

## Плотность свободных электронных состояний полупроводниковых пленок молекул нафталина и дифенилфталида, модифицированных электроактивными функциональными группами

© А.С. Комолов<sup>1</sup>, Э.Ф. Лазнева<sup>1</sup>, Н.Б. Герасимова<sup>1</sup>, А.В. Барамыгин<sup>1</sup>, В.С. Соболев<sup>1</sup>,  
С.А. Пшеничнюк<sup>2</sup>, Н.Л. Асфандияров<sup>2</sup>, В.А. Крайкин<sup>3</sup>, В. Handke<sup>4</sup>

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

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

<sup>3</sup> Уфимский институт химии Уфимского федерального исследовательского центра РАН,  
Уфа, Россия

<sup>4</sup> AGH University of Science and Technology, Faculty of Materials Science and Ceramics, Al. Mickiewicza 30,  
30-059 Kraków, Poland

E-mail: a.komolov@spbu.ru

Поступила в Редакцию 20 января 2020 г.

В окончательной редакции 5 февраля 2020 г.

Принята к публикации 18 февраля 2020 г.

Приведены результаты сравнения структуры максимумов плотности незаполненных электронных состояний (DOUS) сверхтонких пленок ангидрида нафталин-1,4,5,8-тетракарбоновой кислоты (NTCDA) и ангидрида нафталин-1,8-дикарбоновой кислоты (NDCA) и двух видов пленок на основе фталидов: 3,3-бис(фенил)фталида (DPP) и 3,3-бис(фенил)фталида-4', 4'-дикарбоновой кислоты (DPP-DCA). Измерения структуры незаполненных электронных состояний исследованных пленок, толщиной 8–10 nm, проводили методом спектроскопии полного тока (TCS) в энергетическом диапазоне от 5 eV до 20 eV выше уровня Ферми. Для анализа экспериментальных результатов проводили построение модельных спектров полного тока и DOUS зависимостей на основе результатов расчета энергий орбиталей исследованных молекул методом теории функционала плотности (DFT) на уровне B3LYP/6-31G(d). Различие в DOUS спектрах пленок NTCDA и NDCA состоит в сдвиге основных DOUS максимумов пленки NTCDA в сторону меньших значений энергий примерно на 1 eV при энергиях менее 12.5 eV, а при более высоких энергиях максимумы DOUS сдвинуты на 1.5–2 eV. Энергетическое положение максимумов спектров полного тока пленок DPP–DCA и DPP практически не меняется при использовании различных подложек: высокоупорядоченного пиролитического графита (HOPG) и послойно осажденного CdS. Относительные интенсивности максимумов различаются при использовании различных подложек. Характерный сдвиг максимумов спектров полного тока пленок DPP–DCA составляет примерно 1 eV при энергиях менее 12.5 eV над уровнем Ферми и 1.5–2 eV а при более высоких энергиях, по сравнению с положением соответствующих максимумов пленок DPP.

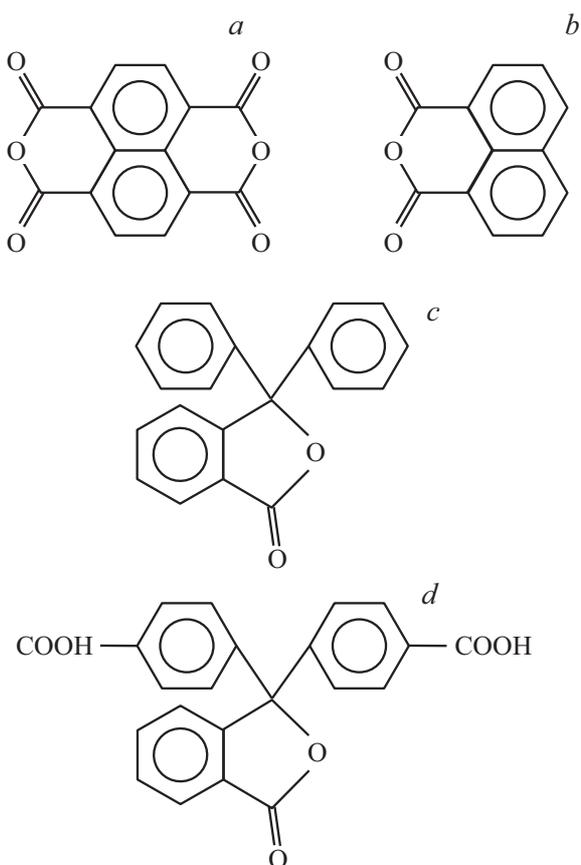
**Ключевые слова:** сопряженные органические молекулы, ультратонкие пленки, электронные свойства, низкоэнергетическая электронная спектроскопия, плотность электронных состояний.

