ОПТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ. 2024. Том 91. № 11. С. 82–90
OPTICHESKII ZHURNAL. 2024. V. 91. № 11. P. 82–90

Научная статья
Research Article

Оптический журнал
Оптическое материаловедение и технологии
Optical materials science and technology

DOI: 10.17586/1023-5086-2024-91-11-82-90
УДК 621.383, 537.312

Моделирование подвижности электронов в органических материалах оптоэлектроники

В. В. Беляев[1]✉, Д. Н. Чаусов[2], А. С. Соломатин[3], Р. Н. Кучеров[4], С. Кумар[5], А. Л. Маргарян[6], Н. Г. Акопян[7], М. В. Ермакова[8], А. А. Беляев[9], Г. М. Ханна[10], А. Р. Вечканов[11], А. В. Андреев[12]

[1]*vic_belyaev@mail.ru, vv.belyaev@guppros.ru* *https://orcid.org/0000-0003-0553-9358*
[2]*d.chausov@yandex.ru* *https://orcid.org/0000-0002-1287-6427*
[3]*sotrudnica_unc@mail.ru* *https://orcid.org/0009-0002-0203-3853*
[4]*rn.kucherov@gmail.com* *https://orcid.org/0000-0002-4580-3945*

Аннотация

Предмет исследования. Органические материалы оптоэлектроники со сложной молекулярной структурой, межмолекулярное и межатомное взаимодействие. **Цель работы.** Разработка моделей межмолекулярного и межатомного взаимодействия этих материалов для описания компонент энергии органических молекул и ее пространственного распределения. **Метод.** Предложен метод определения вклада частей молекул на подвижность зарядов по модели диффузии на делокализованном поляроне. Во втором методе определяется энергия молекул и ее пространственное распределение по атом–атомным потенциалам. **Основные результаты.** Модель позволяет рассчитать изменение вклада от взаимодействия между молекулами или их фрагментами при различных внешних условиях. В области эксплуатационных температур преобладает воздействие статической компоненты стандартного отклонения энергии молекулы в решетке, уменьшающее подвижность зарядов. При изменении энергии возмущений решетки, соответствующей нелокальному электрон–фононному взаимодействию, с 5 до 100 мэВ подвижность уменьшается в 17 раз. Изменение углов взаимной ориентации молекул изменяет энергию межмолекулярного взаимодействия на 0,1–1 эВ, что согласуется с данными моделирования подвижности зарядов. **Практическая значимость.** Методы применяются в оптоэлектронике: фотовольтаические элементы, органические светодиоды и светотранзисторы, аккумуляторы, дисплеи.

Ключевые слова: органические полупроводники, оптоэлектроника, электронная подвижность, межмолекулярная энергия взаимодействия, модель диффузии, метод межатомных потенциалов, дисплеи, прозрачная электроника

Благодарность: работа частично поддержана Российским научным фондом, проект № 22-19-00157 от 16.05.2022.

Ссылка для цитирования: Беляев В.В., Чаусов Д.Н., Соломатин С.А., Кучеров Р.Н., Кумар С., Маргарян А.Л., Акопян Н.Г., Ермакова М.В., Беляев А.А., Ханна Г.М., Вечканов А.Р., Андреев А.В. Моделирование подвижности электронов в органических материалах оптоэлектроники // Оптический журнал. Т. 91. № 11. С. 82–90. http://doi.org/10.17586/1023-5086-2024-91-11-82-90

Коды OCIS: 160.4890, 160.6000

Modeling of electron mobility in organic optoelectronics materials

V. V. Belyaev[1]✉, D. N. Chausov[2], A. S. Solomatin[3], R. N. Kucherov[4], S. Kumar[5], H. Margaryan[6], N. Hakobyan[7], M. V. Ermakova[8], A. A. Belyaev[9], G. M. Hanna[10], A. R. Vechkanov[11], A. V. Andreev[12]

[1]vic_belyaev@mail.ru, vv.belyaev@guppros.ru https://orcid.org/0000-0003-0553-9358
[2]d.chausov@yandex.ru https://orcid.org/0000-0002-1287-6427
[3]sotrudnica_unc@mail.ru https://orcid.org/0009-0002-0203-3853
[4]rn.kucherov@gmail.com https://orcid.org/0000-0002-4580-3945

Abstract

Subject of study. Organic optoelectronics materials with complex molecular structure; intermolecular and interatomic interaction. **Aim of study.** Development of intermolecular and interatomic interactions models for such materials to express components of organic molecules energy, its spatial distribution. **Method.** Method determines contribution of material molecules parts into charge mobility using diffusion model on delocalized polaron. In second method molecules energy and its spatial distribution are determined using atom–atomic potentials. **Main results.** Calculating contribution into interaction between molecules or their fragments and its change. In operating temperature range, there is predominance of static component of standard deviation of energy of molecule in lattice, which reduces charges mobility. When lattice perturbation energy corresponding to nonlocal electron-phonon interaction changes from 5 to 100 meV, mobility decreases by 17 times. Changing mutual molecules' orientation angles changes intermolecular interaction energy by 0.1–1 eV, it is consistent with charge mobility modeling. **Practical significance.** The methods are applied in optoelectronics: photovoltaic cells, organic light-emitting diode and transistor, batteries, displays.

