

ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИ-N-ЭПОКСИПРОПИЛКАРБАЗОЛА И МОЛЕКУЛ ОРГАНИЧЕСКИХ ПРОВОДНИКОВ

А. В. Кухто ^{1*}, **Н. А. Давиденко** ², И. И. Давиденко ², И. Н. Кухто ³,
Е. В. Мокринская ², Н. Г. Вишневецкий ², Д. Г. Чуприна ², G. A. Mousdis ⁴

УДК 541.14;541.49;541.64;535.5

¹ Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета,
220006, Минск, Беларусь, e-mail: kukhta@bsu.by

² Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко,
01601, Киев, Украина; e-mail: ndav@univ.kiev.ua

³ Институт химии новых материалов НАН Беларуси,
220141, Минск, Беларусь; e-mail: iryna.kukhta@tut.by

⁴ Институт теоретической и физической химии, Национальный греческий исследовательский фонд,
11635, Афины, Греция; e-mail: gmousdis@eie.gr

(Поступила 14 июля 2020)

Исследованы фотопроводящие и фотовольтаические свойства пленочных композитов на основе поли-N-эпоксипропилкарбазола с добавками молекул двух органических проводников — производного тетрагидрофульвалена и производного дитиолен никеля. Установлено, что композиты имеют дырочный тип фотопроводимости, а внутренний фотоэффект определяется фотогенерацией носителей заряда из добавленных молекул и транспортом дырок по донорным фрагментам полимерной матрицы.

Ключевые слова: полимерные композиты, тетрагидрофульвален, дитиолен никеля, фотопроводимость, фотогенерация.

We investigated the photoconducting and photovoltaic properties of thin film composites based on poly-N-epoxypropylcarbazole doped with molecules of two organic conductors, namely, tetrahydrofulvalene and Ni-dithiolen derivatives. It was established that these composites have hole photoconductivity, and the internal photoeffect is determined by the photogeneration of the charge carriers from the added molecules and the charge transport through the donor fragments of the polymeric matrix.

Keywords: polymeric composites, tetrahydrofulvalene, Ni-dithiolen, photoconductivity, photogeneration.

Введение. Ряд органических молекул, например тетрагидрофульвалены и дитиолены никеля, способны образовывать электропроводящие кристаллические структуры от полупроводников до суперпроводников [1, 2]. Эти соединения характеризуются широкими полосами спектров поглощения в видимой и ближней ИК-областях [3], подобно серосодержащим фталоцианинам [4], высокой термодинамической стабильностью, а также сильными электроактивными свойствами [1, 2]. Наряду с достоинствами соединения имеют недостатки: плохо обрабатываются, являются хрупкими, формирование тонких пленок на их основе из растворов дает очень неоднородные пленки, состоящие из независимых нано- и микрокристаллов. Поэтому для расширения практических применений представ-

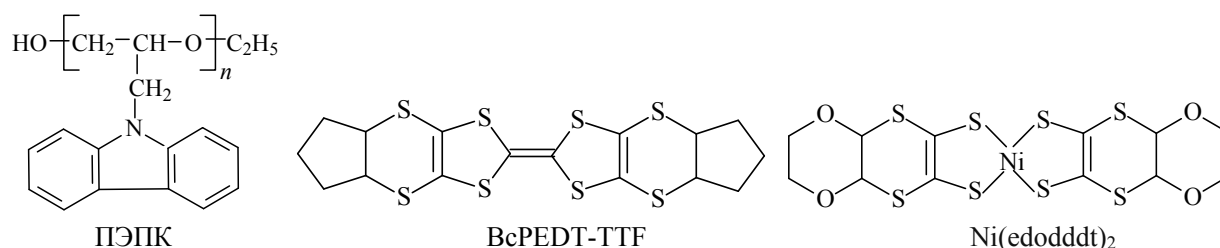
PHOTOPHYSICAL PROPERTIES OF COMPOSITES BASED ON POLY-N-EPOXYPROPYLCARBAZOLE AND MOLECULES OF ORGANIC CONDUCTORS

A. V. Kukhta ^{1*}, **N. A. Davidenko** ², I. I. Davidenko ², I. N. Kukhta ³, E. V. Mokrinskaya ², N. G. Vishnevskii ², D. G. Chuprina ², G. A. Mousdis ⁴ (¹ Institute for Nuclear Problems of Belarusian State University, Minsk, 220006, Belarus; e-mail: kukhta@bsu.by; ² Taras Shevchenko Kiev National University, Kiev, 01601, Ukraine, e-mail: ndav@univ.kiev.ua; ³ Institute of the Chemistry of New Materials of National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, 220141, Belarus; e-mail: iryna.kukhta@tut.by; ⁴ Institute of Theoretical and Physical Chemistry of National Hellenic Research Foundation, Athens, 11635, Greece; e-mail: gmousdis@eie.gr)