DOI: 10.21883/FTT.2020.07.49483.006

### 1. Введение

Изучение электронных свойств ультратонких сопряженных органических покрытий на поверхности твердых тел представляет значительный интерес в плане развития органической электроники [1–4]. Поверхности оксидов металлов, диоксида кремния, оксида графена, высокоупорядоченного пиролитического графита рассматривают как перспективные для нанесения сплошных и наноструктурированных сопряженных органических покрытий [2, 5–8]. При этом установлено, что влияние подложки распространяется на достаточно узкий пограничный слой в органической пленке, толщиной не более 5 nm. В целях оптимизации приборных характеристик органических электронных устройств интерес

представляет допирование органического материала. Часто применяют введение в состав молекул электроактивных замещающих групп, таких как карбоксильные, азотосодержащие, фторосодержащие [9–12]. Показано, что введение в состав молекул электрон-акцепторных заместителей приводит к понижению положения энергетических уровней, соответствующих границам валентной энергетической зоны и зоны проводимости в этих материалах. Это представляет значительный фундаментальный интерес в плане установления взаимосвязи структуры сопряженных органических молекул и расположения энергетических зон электронных состояний в материалах на основе таких молекул [13–16]. Электропроводность тонких пленок фталидов обусловлена формированием электронных состояний в запрещенной зоне



**Рис. 1.** Структурные формулы молекул (а) нафталин-1,4,5,8-тетракарбонового диангидрида (NTCDA), (b) нафталин-1,8-дикарбонового ангидрида (NDCA), (c) 3,3-бис(фенил)фталид дифенилфталид (DPP) и (d) 3,3-бис(фенил)фталид-4', 4'-дикарбоновой кислоты (DPP-DCA).

этих материалов при разрыве ковалентной связи С—О в составе пятичленного цикла в молекуле [17,18]. Достаточно перспективными считают ультратонкие пленки на основе молекул замещенных периленов и нафталинов, такие как перилен-тетракарбоновый диангидрид (PTCDA) и нафталин-тетракарбоновый диангидрид (NTCDA) [3,13,19].

Для изучения плотности незаполненных электронных состояний (DOUS) применяют методики по изучению резонансного захвата электронов [20–22], направленных на исследования органических молекул в газовой фазе, и метод спектроскопии полного тока (TCS) [23,24], позволяющий исследовать ультратонкие органические пленки на поверхности твердого тела. При использовании этих видов экспериментальных методик совместно 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, из которых эти материалы сформированы [25]. В данной статье приведены результаты исследования DOUS сверхтонких пленок на

основе молекул замещенного нафталина и дифенилфталид с различным количеством функциональных групп. Приведено сравнение результатов исследования DOUS пленок NTCDA и дикарбоксильно замещенного нафталина NDCA и двух видов пленок на основе фталидов: дифенилфталид (DPP) и дифенилфталид-дикарбоновой кислоты (DPP-DCA) (рис. 1). Исследования проводили в энергетическом диапазоне от 5 eV до 20 eV выше уровня Ферми (EF) методом TCS и методами теоретических расчетов с использованием теории функционала плотности (DFT).

