1.14)/1.24$, а в случае σ^* -орбиталей — выражение $\text{SVOE} = (\text{VOE} + 0.97)/0.79$ [27,28,30].

3. Результаты и обсуждение

Серия зависимостей тонкой структуры спектров полного тока (ТССПТ), экспериментально измеренная в процессе осаждения пленок TCNQ на поверхность (SiO₂)*n*-Si, представлена на рис. 2. ТССПТ, соответствующая нулевой толщине органического покрытия, исходит от поверхности (SiO₂)*n*-Si-подложки. Для нее характерно наличие широкого максимума в области энергий от 6 до 16 eV, что соответствует результатам исследований других образцов (SiO₂)*n*-Si, проведенных нами ранее [15,16]. В процессе увеличения толщины органического слоя ТССПТ-подложки затухала, и одновременно нарастала интенсивность новой ТССПТ, и при толщине пленки TCNQ 7 nm сформировалась стабильная ТССПТ поверхности с характерными максимумами N₁, N₂ и N₃, расположенными при энергиях 6.5, 9.5 и 15.0 eV, соответственно (рис. 2). При увеличении толщины TCNQ покрытия до 8–10 nm ТССПТ практически не изменялась, а продолжение осаждения приводило к искажениям ТССПТ вследствие зарядки поверхности под действием падающего электронного пучка.

Зависимости изменения интенсивностей ТССПТ осаждаемого слоя и подложки представлены на рис. 3, а.

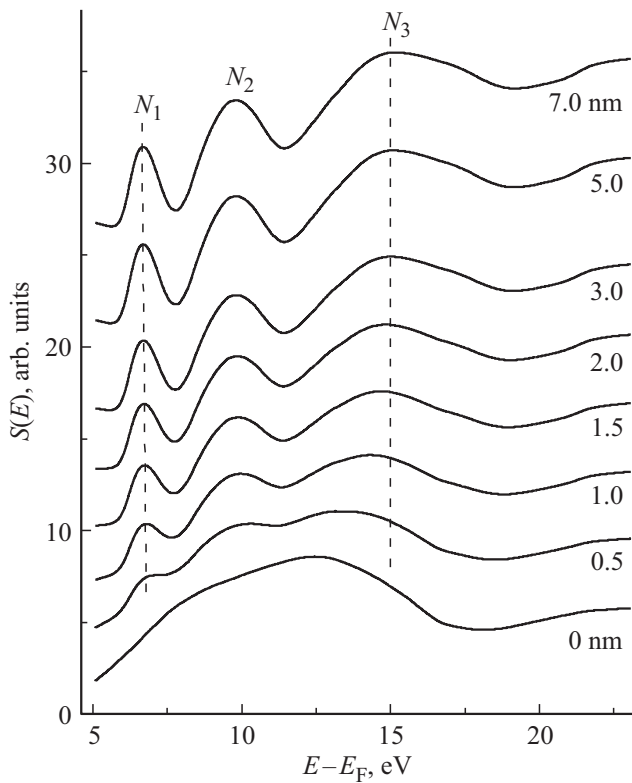


Рис. 2. ТССПТ в процессе осаждения покрытия TCNQ на поверхность $(\text{SiO}_2)n\text{-Si}$. N_1 , N_2 и N_3 максимумы ТССПТ, характерные для пленок TCNQ. Подписи около кривых указывают соответствующую толщину органического слоя. Вертикальные пунктирные линии в области максимумов N_1 и N_3 изображены для удобства сравнения положений максимумов.