Keywords: organic semiconductors, optoelectronics, electronic mobility, intermolecular interaction energy, diffusion model, interatomic potential method, displays, transparent electronics

Acknowledgment: this work was partially supported by the Russian Science Foundation, project № 22-19-00157 dated 05/16/2022.

For citation: Belyaev V.V., Chausov D.N., Solomatin S.A., Kucherov R.N., Kumar S., Margaryan A.L., Hakobyan N.G., Ermakova M.V., Belyaev A.A., Hanna G.M., Vechkanov A.R., Andreev A.V. Modeling of electron mobility in organic optoelectronics materials [in Russian] // Opticheskii Zhurnal. V. 91. № 11. P. 82–90. http://doi.org/10.17586/1023-5086-2024-91-11-82-90

OCIS codes: 160.4890, 160.6000

ВВЕДЕНИЕ

Поиск и разработка материалов органической оптоэлектроники с высокой подвижностью носителей заряда является актуальной задачей, решение которой позволит обеспечить более эффективное преобразование электрической энергии в световую, например в дисплеях, или наоборот в фотовольтаических элементах и, как следствие, повысит энергоэффективность устройств с применяемыми материалами. Для решения этой задачи необходимо разработать модель, описывающую связь подвижности носителей заряда со строением органических молекул. Важной частью модели является исследование поведения носителей заряда в фотопроводниках в зависимости как от оптических и электрофизических факторов, так и других, к которым относятся температура, акустический спектр и др. [1]. По сравнению с твердотельными полупроводниками структура органических материалов бывает очень сложной: с полициклическими, ароматическими и линейными фрагментами. В последние годы много работ посвящено поиску и созданию материалов органической электроники среди веществ, обладающих жидкокристаллической фазой [2–5].

Целью работы является разработка моделей межмолекулярного и межатомного взаимодействия органических материалов оптоэлектроники со сложной молекулярной структурой для описания компонент энергии органиче-

ских молекул и ее пространственного распределения.

Представленные методы моделирования диффузии на делокализованном поляроне и с использованием атом–атомных потенциалов могут использоваться для разработки перспективных материалов для различных видов оптоэлектронных устройств — фотовольтаических элементов, органических светодиодов и светотранзисторов, аккумуляторов и др.

МОДЕЛЬ ДИФФУЗИИ НА ДЕЛОКАЛИЗОВАННОМ ПОЛЯРОНЕ

Известен ряд работ, в которых приводятся оценки связи подвижности носителей зарядов со строением органических молекул [6–10]. Хорошее согласие с экспериментальными данными имеет модель диффузии на делокализованном поляроне [11]. В модели учтены наиболее существенные факторы, управляющие переносом носителей заряда: межмолекулярное связывание электронов, электрон–фононное взаимодействие, делокализация заряда, статическое и динамическое разупорядочивания. В статье приведен ряд выражений, позволяющих рассчитать названные параметры и, таким образом, оценить подвижность носителей заряда в веществах, имеющих различное молекулярное строение. Для многих веществ расчетные значения имеют незначительные расхождения с экспериментальными. Наибольшие расхождения получены в случае органических молекул с несколькими донорно-акцепторными группами.

В настоящей работе предлагается простой метод расчета некоторых из этих параметров, чтобы оценить вклад (инкремент) различных фрагментов молекулы в них и, следовательно, в значение подвижности. Также описывается метод оценки энергетических параметров сложной органической молекулы расчетом парного взаимодействия всех атомов молекулы.

В статье [11] получено следующее выражение для подвижности носителей зарядов с учетом статического и динамического разупорядочиваний

$$\mu = \mu_0 \exp\left(-\left(\frac{2\sigma}{3kT}\right)^2\right) = \mu_0 \exp\left(-\frac{4(\sigma_S^2 + 2LkT)}{(3kT)^2}\right), \quad (1)$$

где подвижность носителя заряда μ_0 рассчитывается в соответствии с обычным соотношением Эйнштейна–Смолуховского

$$\mu_0 = \frac{eD}{kT} = \frac{e}{6kT}\sum_i k_i r_i^2 p_i. \quad (2)$$

В выражениях (1) и (2) использованы следующие обозначения: D — коэффициент диффузии носителя заряда (полярона), r_i — расстояние между соседними молекулами вдоль i-го направления переноса, p_i — вероятность движения носителя заряда в этом направлении, k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура. Для расчетов нужно знать статическую компоненту σ_S среднеквадратического отклонения (СКО) энергии молекулы в решетке, моделирующей систему, а также динамическую компоненту $\sigma_d = \sqrt{(2LkT)}$ СКО интеграла переноса заряда J, описывающего электронную связь между зарядами, где L — энергия возмущений решетки, соответствующая нелокальному электрон–фононному взаимодействию. Кроме интеграла J рассчитывается λ — энергия преобразования состояния, которая описывает локальное электрон–фононное взаимодействие (рис. 1). Эти параметры входят в выражение для скорости переноса заряда в моделирующей решетке

$$k_i = \frac{J_i^2}{\hbar}\left(\frac{\pi n_{\min}}{\lambda kT}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\lambda}{4n_{\min}kT}\right), \quad (3)$$