## 2. Эксперимент

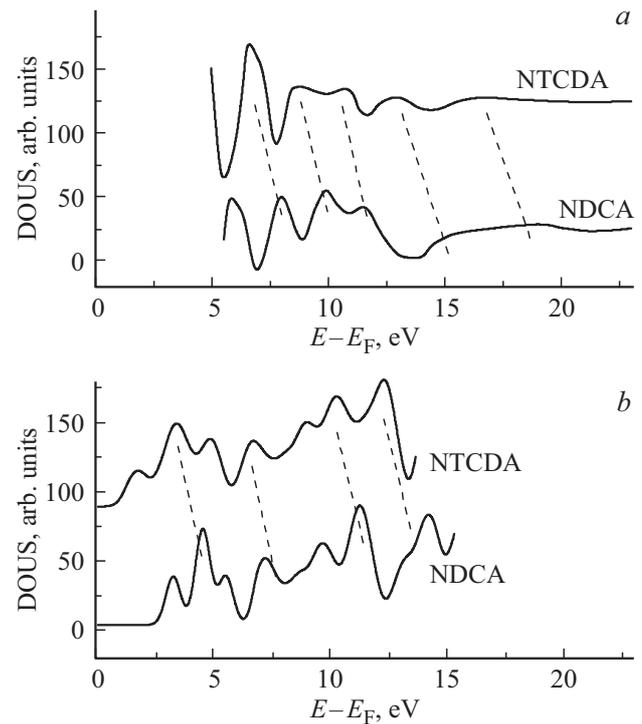
Исследованные пленки осаждали термически в вакууме с использованием следующих реактивов. Использовали нафталин-1,4,5,8-тетракарбоновый диангидрид (NTCDA), нафталин-1,8-дикарбоновый ангидрид (NDCA), доступные коммерчески (Sigma-Aldrich), и реактивы 3,3-бис(фенил)фталид (DPP) и 3,3-бис(фенил)фталид-4, 4'-дикарбоновой кислоты (DPP-DCA) (рис. 1), идентичные исследованным в работах [8,26]. 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 поверхность  $(\text{SiO}_2)/n\text{-Si}$ , высокоупорядоченного пиролитического графита (HOPG — Highly Oriented Pyrolytic Graphite) и поверхность полупроводника CdS, приготовленную методом молекулярного наслаивания (atomic layer deposition, ALD). Для синтеза CdS использовали реагенты диметил-Cd и  $\text{H}_2\text{S}$ , в атмосфере которых поочередно экспонировали поверхность кремниевой подложки. Время обработки подложки реагентом составляло порядка  $10^{-2}$  s, время эвакуации остатков реагента в потоке азота составляло 4–5 s. Температуру во время синтеза поддерживали около  $200^{\circ}\text{C}$ . Таким образом, производили поочередное нанесение слоев атомов Cd и S. Для осаждения органических пленок использовали CdS толщиной  $100 \pm 10$  nm. Термическое осаждение в вакууме органических материалов проводили со скоростью 0.1–0.3 nm/min. Подложки в процессе осаждения находились при комнатной температуре. Во время осаждения пленок допускали повышение давления на порядок от базового давления в вакуумной камере. Как было показано для ряда различных пленок замещенных нафталинов и периленов, такая процедура осаждения приводит к формированию некристаллического органического слоя [3,27]. Измерения электронных характеристик сформированных пленок проводили методом спектроскопии полного тока (TCS) [15,23]. В методике TCS параллельный пучок электронов площадью поперечного сечения  $0.2\text{--}0.4\text{ мм}^2$  тестирует исследуемую поверхность, и регистрируется производная по энергии  $S(E)$ , проходящего через образец тока.  $S(E)$  имеет отчетливую зависимость от энергии падающих электронов [23].

В эксперименте энергию варьировали в диапазоне от 0 eV до 25 eV. Структура максимумов  $S(E)$ , тонкая структура спектров полного тока (ТССПТ), отражает изменения вероятности входа падающих низкоэнергетических электронов в исследуемый образец при выбранной энергии  $E$ . Таким образом, ТССПТ связана с зависимостью от энергии плотности незаполненных электронных состояний (DOUS) исследуемой поверхности [23,28,29]. Теоретический анализ DOUS исследованных пленок проводили с помощью метода теории функционала плотности (DFT) с использованием функционала B3LYP [30] в базисе 6-31G(d) и программы Gaussian [31]. К значениям энергий орбиталей (virtual orbital energies, VOE), полученным в результате DFT расчета, применяли процедуру корректировки, подробно рассмотренную и опробованную для малых сопряженных органических молекул в работах [32–34]. В результате этой процедуры получают скорректированные значения энергий орбиталей (scaled virtual orbital energies, SVOE). В случае  $\pi^*$  молекулярных орбиталей справедливо выражение  $SVOE = (VOE + 1.14)/1.24$ , а в случае  $\sigma^*$  орбиталей — выражение  $SVOE = (VOE + 0.97)/0.79$  [29,32,33].