Анализ изменения интенсивностей ТССПТ осаждаемого слоя и подложки позволяет установить отсутствие пор в исследованных пленках, так как в случае осаждения сплошного органического покрытия интенсивность вкладов сигналов, исходящих от подложки и от осаждаемого слоя, в измеряемое ТССПТ изменяется экспоненциально с изменением толщины осаждаемого органического покрытия [15,31]. Для анализа нарастания интенсивности ТССПТ осаждаемого покрытия удобно выбрать максимум N_2 при энергии 9.5 eV. Длина свободного пробега (λ) низкоэнергетических электронов с такой энергией составляет приблизительно 4 nm [15,31]. Для оценки степени затухания ТССПТ-сигнала, исходящего от $(\text{SiO}_2)n\text{-Si}$ -подложки, удобно рассматривать максимум на 12.5 eV относительно минимума, расположенного на 17.5 eV (рис. 2). При этих значениях энергии электрона λ составляет приблизительно 3 nm [31]. Зависимости, представленные на рис. 3, *a*, имеют экспоненциальный характер, что свидетельствует о формировании сплошного слоя TCNQ на поверхности $(\text{SiO}_2)n\text{-Si}$. Влияние вклада осаждаемой пленки TCNQ в измеряемую ТССПТ начинает проявляться на ранней стадии осаждения при усредненной толщине покрытия менее 0.5 nm (рис. 3, *a*, кривая 2). Формирование сплошного покрытия на по-

верхности окисленного кремния при достаточно малой скорости термического осаждения органического слоя, около 1 nm/min, мы наблюдали ранее в случае ряда пленок других сопряженных органических молекул, таких как олигомеров фенилен-винилена, тиофен-фенилен соолигомеров [15,32]. Формирование равномерного покрытия толщиной до 5 nm при термическом осаждении пленок TCNQ наблюдали и на поверхностях других подложек, например, поликристаллического Au [6]. При этом температуру подложки в процессе осаждения можно было выбирать в достаточно широком диапазоне от комнатной до 90 K. Следует полагать, что в случае физической адсорбции молекул на поверхность подложки именно вид органической молекулы, способность молекул образовывать микрокристаллы определяют шероховатость и пористость органического покрытия [33–35].

Изменение значения $E_{\text{vac}} - E_F$ в ходе осаждения пленки TCNQ на поверхность $(\text{SiO}_2)n\text{-Si}$ -подложки показано на рис. 3, *b*. Значение $E_{\text{vac}} - E_F$ для исходной поверхности $(\text{SiO}_2)n\text{-Si}$ было определено как 4.2 ± 0.1 eV, что является характерным значением для этой поверхности с учетом проведенной предварительной очистки [15]. При осаждении пленки TCNQ значения $E_{\text{vac}} - E_F$ выросли более 4.6 eV при увеличении толщины органического покрытия примерно до 3 nm, и пришли к насыщению на 4.7 ± 0.1 eV при дальнейшем осаждении пленки до 7 nm (рис. 5, *b*). Таким образом, наиболее значитель-

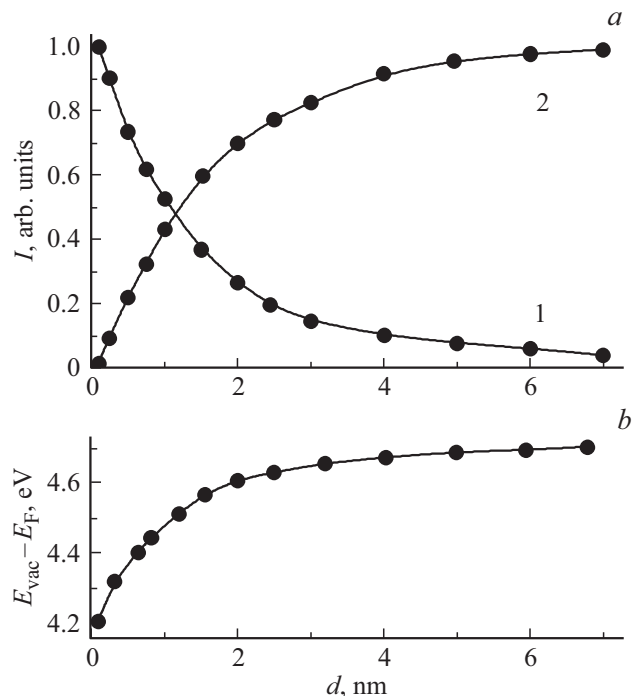


Рис. 3. Анализ TCS-результатов при формировании TCNQ-пленки на поверхности $(\text{SiO}_2)n\text{-Si}$. *a* — уменьшение интенсивности ТССПТ-подложки (кривая 1) и нарастание интенсивности ТССПТ-пленки TCNQ (кривая 2). *b* — изменение положения уровня вакуума E_{vac} относительно E_F в зависимости от толщины слоя TCNQ.