ляет интерес использование этих соединений в полимерных композитах в виде отдельных молекул. Широкий спектр поглощения и электронодонорные свойства таких молекул дают возможность использовать их в качестве сенсibilизаторов фотопроводимости, а тонкая полимерная матрица обеспечивает гибкость и механическую прочность материала. Такие композиты могут применяться в оптоэлектронной и энергетической промышленности в качестве активных элементов регистрации, хранения и обработки оптической информации, фотовольтаических преобразователей солнечной энергии и др. [5—12]. В качестве полимера в подобных композитах часто используются карбазолсодержащие полимеры (поливинилкарбазол, полиэпоксипропилкарбазол и др.) [13—17], имеющие хорошие пленкообразующие свойства, оптическую прозрачность и значительную дырочную проводимость благодаря наличию карбазольных фрагментов в полимерной цепи. Неравновесные носители заряда (ННЗ) в фотопроводящем слое возникают при его облучении видимым светом. В возбужденном состоянии молекулы сенсibilизатора могут захватывать электроны с карбазольных фрагментов и тем самым образовывать ННЗ (катион-радикалы карбазола). Во внешнем электрическом поле электронные вакансии (дырки) дрейфуют между соседними карбазольными фрагментами поли-N-эпоксипропилкарбазола (ПЭПК) и образуют ток фотопроводимости. Условием успешного использования фотополупроводниковых полупроводящих полимерных композитов (ППК) для оптоэлектроники и фотовольтаики является высокая подвижность ННЗ, что обеспечивает малое время отклика фотопроводимости на облучение светом, а также широкий спектральный диапазон фоточувствительности, включая ближнюю ИК-область. Первые исследования композитов такого типа, проведенные с простейшим дитиолом никеля [18], показали наличие фотопроводящих и фотовольтаических свойств. Насколько известно авторам, исследования композитов такого типа ранее не проводились.

Цель данной работы — исследование полимерных композитов с добавлением молекул органических проводников (более сложных соединений тетрагидрафульвалена и дитиолен никеля) для выяснения влияния строения молекул органических проводников на фотопроводящие и фотовольтаические свойства.

Эксперимент. В качестве сенсibilизаторов фотопроводимости использованы ди(1,2-циклопентилентитио)тетрагидрафульвален (BcPEDT-TTF) и металлокомплекс ди[4,5-(1,4-диоксан-2,3-диилдитио)-1,3-дитиолен]никеля ($\text{Ni}(\text{edodddt})_2$), синтез и свойства которых описаны в [19, 20]:



Для исследований готовили образцы двух типов: со свободной поверхностью ППК (стеклянная подложка)/ITO/ППК и сэндвич-структур (стеклянная подложка)/ITO/ППК/Ag, где ITO — электропроводящий слой $\text{SnO}_2:\text{In}_2\text{O}_3$. Отфильтрованные растворы BcPEDT-TTF, $\text{Ni}(\text{edodddt})_2$ и ПЭПК в хлористом метиле наносили на стеклянную подложку со слоем ITO, высушивали в течение 24 ч при комнатной температуре, затем в течение 48 ч в сушильном шкафу при 80 °С. Содержание BcPEDT-TTF, $\text{Ni}(\text{edodddt})_2$ в ПЭПК 5 мас.%. Концентрация 5 мас.% в ППК обеспечивает высокую эффективность фотогенерации ННЗ, при ней еще не образуются агрегаты сенсibilизатора [21, 22]. Толщина ППК ~1.5 мкм измерена с помощью интерференционного микроскопа МИИ-4. Электрод Ag готовили путем нанесения серебряной пасты на поверхность ППК.