### 3. Результаты и обсуждение

Экспериментальные зависимости тонкой структуры спектров полного тока (ТССПТ) пленок NTCDA и NDCA измеряли при осаждении этих органических покрытий толщиной до 10 nm. Причем осаждение производили в той же вакуумной камере, в которой проводили измерения методом TCS. Было показано, что пленки создают сплошное покрытие поверхности (SiO<sub>2</sub>) $n$ -Si подложки [35]. На основе ТССПТ зависимостей пленок NTCDA и NDCA построены зависимости плотности незаполненных электронных состояний в зоне проводимости (DOUS) (рис. 2, *a*). Как было показано ранее в работах [15,23], структура максимумов DOUS может быть построена на основе ТССПТ в виде производной зависимости  $S(E)$  с обратным знаком: —  $dS(E)/dE$ . DOUS пленок NTCDA и NDCA в энергетическом диапазоне от 7 до 20 eV выше  $E_F$  представлена пятью отчетливо выраженными максимумами, обозначенными наклонными пунктирными линиями на рис. 2, *a*. В случае пленки NDCA наблюдается еще один максимум DOUS при энергии около 6 eV выше  $E_F$ , аналогичный максимум пленки NTCDA расположен при энергии несколько ниже 5 eV, то есть на границе экспериментально измеряемого диапазона, поэтому наблюдается лишь частично.

Для анализа экспериментальных зависимостей DOUS проведен расчет энергий орбиталей исследованных молекул NTCDA и NDCA методом теории функционала плотности (DFT) на уровне B3LYP/6-31G(d). Результаты DFT расчета дополнительно корректировали по формуле SVOE [32–34], как обсуждалось подробнее в разделе 2. Затем производили учет энергии поляризации среды в конденсированном состоянии, возникающей при объ-



**Рис. 2.** DOUS исследованных сопряженных органических пленок NTCDA и NDCA. *a* — DOUS зависимости, построенные на основе результатов TCS эксперимента. *b* — DOUS зависимости, построенные на основе результатов расчетов с использованием методов DFT на уровне B3LYP/6-31G (*d*). Наклонные штриховые линии нанесены для удобства сравнения положения максимумов.

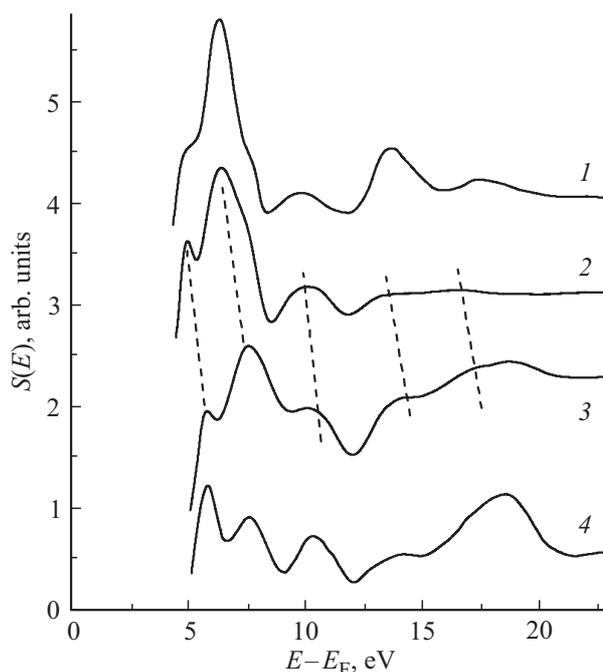
единении отдельных молекул в модельную пленку [36]. В результате операции свертки энергий орбиталей с функцией Гаусса, имеющей полную ширину на половине высоты (full width at half maximum, FWHM) 0.5 eV, построены расчетные зависимости DOUS (рис. 2, *b*). При сравнении теоретических и экспериментальных зависимостей наилучшее соответствие положения DOUS максимумов наблюдается в диапазоне от 7 eV до 12 eV выше  $E_F$  (рис. 2, *a* и *b*). В этом диапазоне расположены три отчетливых максимума DOUS, которые наблюдаются в экспериментальных и в теоретических зависимостях для обоих видов исследованных пленок NTCDA и NDCA. Значения энергий ниже 5 eV над  $E_F$  выходят за рамки диапазона, в котором DOUS может быть установлена с использованием результатов TCS эксперимента. В этом диапазоне информацию о DOUS можно получить из расчетных зависимостей (рис. 2, *b*). Так, при энергиях от 0 eV до 6 eV выше  $E_F$  DOUS каждой из пленок NTCDA и NDCA имеет по три максимума. Причем максимум нижней незаполненной молекулярной орбитали (lowest unoccupied molecular orbital, LUMO) расположен примерно при 2 eV в случае пленки NTCDA и примерно при 3 eV в случае пленки NDCA (рис. 2, *b*). При энергии выше 12 eV над  $E_F$  экспериментальные DOUS