ные изменения работы выхода поверхности на границе $(\text{SiO}_2)_n\text{-Si}/\text{TCNQ}$ происходят в достаточно узком пограничном слое, что достаточно часто наблюдалось ранее для ряда интерфейсов органических пленок [36–39]. Увеличение значений $E_{\text{vac}} - E_{\text{F}}$, соответствует переносу отрицательного заряда из подложки в органическую пленку. Полученные результаты соответствуют тому, что пленки TCNQ являются типичным акцептором электронов. Установленные значения работы выхода исследованных пленок несколько меньше соответствующих значений 5.0–5.3 eV, известных из литературы [8,9]. Такое различие установленных значений можно связать с тем, что были использованы различные экспериментальные методики. В TCS возможность входа тестирующих электронов в образец определяется условием превышения либо равенства регулируемой потенциальной энергии электронов в падающем пучке и работы выхода поверхности образца. А в работе [8] использовали значение энергии крайних областей измеренных ультрафиолетовых фотоэлектронных спектров (ultraviolet photoelectron spectra, UPS). Вместе с этим незначительные различия в условиях термического осаждения пленок TCNQ также могут приводить к отклонениям измеренных значений работы выхода в несколько десятых долей eV [8,9].

Экспериментальные ТССПТ (рис. 2) послужили основой для построения зависимостей DOUS исследованных пленок TCNQ (рис. 4, *a*). Как было показано в ряде работ, структура максимумов DOUS соответствует структуре максимумов TCTCS и может быть построена в виде производной зависимости $S(E)$ с обратным знаком: $-dS(E)/dE$ [15,24,30]. Таким образом, обнаружено, что DOUS пленок TCNQ в энергетическом диапазоне от 5 до 20 eV выше E_{F} представлена максимумами $Q_1 - Q_4$ (рис. 4, *a*). Для анализа экспериментальных зависимостей DOUS проведен расчет энергий орбиталей исследованных молекул TCNQ методом теории функционала плотности (DFT) на уровне B3LYP/6-31G(d), с последующей корректировкой [27–29], как обсуждалось подробнее в разделе 2, и учетом энергии поляризации среды в конденсированном состоянии [40]. В результате операции свертки рассчитанных энергий орбиталей с функцией Гаусса, полной ширины на половине высоты (full width at half maximum, FWHM) 0.7 eV, построены зависимости DOUS (рис. 4, *b*). При сравнении теоретических и экспериментальных DOUS-зависимостей хорошее соответствие энергетического расположения максимумов наблюдается в достаточно широком диапазоне от 6 до 18 eV выше E_{F} (рис. 4). Так, всем четырем основным максимумам экспериментальной DOUS $Q_1 - Q_4$ (рис. 4, *a*) соответствуют максимумы на теоретически рассчитанной DOUS-зависимости (рис. 4, *b*). При этом в области энергии максимума Q_4 теоретическая зависимость представлена двумя вершинами. При энергии выше 15 eV над E_{F} экспериментальные DOUS демонстрируют достаточно широкие максимумы Q_3 и Q_4 (рис. 4, *a*). Вместе с этим расчетные зависимости DOUS демонстрируют при энергиях выше 15 eV над