Для образцов со свободной поверхностью ППК измерены спектры поглощения (оптической плотности D), потенциал (V_{PH}) свободной поверхности ППК относительно электрода ITO до облучения светом со стороны прозрачного электропроводящего слоя ITO. Фотовольтаические свойства образцов оценены по электрическому потенциалу ($V_{\text{PH}}^{\text{max}}$) поверхности на квазистационарном участке зависимости $V_{\text{PH}}(t)$, для определения фотовольтаических характеристик применена методика измерения потенциала поверхности с помощью динамического зонда (метод Кельвина [23]). Выбор методики обоснован тем, что в этом случае отсутствует влияние на фотопроцессы в ППК контактной разности потенциала, которая возникает в образцах сэндвич-структуры с электродами из разных материа-

лов. В качестве зонда использована Ag-пластина диаметром 4 мм. Частота колебаний зонда 4 кГц. В тех же образцах измерены электрический потенциал (V_p) поверхности ППК после зарядки в коронном разряде без облучения и при облучении светом, его изменение за время (t) облучения и после выключения света. Коронный разряд создавался при положительном и отрицательном потенциалах коронирующего электрода относительно слоя ИТО. Сразу после зарядки в коронном разряде максимальное значение потенциала поверхности пленок относительно слоя ИТО $V_p^{\max} = \pm(180\text{—}200)$ В, что соответствует напряженности электрического поля внутри пленки $\sim 10^8$ В/м. Для создания коронного разряда использовано специально разработанное устройство, в котором коронный разряд образуется благодаря приложению постоянного электрического напряжения ~ 10 кВ между слоем ИТО и металлической нитью над поверхностью ППК. Для измерения V_p , как и V_{ph} , использован метод Кельвина. Скорость спада потенциала поверхности ППК оценена по отрезку времени $t_{1/2}$, за который V_p^{\max} уменьшается в два раза. Эту скорость сравнивали по значениям $t_{1/2}$ для положительной $t_{1/2}(+)$ и отрицательной $t_{1/2}(-)$ зарядки поверхности ППК. В образцах сэндвич-структуры измерена плотность тока фототока (j_{ph}) в зависимости от электрического напряжения (U), прикладываемого к электрическим контактам. Ток j_{ph} и его квазистационарное значение (j_{ph}^{\max}) определены как добавка к току проводимости после установления переходных процессов в результате включения электрического напряжения и облучения образцов светом. Напряжение U изменялось в диапазоне 0—300 В. Кроме того, для образцов сэндвич-структуры измерены тангенс диэлектрических потерь $\text{tg}\delta$ и емкость C . В качестве источника света использован белый светодиод. Интенсивность света, падающего на образец в активную область зонда со стороны стеклянной подложки, ~ 10 Вт/м². Измерения проведены при комнатной температуре.

Для более глубокого понимания оптических и электрофизических свойств изучаемых соединений, анализа электронного строения молекулярных орбиталей выполнены расчеты молекулярных характеристик с помощью пакета программ квантово-химических вычислений Gaussian 09 в рамках теории функционала плотности (DFT) [24], который дает теоретические данные, хорошо согласующиеся с экспериментом в случае больших сопряженных органических молекул. Поэтому он стал наиболее распространенным способом исследования энергий возбужденных состояний.

Геометрия молекул в свободном состоянии полностью оптимизирована с использованием гибридного обменно-корреляционного функционала B3LYP со средним учетом вклада обменных взаимодействий и наборов базисных функций 6-31G(d), что достаточно для хорошего соотношения теория/эксперимент для молекул данного размера. Граничные условия и алгоритм выбраны стандартные. Рассчитаны основные молекулярные орбитали: верхняя занятая (НОМО) и нижняя вакантная (ЛУМО) (в виде орбиталей натуральных переходов (НТО), объединяющих несколько электронных переходов для формирования полосы перехода), а также распределение заряда на атомах.

Результаты и их обсуждение. Расчеты показывают, что геометрия молекул ВcPEDT-TTF и Ni(edodddt)₂ неплоская, однако имеет плоские области для возможного взаимодействия с карбазольной частью полимера. Результаты расчета основных молекулярных орбиталей НТО представлены на рис. 1. Как видно, при возбуждении заряд частично перетекает с одной части молекулы на другую (в частности, с никеля на лиганды), что может оказать влияние на взаимодействие с полимерной матрицей. Присутствие атомов серы со значительным положительным зарядом (рис. 1) обеспечивает хорошие электроактивные свойства. Эта система является неароматической и легко превращается в ароматическую при окислении. Рассчитаны потенциалы ионизации 4.6 и 5.4 эВ для ВcPEDT-TTF и Ni(edodddt)₂.