демонстрируют достаточно широкие максимумы как в случае пленок NTCDA, так и в случае NDCA (рис. 2, *a*). Вместе с этим для расчетных зависимостей DOUS при таких значениях энергии характерна отчетливая структура, состоящая из более узких максимумов. Это различие следует связывать с тем, что при увеличении энергии падающего электрона более 12 eV выше  $E_F$  происходит уширение максимумов экспериментальной ТССПТ. А использование функции Гаусса с фиксированным значением FWHM при построении теоретических DOUS зависимостей такого уширения максимумов при изменении энергии не учитывает.

Результаты проведенного DFT расчета с помощью используемого программного пакета [30] позволили также визуализировать пространственное распределение вакантных орбиталей молекул NTCDA и NDCA. В нашей предыдущей работе [35] было показано, что в рамках исследованного энергетического диапазона можно выделить три области, в которых для пленок NTCDA и NDCA наблюдаются максимумы DOUS разного типа. Так были установлены области DOUS максимумов, образованных преимущественно  $\pi^*$  орбиталями, и максимумов, образованных преимущественно  $\sigma^*$  орбиталями. В диапазоне энергий от 8.0 eV до 12.5 eV обнаружена переходная область DOUS, максимумы которой образованы и  $\pi^*$ , и  $\sigma^*$  орбиталями. Формирование DOUS максимумов, имеющих смешанную,  $\pi^*$  и  $\sigma^*$ , природу наблюдали ранее при исследованиях пленок конденсированного бензола, производных фуллеренов и сопряженных олигомеров [29,37,38].

Различия в спектрах DOUS исследованных пленок NTCDA и NDCA авторы предлагают связывать с различием структуры этих молекул, в том числе с различием области сопряжения в ароматическом остове этих молекул [39]. Так молекулу NTCDA можно сконструировать путем добавления функциональной группы, дикарбоксильного диангирида, к молекуле NDCA (рис. 1, *a* и *b*). Наиболее отчетливое различие в спектрах пленок NTCDA и NDCA представлено сдвигом основных DOUS максимумов пленки NTCDA в сторону меньших значений энергий (рис. 2). Величина сдвига максимумов составляет примерно 1 eV при энергиях менее 12.5 eV, а максимумы DOUS при более высоких энергиях сдвинуты на 1.5–2 eV, что показано штриховыми линиями на рис. 2. Аналогичный энергетический сдвиг максимумов вакантных электронных орбиталей наблюдался и для молекул NTCDA и NDCA при исследованиях методом спектроскопии электронного захвата [25].

Зависимости  $S(E)$ , то есть ТССПТ, измеренные при исследовании пленок DPP и DPP-DCA, толщиной около 10 nm, представлены на рис. 3. Кривые 2 и 3 на рис. 3 соответствуют пленкам на поверхности HOPG, кривые 1 и 4 — пленкам на поверхности послойно осажденного методом ALD. Наклонные штриховые линии нанесены для удобства сравнения положения максимумов



**Рис. 3.** Зависимости  $S(E)$  исследованных органических пленок DPP и DPP-DCA, полученные в результате TCS измерений. Кривые 2 и 3 соответствуют пленкам на поверхности HOPG, кривые 1 и 4 — пленкам на поверхности CdS, послойно осажденного методом ALD. Наклонные штриховые линии нанесены для удобства сравнения положения максимумов.