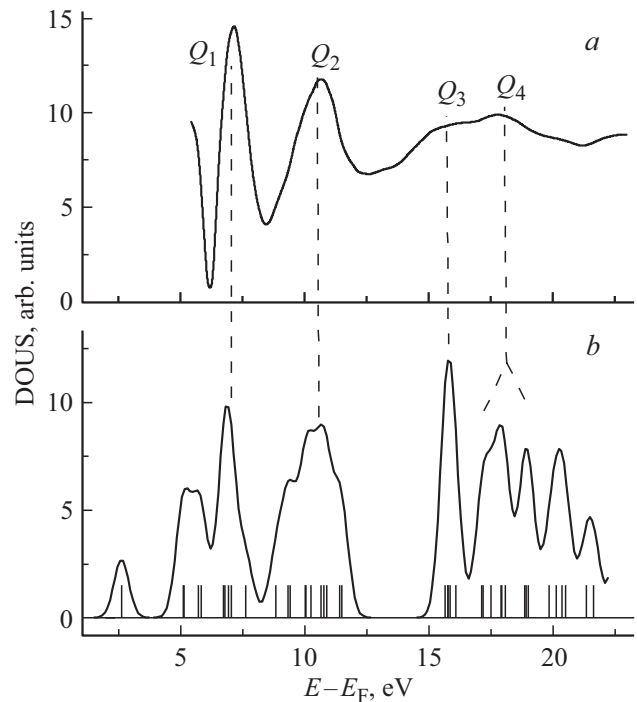


Рис. 4. DOUS исследованных пленок TCNQ. *a* — DOUS на основе экспериментальных ТССПТ. *b* — DOUS на основе результатов расчетов с использованием методов DFT на уровне B3LYP/6-31G(d). Вертикальный линейчатый спектр в нижней части (*b*) указывает значения энергий молекулярных орбиталей, использованных для расчетов теоретической DOUS. $Q_1 - Q_4$ — обозначения основных максимумов DOUS. Вертикальные пунктирные линии проведены для удобства сравнения положения максимумов.

E_{F} отчетливую структуру, состоящую из более узких максимумов. Это различие следует связывать с тем, что при увеличении энергии падающего электрона более 15 eV выше E_{F} происходит размытие экспериментально наблюдаемых максимумов DOUS. Значения энергии ниже 5–6 eV над E_{F} выходят за рамки диапазона, в котором DOUS может быть установлена с использованием результатов TCS эксперимента. При этом результаты расчетов показывают наличие максимума DOUS при 5–6 eV и максимума низшей незаполненной молекулярной орбитали (lowest unoccupied molecular orbital, LUMO) DOUS примерно при 2.5 eV (рис. 4, *b*).

Результаты проведенного DFT-расчета позволили также визуализировать пространственную локализацию вакантных орбиталей, формирующих максимумы DOUS, с помощью используемого программного пакета [26]. Это позволило установить π^* - или σ^* -характер максимумов DOUS пленок TCNQ. Так, максимумы DOUS при энергиях менее 8.0 eV над E_{F} , в том числе максимум Q_1 (рис. 4) образованы преимущественно π^* -орбиталями. Это соответствует результатам других исследований пленок TCNQ [11] и результатам теоретических исследований молекул TCNQ и исследований методом спектроскопии

электронного захвата [12,19]. Действительно, в этих работах сообщается о нескольких группах незаполненных молекулярных орбиталей π^* -типа в рассматриваемом диапазоне энергий до 5.5–6 eV выше энергии LUMO. Диапазон энергий от 8.0 до 20 eV выше E_F соответствует области, в которой присутствуют и π^* -, и σ^* -орбитали. Действительно, максимумы DOUS Q_2 , Q_3 и Q_4 (рис. 4) сформированы примерно одинаковым количеством орбиталей π^* - и σ^* -типа. О наличии максимумов DOUS, образованных одновременно π^* - и σ^* -орбиталями сообщалось ранее в работах [41,42]. Так, при исследованиях серии замещенных молекул бензола было обнаружено, что происходил энергетический сдвиг части низколежащих σ^* -орбиталей в область, характерную для расположения DOUS максимумов π^* -типа [41]. Смешанные, π^* - и σ^* -, 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 [43].

4. Заключение

Исследованы закономерности формирования максимумов тонкой структуры спектров полного тока в энергетическом диапазоне от 5 до 20 eV над уровнем Ферми при термическом осаждении пленок TCNQ, толщиной до 7 nm, на поверхность пленок $(\text{SiO}_2)_n\text{-Si}$. Формирование пограничного потенциального барьера в структуре $(\text{SiO}_2)_n\text{-Si/TCNQ}$ сопровождалось увеличением работы выхода поверхности от 4.2 ± 0.1 до 4.7 ± 0.1 eV. Зависимость DOUS от энергии в исследованном энергетическом диапазоне, построенная на основе результатов проведенных TCS-экспериментов, обладает четырьмя основными максимумами. Структура максимумов DOUS соответствует результатам проведенных расчетов методом DFT на уровне B3LYP/6-31G(d). Установлено, что максимум DOUS при энергии 7.0 eV над E_F образован преимущественно π^* -орбиталями. Три остальных максимума DOUS, расположенные в диапазоне энергий от 8.0 до 20 eV выше E_F , сформированы примерно одинаковым количеством орбиталей π^* - и σ^* -типа.