На рис. 2 представлены спектры поглощения ПЭПК с добавками ВcPEDT-TTF и Ni(edodddt)₂. Пленки ПЭПК без добавок практически прозрачны во всей видимой области спектра. В коротковолновой области (рис. 2, а) поглощение определяется поглощением ПЭПК и влияние добавок красителей малозаметно. Однако влияние добавок заметно в длинноволновой области (рис. 2, б). Спектр поглощения Ni(edodddt)₂ смещен в длинноволновую сторону по сравнению со спектром ВcPEDT-TTF, длинноволновый максимум поглощения расположен на 955 и 875 нм. Заметных полос взаимодействия молекул добавок с молекулами ПЭПК в данном спектральном диапазоне не обнаружено. Поэтому можно считать, что в исследуемых ППК межмолекулярные комплексы с переносом заряда практически не образуются, а молекулы проводников можно рассматривать как центры поглощения света и центры фотогенерации НЗ. Спектры люминесценции ПЭПК хорошо перекрываются со спектрами поглощения молекул добавок, что создает предпосылки для переноса энергии на них с полимера, а потенциалы ионизации (рассчитанные) значительно меньше потенциала ионизации ПЭПК.

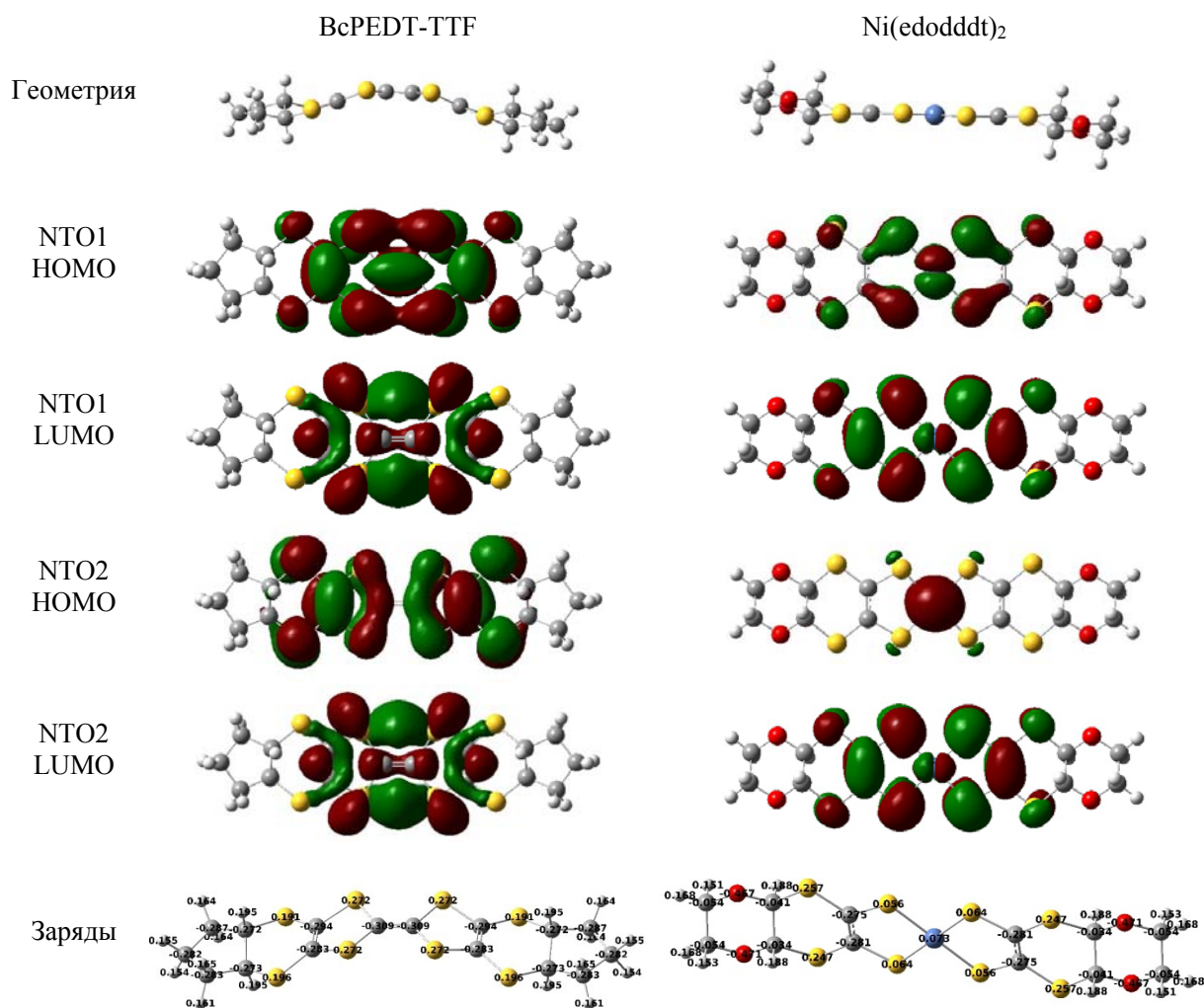


Рис. 1. Геометрия, основные молекулярные орбитали (NTO) для первого и второго электронных переходов и распределение зарядов на атомах в молекулах VcPEDT-TTF и Ni(edodddt)₂