максимумов ТССПТ пленок DPP-DCA (рис. 3, кривые 1 и 2) и пленок DPP (рис. 3, кривые 3 и 4), которое практически не меняется при использовании различных подложек. Вместе с тем относительные интенсивности максимумов различаются при использовании различных подложек. Максимумы ТССПТ содержат экспериментально измеренную информацию о расположении DOUS максимумов, так как отражают структуру расположения нижних границ особенностей DOUS [15,23,40]. В случае пленки DPP наиболее отчетливые максимумы ТССПТ расположены при 6 eV, 7.5 eV, 10.5 eV, 14 eV, и наблюдается более широкий максимум с двумя вершинами при энергиях 17 eV и 18.5 eV. Присоединение к молекуле DPP карбоксильных групп и формирование, таким образом, молекулы DPP-DCA приводит к характерному сдвигу основных максимумов ТССПТ пленки DPP-DCA, по сравнению с ТССПТ пленки DPP (рис. 3, кривые 2 и 3). Так, энергетический сдвиг максимумов составляет примерно 1 eV при энергиях менее 12.5 eV над  $E_F$ , а при более высоких энергиях величина сдвига несколько больше 1.5–2 eV. Для наглядности это отмечено наклонными пунктирными линиями на рис. 3. Для установления  $\pi^*$  или  $\sigma^*$  природы максимумов ТССПТ исследованных пленок DPP и DPP-DCA планируется привлечь теоретические исследования. На сегодняшний день, опубликованы результаты расчетов энергий расположения четырех низколежащих  $\pi^*$  орбиталей молекул DPP [18,42]. Со-

гласно анализу энергетического положения орбиталей в пленках DPP [26] и с учетом значения энергии поляризации среды в конденсированном состоянии [36], следует полагать, что два низкоэнергетических максимума в ТССПТ обеих пленок DPP и DPP-DCA соответствуют границам энергетических зон  $\pi^*$  электронных состояний DOUS этих пленок.

#### 4. Заключение

В энергетическом диапазоне от 5 eV до 20 eV выше уровня Ферми установлены основные различия структуры максимумов DOUS сверхтонких пленок тетракарбоксильно замещенного нафталина (NTCDA) и дикарбоксильно замещенного нафталина (NDCA) и двух видов пленок на основе фталидов: DPP и DPP-DCA. Различие в DOUS спектрах пленок NTCDA и NDCA состоит в сдвиге основных DOUS максимумов пленки NTCDA в сторону меньших значений энергий примерно на 1 eV при энергиях менее 12.5 eV, а при более высоких энергиях максимумы DOUS сдвинуты на 1.5–2 eV. Присоединение к молекуле DPP карбоксильных групп, что соответствует формированию молекулы DPP-DCA, приводит к характерному сдвигу основных максимумов ТССПТ в сторону меньших значений энергий электрона. Величина сдвига ТССПТ максимумов составляет примерно 1 eV при энергиях менее 12.5 eV над уровнем Ферми и 1.5–2 eV при более высоких энергиях.

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии у них конфликта интересов.

#### Финансирование работы

TCS исследования пленок замещенных фталидов выполнены при поддержке гранта Российского Научного Фонда № 19-13-00021. Исследования структур на основе замещенного нафталина выполнены при поддержке грантов РФФИ (18-03-00020), формирование покрытий CdS выполнены при поддержке гранта РФФИ (20-03-00026). В работе использовали оборудование Научного парка СПбГУ „Физические методы исследования поверхности“ и „Инновационные технологии композитных наноматериалов“.