Финансирование

TCS эксперименты выполнены при поддержке Российского научного Фонда (грант № 19-13-00021). Теоретический анализ энергий молекулярных орбиталей выполнен при поддержке грантов РФФИ (18-03-00020 и 18-03-00179). В работе использовали оборудование научного парка СПбГУ „Физические методы исследования поверхности“ и „Диагностика функциональных материалов для медицины, фармакологии и нанoeлектроники“.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии у них конфликта интересов.

Список литературы

- [1] O.T. Hofmann, P. Rinke. Adv. Electron. Mater. **3**, 1600373 (2017).
- [2] A.N. Aleshin, I.P. Shcherbakov, E.V. Gushchina, L.B. Matyushkin, V.A. Moshnikov. Organic Electr. **50**, 213 (2017).
- [3] B. Handke, N. Gebicka, A.S. Komolov. Appl. Surf. Sci. **478**, 636 (2019).
- [4] A.S. Komolov, P.J. Moeller. Appl. Surf. Sci. **212-213**, 493 (2003).
- [5] В.М. Корнилов, А.Н. Лачинов, Д.Д. Карамов, И.Р. Набиуллин, Ю.В. Кульвелис. ФТТ **58**, 1030 (2016).
- [6] K. Kanai, K. Akaike, K. Koyasu, K. Sakai, T. Nishi, Y. Kamizuru, T. Nishi, Y. Ouchi, K. Seki. Appl. Phys. A **95** 309 (2009).
- [7] H. Mendez, G. Heimel, A. Opitz, K. Sauer, P. Barkowski, M. Oehzelt, J. Soeda, T. Okamoto, J. Takeya, J.-B. Arlin, J.-Y. Balandier, Y. Geerts, N. Koch, I. Salzmann. Angew. Chem. Int. Ed. **52**, 7551 (2013).
- [8] M.J. Capitan, J. Alvarez, C. Navio. Phys. Chem. Chem. Phys. **20**, 10450 (2018).
- [9] R. Precht, S. Stolz, E. Mankel, T. Mayer, W. Jaegermann, R. Hausbrand. Phys. Chem. Chem. Phys. **18**, 3056 (2016).
- [10] G.-Z. Zhu, L.-S. Wang. J. Chem. Phys. **143**, 221102 (2015)
- [11] J. Fraxedas, Y.J. Lee, I. Jimenez, R. Gago, R.M. Nieminen, P. Ordejon, E. Canadell. Phys. Rev. B **68**, 195115 (2003).
- [12] P.D. Burrow, A.E. Howard, A.R. Johnston, K.D. Jordan. J. Phys. Chem. **96**, 7570 (1992).
- [13] S.A. Pshenichnyuk, A. Modelli, E.F. Lazneva, A.S. Komolov. J. Phys. Chem. A **120**, 2667 (2016).
- [14] S.A. Pshenichnyuk, R.G. Rakhmeyer, N.L. Asfandiarov, A.S. Komolov, A. Modelli, D. Jones. J. Phys. Chem. Lett. **9**, 9, 2320 (2018).
- [15] A.S. Komolov, E.F. Lazneva, S.N. Akhremtchik, N.S. Chepilko, A.A. Gavrikov. J. Phys. Chem. C **117**, 24, 12633 (2013).
- [16] A.S. Komolov, E.F. Lazneva, S.N. Akhremtchik. App. Surf. Sci. **256**, 2419 (2010).
- [17] S.A. Pshenichnyuk, A.S. Komolov. J. Phys. Chem. A **116**, 1, 761 (2012).
- [18] S.A. Pshenichnyuk, A. Modelli, N.L. Asfandiarov, E.F. Lazneva, A.S. Komolov. J. Chem. Phys. **151**, 214309 (2019).
- [19] S.A. Pshenichnyuk, A. Modelli, E.F. Lazneva, A.S. Komolov. J. Phys. Chem. A **118**, 6810 (2014).
- [20] O.G. Khvostenko, L.Z. Khatymova, V.G. Lukin, R.R. Kinzybulatov, G.M. Tuimedov, E.E. Tseplin, S.N. Tseplina. Chem. Phys. Lett. **711**, 81 (2018).
- [21] L. Grzadziel, M. Krzywiecki, G. Genchev, A. Erbe. Synth. Met. **223**, 199 (2017).
- [22] B. Handke, L. Klita, W. Niemiec. Surf. Sci. **666**, 70 (2017).
- [23] A.S. Komolov, P.J. Moeller. Appl. Surf. Sci. **244**, 573 (2005).
- [24] I. Bartos. Progr. Surf. Sci. **59**, 197 (1998).
- [25] A.S. Komolov, S.N. Akhremtchik, E.F. Lazneva. Spectrochim. Acta A **798**, 708 (2011).
- [26] M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, et al. Gaussian 09, Revision D.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT (2016).