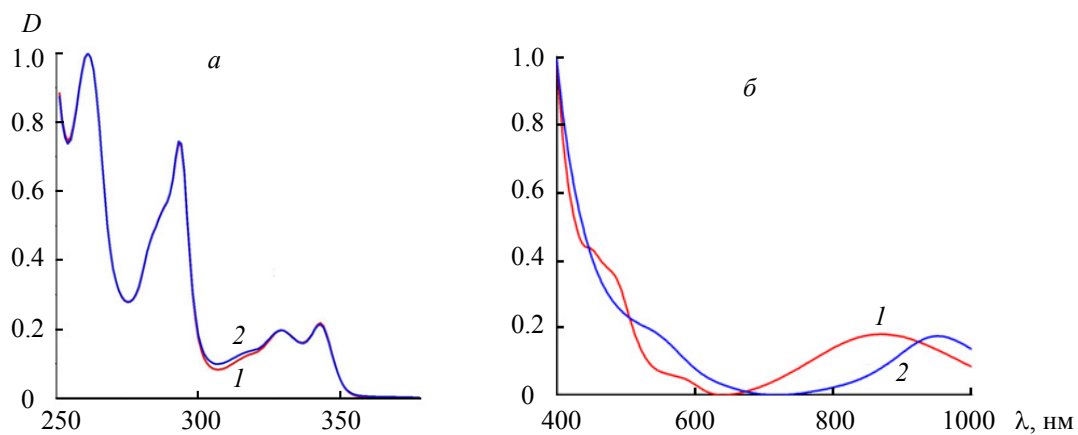


Рис. 2. Нормированные спектры поглощения ПЭПК с добавками VcPEDT-TTF (1) и Ni(edodddt)₂ (2) в коротковолновой (а) и длинноволновой областях (б)

На рис. 3 представлены результаты измерений j_{ph}^{max} от U . Как видно, j_{ph}^{max} больше в образцах с добавками $Ni(edodddt)_2$, чем с $ВсPEDT-TTF$. В образцах сэндвич-структуры с пленками ПЭПК без сенсibiliзирующих добавок при воздействии на них излучением белого светодиода фототок не обнаружен. Следовательно, можно считать, что фотопроводимость в образцах с исследуемыми ППК обусловлена фотогенерацией ННЗ при фотовозбуждении $ВсPEDT-TTF$ и $Ni(edodddt)_2$. Так как концентрация сенсibiliзаторов в ПЭПК одинакова (5 мас.%), полагаем, что на изменение j_{ph}^{max} в исследуемых образцах мало влияет подвижность ННЗ, а в основном их концентрация.

На рис. 4, а представлены результаты измерений V_p в образцах со свободной поверхностью ППК. После начала облучения скорость изменения V_p больше в образцах с добавками $Ni(edodddt)_2$ по сравнению с $ВсPEDT-TTF$. Отметим, что разница в скорости спада V_p связана не с разной подвижностью ННЗ, а с разницей концентрации ННЗ, которая больше в ППК с $Ni(edodddt)_2$. Возможно, последнее обусловлено наличием атома Ni в структуре молекулы, который может влиять на вероятность образования ННЗ на первой стадии фотогенерации из-за большей вероятности их образования. Однако этот вопрос относится к спин-зависимым эффектам в механизме фотогенерации и требует дальнейших исследований.

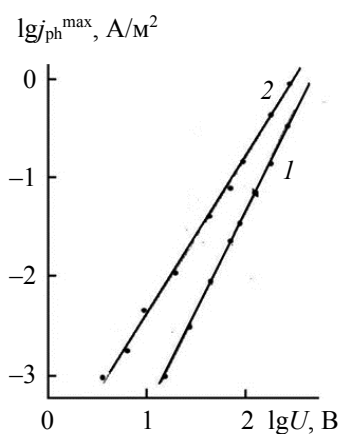


Рис. 3. Зависимости j_{ph}^{max} от U в образцах сэндвич-структуры с пленками ПЭПК с добавками $ВсPEDT-TTF$ (1) и $Ni(edodddt)_2$ (2) при воздействии излучением белого светодиода; интенсивность света $\sim 10 \text{ Вт/м}^2$