#### Список литературы

- [1] S. Braun, W. Salaneck, M. Fahlman. *Adv. Mater.* **21**, 1450 (2009).
- [2] A.L. Shu, W.E. McClain, J. Schwartz, A. Kahn. *Organic Electron.* **15**, 2360 (2014).
- [3] 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).
- [4] A.N. Aleshin, P.S. Krylov, A.S. Berestennikov, I.P. Shcherbakov, V.N. Petrov, V.V. Kondratiev, S.N. Eliseeva. *Synth. Met.* **217**, 7 (2016).
- [5] B. Handke, L. Klita, W. Niemiec. *Surf. Sci.* **666**, 70 (2017).
- [6] И.А. Аверин, А.А. Карманов, В.А. Мошников, И.А. Пронин, С.Е. Игошина, А.П. Сигаев, Е.И. Теруков. *ФТТ* **57**, 2304 (2015).
- [7] M. Krzywiecki, L. Grzadziel, A. Sarfraz, D. Iqbal, A. Szwajca, A. Erbe. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 10004 (2015).
- [8] A.S. Komolov, Y.M. Zhukov, E.F. Lazneva, A.N. Aleshin, S.A. Pshenichnyuk, N.B. Gerasimova, Yu.A. Panina, G.D. Zashikhin, A.V. Baramygin. *Mater. Des.* **113**, 319 (2017).
- [9] A.S. Komolov, P.J. Møller. *Appl. Surf. Sci.* **212-213**, 497 (2003).
- [10] Y. Fu, W. Shen, M. Li. *Polymer* **49**, 2614 (2008).
- [11] A.Yu. Sosorev, M.K. Nuraliev, E.V. Feldman, D.R. Maslennikov, O.V. Borshchev, M.S. Skorotetsky, N.M. Surin, M.S. Kazantsev, S.A. Ponomarenko, D.Yu. Paraschuk. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21**, 11578 (2019).
- [12] А.Е. Почтенный, А.Н. Лаппо, И.П. Ильюшонок. *ФТТ* **60**, 255 (2018).
- [13] D. Ozdal, N.P. Aydinlik, J.B. Bodapati, H. Icil. *Photochem. Photobiol. Sci.* **16**, 262 (2017).
- [14] C. Farley, N.V.S.D.K. Bhupathiraju, B.K. John, C.M. Drain. *J. Phys. Chem. A* **120**, 7451 (2016).
- [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, P.J. Møller, Y.G. Aliaev, E.F. Lazneva, S.A. Akhremchik, F.S. Kamounah, J. Mortenson, K. Schaumburg. *J. Molec. Struct.* **744/747**, 145 (2005).
- [17] А.Н. Лачинов, Э.Р. Жданов, Р.Г. Рахмеев, Р.Б. Салихов, В.А. Антипин, *ФТТ* **52**, 181 (2010).
- [18] Н.Л. Асфандиаров, С.А. Пшеничнюк, Р.Г. Рахмеев, А.Н. Лачинов, В.А. Крайкин. *ЖТФ* **88**, 1085 (2018).
- [19] R. Tonner, P. Rosenowa, P. Jakob. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 6316 (2016).
- [20] P.D. Burrow, A.E. Howard, A.R. Johnston, K.D. Jordan. *J. Phys. Chem.* **96**, 7570 (1992).
- [21] S.A. Pshenichnyuk, A.S. Komolov. *J. Phys. Chem. Lett.* **6**, 7, 1104 (2015).
- [22] S.A. Pshenichnyuk, A. Modelli, E.F. Lazneva, A.S. Komolov. *J. Phys. Chem. A*, **118**, 6810 (2014).
- [23] 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).
- [24] A.S. Komolov, E.F. Lazneva, S.N. Akhremtchik. *App. Surf. Sci.* **256**, 2419 (2010).
- [25] S.A. Pshenichnyuk, A.S. Komolov. *J. Phys. Chem. A* **116**, 1, 761 (2012).
- [26] А.С. Комолов, Э.Ф. Лазнева, Н.Б. Герасимова, Н.Б. Герасимова, В.С. Соболев, С.А. Пшеничнюк, Н.Л. Асфандиаров, В.А. Крайкин, В. Handke. *ФТТ* **61**, 1960 (2019).
- [27] S. Heutz, A.J. Ferguson, G. Rumbles, T.S. Jones. *Organic Electr.* **3**, 119 (2002).
- [28] I. Bartos. *Progr. Surf. Sci.* **59**, 197 (1998).
- [29] 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).
- [30] A.D. Becke. *J. Chem. Phys.* **98**, 5648 (1993).

- [31] 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, 2009.
- [32] P.D. Burrow, A. Modelli. SAR QSAR Env. Res. **24**, 647 (2013).
- [33] A.M. Scheer, P.D. Burrow. J. Phys. Chem. B **110**, 17751 (2006).
- [34] N.L. Asfandiarov, S.A. Pshenichnyuk, A.S. Vorob'ev, E.P. Nafikova, A. Modelli. Rapid Commun. Mass Spectrom. **29**, 910 (2015).
- [35] А.С. Комолов, Э.Ф. Лазнева, Н.Б. Герасимова, Ю.А. Панина, А.В. Барамыгин, С.А. Пшеничнюк. ФТТ **60**, 799 (2018).
- [36] I.G. Hill, A. Kahn, J. Cornil, D.A. dos Santos, J.L. Bredas. Chem. Phys. Lett. **317**, 444 (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).
- [40] A.S. Komolov, P.J. Moeller. Appl. Surf. Sci. **244**, 573 (2005).
- [41] A.S. Komolov, P.J. Moeller. Synth. Met. **138**, 119 (2003).
- [42] S.A. Pshenichnyuk, A. Modelli, N.L. Asfandiarov, E.F. Lazneva, A.S. Komolov. J. Chem. Phys. **151**, 214309 (2019).

*Редактор Д.В. Жуманов*