- [27] P.D. Burrow, A. Modelli. SAR QSAR Env. Res. **24**, 647 (2013).
- [28] A.M. Scheer, P.D. Burrow. J. Phys. Chem. B **110**, 17751 (2006).
- [29] N.L. Asfandiarov, S.A. Pshenichnyuk, A.S. Vorob'ev, E.P. Nafikova, A. Modelli. Rapid Commun. Mass Spectrom. **29**, 910 (2015).
- [30] А.С. Комолов, Э.Ф. Лазнева, Н.Б. Герасимова, Ю.А. Панина, А.В. Барамыгин, С.А. Пшеничнюк. ФТТ **60**, 799 (2018).
- [31] С.А. Комолов, Э.Ф. Лазнева, А.С. Комолов. Письма в ЖТФ, **29**, 13 (2003).
- [32] A.S. Komolov, E.F. Lazneva, N.B. Gerasimova, Yu.A. Panina, V.S. Sobolev, A.V. Koroleva, S.A. Pshenichnyuk, N.L. Asfandiarov, A. Modelli, B. Handke, O.V. Borshchev, S.A. Ponomarenko. J. Electron Spectr. Rel. Phenom. **235**, 40 (2019).
- [33] E. Jungyoon, S. Kim, E. Lim, K. Lee, D. Cha, B. Friedman. Appl. Surf. Sci. **205**, 274 (2003).
- [34] L.G. Kudryashova, M.S. Kazantsev, V.A. Postnikov, V.V. Bruevich, Y.N. Luponosov, N.M. Surin, O.V. Borshchev, S.A. Ponomarenko, M.S. Pshenichnikov, D.Y. Paraschuk. ACS Appl. Mater. Interfaces **8**, 10088 (2016).
- [35] А.С. Комолов, Э.Ф. Лазнева, Н.Б. Герасимова, В.С. Соболев, Ю.А. Панина, С.А. Пшеничнюк, Н.Л. Асфандиаров. ФТТ **61**, 598 (2019).
- [36] D. Ozdal, N.P. Aydinlik, J.B. Vodarpati, H. Icil. Photochem. Photobiol. Sci. **16**, 262 (2017).
- [37] А.С. Комолов, Э.Ф. Лазнева, Н.Б. Герасимова, Ю.А. Панина, А.В. Барамыгин, Г.Д. Зашихин, С.А. Пшеничнюк. ФТТ **58**, 367 (2016).
- [38] I. Hill, D. Milliron, J. Schwartz, A. Kahn. Appl. Surf. Sci. **166**, 354 (2000).
- [39] A.S. Komolov, P.J. Moeller. Synth. Met. **138**, 119 (2003).
- [40] I.G. Hill, A. Kahn, J. Cornil, D.A. dos Santos, J.L. Bredas. Chem. Phys. Lett. **317**, 444 (2000).
- [41] A.P. Hitchcock, P. Fischer, A. Gedanken, M.B. Robin. J. Phys. Chem. **91**, 531 (1987).
- [42] J.G. Chen. Surf. Sci. Rep. **30**, 1 (1997).
- [43] 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).

Редактор Т.Н. Василевская