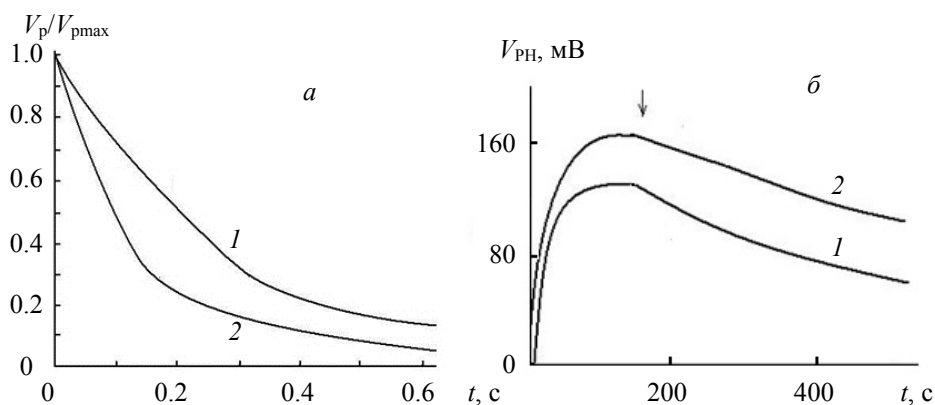


Рис. 4. Зависимости V_p (а) и V_{ph} (б) от времени после начала облучения светом в образцах со свободной поверхностью ППК с пленками ПЭПК с добавками $ВсPEDT-TTF$ (1) и $Ni(edodddt)_2$ (2) и положительной зарядке поверхности ППК в коронном разряде при облучении образцов излучением белого светодиода; интенсивность света $\sim 10 \text{ Вт/м}^2$; момент выключения света указан вертикальной стрелкой

На рис. 4, б представлены зависимости $V_{PH}(t)$, в табл. 1 — основные результаты измерений $t_{1/2}(+)$, $t_{1/2}(-)$, V_{PH}^{max} . После начала облучения образцов со свободной поверхностью ППК величина V_{PH} нарастает и имеет положительный знак, после выключения света релаксация V_{PH} происходит медленнее, чем нарастание, а характерное время этой релаксации не сильно отличается для всех исследуемых образцов и его нельзя описать простой экспоненциальной функцией. Медленный спад сигнала V_{PH} после выключения света можно объяснить накоплением НЗ на энергетических ловушках в ПЭПК во время облучения и медленным освобождением этого заряда после выключения света.

Т а б л и ц а 1. Результаты измерений фотопроводящих и фотовольтаических свойств образцов с пленками ППК с $VcPEDT-TTF$, $Ni(edodddt)_2$

ППК	$t_{1/2}(+)$, с	$t_{1/2}(-)$, с	V_{PH}^{max} , мВ
ПЭПК + 5мас. % $VcPEDT-TTF$	0.1	1.0	120
ПЭПК + 5мас. % $Ni(edodddt)_2$	0.1	0.5	165

Для выяснения особенностей фотопроводящих свойств исследуемых ППК проведены исследования диэлектрических характеристик (рис. 5). Поскольку характер зависимости $tg\delta(f)$ одинаков для исследуемых образцов, можно сделать вывод, что в них присутствуют однотипные заряженные центры (НЗ и, возможно, центры с электрическими дипольными моментами). Поэтому при облучении светом в образцах ППК с $VcPEDT-TTF$, $Ni(edodddt)_2$ должны образовываться однотипные ННЗ.

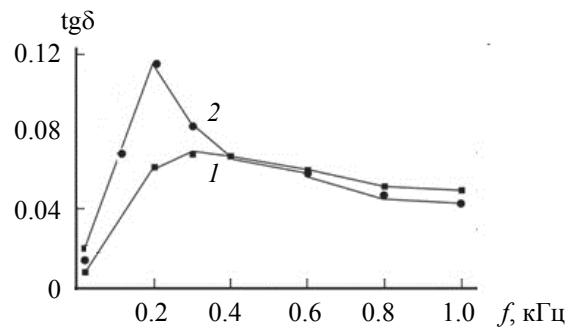


Рис. 5. Зависимости $tg\delta$ от частоты f приложенного электрического напряжения 5 В в образцах сандвич-структуры с пленками ПЭПК с добавками $VcPEDT-TTF$ (1) и $Ni(edodddt)_2$ (2)

Исходя из полученных результатов (см. рис. 3—5), можно предположить, что ППК на основе ПЭПК с $Ni(edodddt)_2$ имеют большую фоточувствительность по сравнению с $VcPEDT-TTF$. Это может быть причиной разницы V_{PH}^{max} для этих ППК. Поскольку использованы образцы со свободной поверхностью ППК, следует считать, что фотовольтаический эффект в них возникает из-за диффузии ННЗ. Диффузия НЗ вызвана возникновением градиента концентрации подвижных НЗ, которая больше вблизи облучаемого электрода ГТО. Такой диффузионный механизм фотовольтаического эффекта (эффект Дембера) характерен для фотополупроводниковых материалов, в которых при облучении образуются разноименные НЗ (электроны и дырки) с различающимися подвижностями [25]. Следовательно, в образцах с исследуемыми ППК фотовольтаический эффект определяется фотогенерацией электронно-дырочных пар, транспортом положительных НЗ (дырок) к свободной поверхности ППК, а менее подвижные отрицательные НЗ вместе с захваченными дырками создают объемный заряд. Наличие объемного заряда может быть причиной медленного спада V_{PH}^{max} после выключения света. О дырочном типе фотопроводимости исследуемых ППК свидетельствуют результаты измерений $V_p(t)$ (табл. 1) для разной полярности зарядки свободной поверхности в коронном разряде. Это означает, что во внешнем электрическом поле дырки, которые появляются в объеме ППК в результате фотогенерации, с большей скоростью нивелируют отрицательный заряд ионов на поверхности ППК, заряженной в коронном разряде, чем электроны нивелируют положительный заряд такой же природы. Следовательно, подвижность дырок больше, чем электронов.

Причина большей эффективности фотогенерации ННЗ Ni(edodddt)₂ по сравнению с ВcPEDT-TTF может быть связана с влиянием атома металла на спиновую конверсию в фотогенерированных зарядовых парах. Вместе с тем, поскольку количество атомов в молекулах добавок и их структуры различаются слабо, то и интенсивность поглощения почти одинакова. Различие наблюдается только в положении длинноволновых полос. Оптический зазор у Ni(edodddt)₂ (1.29 эВ) меньше, чем у ВcPEDT-TTF (1.42 эВ), что объясняет большую эффективность Ni(edodddt)₂, хотя эффективность обоих молекул высока благодаря наличию электроположительных зарядов серы.

Заключение. Полупроводящие полимерные композиты на основе поли-N-эпоксипропилкарбазола с добавками ВcPEDT-TTF, Ni(edodddt)₂ обладают фотопроводящими и фотовольтаическими свойствами в широком спектральном диапазоне из-за способности молекул ВcPEDT-TTF, Ni(edodddt)₂ к фотогенерации дырок в поли-N-эпоксипропилкарбазоле. Это означает, что молекулы ВcPEDT-TTF, Ni(edodddt)₂ могут быть использованы для создания новых фотопроводящих материалов, в частности, в фотовольтаических преобразователях солнечной энергии. При этом металлокомплекс Ni(edodddt)₂ обладает большей эффективностью фотогенерации неравновесных носителей заряда по сравнению с ВcPEDT-TTF, что может быть связано с влиянием атома металла на спиновую конверсию в фотогенерированных зарядовых парах либо с меньшим оптическим зазором.

- [1] M. Dressel. *Crystals*, **8** (2018) 08332
- [2] R. Kato. *Chem. Rev.*, **104** (2004) 5319—5346
- [3] E. B. Yagubskii, L. A. Kushch, V. V. Gritsenko, O. A. Dyachenko, L. I. Buravov, A. G. Khomenko. *Synth. Met.*, **70**, N 1-3 (1995) 1039—1041
- [4] A. V. Kukhta, E. E. Kolesnik, I. N. Kukhta, A. E. Pochtenny, V. K. Dolgiy, G. A. Mousdis, N. Psaroudakis. *Synth. Met.*, **160** (2010) 2361—2365
- [5] Handbook of Optical Metrology: Principles and Applications, Ed. T. Yoshizawa, CRC Press (2017)
- [6] Elementary Processes in Organic Photovoltaics, Ed. K. Leo, New York, Springer (2016)
- [7] P. Kumar. *Organic Solar Cells: Device Physics, Processing, Degradation, and Prevention*, CRC Press (2016)
- [8] P. Deng, C. H. Y. Ho, Y. Lu, H.-W. Li, S.-W. Tsang, S. K. So, B. S. Ong. *Chem. Commun.*, **53** (2017) 3249—3252
- [9] В. А. Миличко, А. С. Шалин, И. С. Мухин, А. Э. Ковров, А. А. Красилин, А. В. Виноградов, П. А. Белов, К. Р. Симовский. *Успехи физ. наук*, **59** (2016) 801—852 [V. A. Milichko, A. S. Shalin, I. S. Mukhin, A. E. Kovrov, A. A. Krasilin, A. V. Vinogradov, P. A. Belov, C. R. Simovskii. *Sov. Phys. Usp.*, **59**, N 8 (2016) 727—772]
- [10] E. A. Knyazeva, O. A. Rakitin. *Russ. Chem. Rev.*, **85**, N 10 (2016) 1146—1183
- [11] V. V. Rakitin, G. F. Novikov. *Russ. Chem. Rev.*, **86**, N 2 (2017) 99—112
- [12] G. Ding, J. Yuan, F. Jin, Y. Zhang, L. Han, X. Ling, H. Zhao, W. Ma. *Nano Energy*, **36** (2017) 356—365
- [13] Е. В. Мокринская, С. Л. Студинский, В. А. Павлов, Н. Г. Чуприна, В. В. Кравченко, А. И. Маринин, Л. С. Тонкопиева, И. И. Давиденко, Н. А. Давиденко. *Химия высоких энергий*, **51**, № 4 (2017) 278—283 [E. V. Mokrinskaya, S. L. Studzinsky, V. A. Pavlov, N. G. Chuprina, V. V. Kravchenko, A. I. Marinin, L. S. Tonkopyeva, I. I. Davidenko, N. A. Davidenko. *High Energy Chem.*, **51**, N 4 (2017) 263—268]
- [14] Н. А. Давиденко, И. И. Давиденко, С. Л. Студинский, Л. И. Костенко, А. А. Ищенко, Е. В. Мокринская, Л. С. Тонкопиева. *Химия высоких энергий*, **49**, № 6 (2015) 463—468 [N. A. Davidenko, I. I. Davidenko, S. L. Studzinsky, L. I. Kostenko, A. A. Ishchenko, E. V. Mokrinskaya, L. S. Tonkopyeva. *High Energy Chem.*, **49**, N 6 (2015) 420—425]
- [15] N. A. Davidenko, Yu. P. Getmanchuk, E. V. Mokrinskaya, L. R. Kunitskaya, I. I. Davidenko, V. A. Pavlov, S. L. Studzinsky, N. G. Chuprina. *Appl. Opt.*, **53**, N 10 (2014) B242—B247
- [16] N. A. Davidenko, I. I. Davidenko, V. A. Pavlov, N. G. Chuprina, V. V. Kravchenko, N. N. Kuranda, E. V. Mokrinskaya, S. L. Studzinsky. *Appl. Opt.*, **57**, N 8 (2018) 1832—1837
- [17] N. A. Davidenko, A. A. Ishchenko. *Theor. and Experimental Chemistry*, **38**, N 2 (2002) 88—108
- [18] Н. А. Давиденко, И. И. Давиденко, А. В. Кухто, И. Н. Кухто, Е. В. Мокринская, Л. С. Тонкопиева, Н. Г. Чуприна, G. A. Mousdis. *Журн. прикл. спект.*, **86** (2019) 461—467 [N. A. Davidenko, I. I. Davidenko, A. V. Kukhta, I. N. Kukhta, E. V. Mokrinskaya, L. S. Tonkopyeva, N. G. Chuprina, G. A. Mousdis. *J. Appl. Spectr.*, **86** (2019) 494—498]

- [19] R. S. Medne, Ya. Ya. Katsens, I. L. Kraupsha, O. Ya. Neiland. *Chem. Heterocycl. Compound*, **10** (1991) 1317—1319
- [20] G. Soras, N. Psaroudakis, M. J. Manos, A. J. Tasiopoulos, D. G. Liakos, G. A. Mousdis. *Polyhedron*, **28** (2009) 3340—3348
- [21] N. A. Davidenko, A. A. Ishchenko, V. A. Pavlov. *Sci. Appl. Phot.*, **41**, N 2 (1999) 169—174
- [22] N. A. Davidenko, A. A. Ishchenko. *Phys. Solid State*, **42**, N 8 (2000) 1403—1409
- [23] M. Nonnenmacher, M. P. O'Boyle, H. K. Wickramasinghe. *Appl. Phys. Lett.*, **58** (1991) 2921—2923
- [24] 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, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, D. J. Fox. *Gaussian 09*, revision A. 1. Gaussian, Inc., Wallingford (2009)
- [25] M. Pope, C. E. Swenberg. *Electronic Processes in Organic Crystals*, Clarendon Press, Oxford (1982)