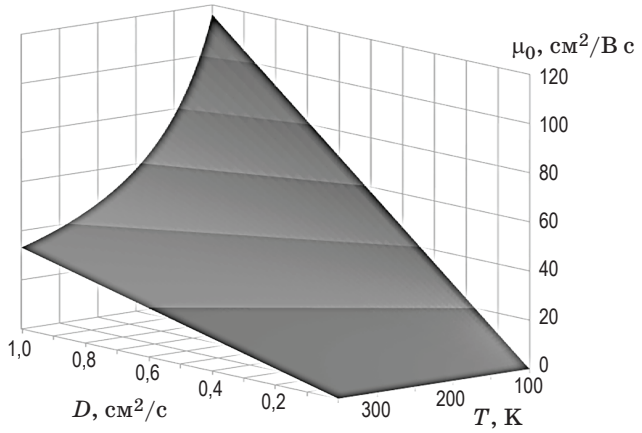

Рис. 1. Зависимость подвижности носителей зарядов μ_0 при варьировании коэффициента диффузии D и температуры T

Fig. 1. Dependence of the charge carriers' mobility μ_0 with varying diffusion coefficient D and temperature T

где $n_{\min}$ — количество элементов решетки, при котором энергия носителей заряда минимальна, $\hbar$ — приведенная постоянная Планка. При $n >> 1$ это количество равно

$$n_{\min} = \frac{(2J - \lambda/2)^2}{\sigma_S^2 + 2LkT}.$$

В расчетах интеграл J заменяется на сумму абсолютных значений J_Σ при переносе заряда от некоторой молекулы к каждому из ее m соседей $J_\Sigma = \Sigma_{i=1}^{m}|J_i|$. Тогда для $n_{\min}$ получается выражение, используемое далее для расчета подвижности,

$$n_{\min} \approx 1 + \frac{(J_\Sigma - \lambda/2)^2}{\sigma_S^2 + 2LkT} h(J_\Sigma - \lambda/2). \quad (4)$$

В наших расчетах скорости переноса заряда между двумя молекулами или их частями было использовано выражение (1) статьи Сосорева [17], основанное на формуле Маркуса,

$$m_M = \frac{2\pi}{\hbar} J^2 \left(\frac{1}{4\pi\lambda kT}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{(E_2 - E_1 - \lambda)^2}{4\lambda kT}\right), \quad (5)$$

где E_1 и E_2 — начальная и конечная энергия электронов. Интеграл переноса заряда J и энергии преобразования состояния λ были изменяемыми параметрами (подробнее см. [11]).

Типичные зависимости скорости переноса заряда между двумя молекулами m_M от стандартного отклонения энергии молекулы в решетке, моделирующей систему, σ_S и температуры при варьировании J, λ и L приведены на рис. 2.

При увеличении J с 300 до 900 мэВ и λ со 100 до 500 мэВ максимум зависимости m_M сдвигается в сторону бóльших значений σ_S и более высоких значений температуры (рис. 3).

Зависимости подвижности μ, нормированные на μ_0, от температуры и σ_S при разных значениях параметра L приведены на рис. 4.

В статье [11] выполнены расчеты J и λ для различных органических соединений. Это производные диимида нафталина (NDI), тетратиафульвалена, тетрацианхинодиметана. Их спектральные характеристики, которые используются для получения значений энергий переходов, приведены в работе [12]. Как правило, наибольшие значения подвижности

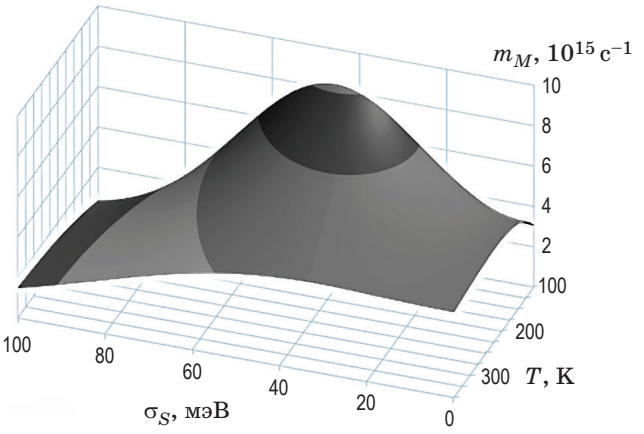

Рис. 2. Зависимость скорости переноса заряда m_M между двумя молекулами от статической компоненты СКО σ_S энергии молекулы в решетке, имитирующей систему, и температуры T при заданных параметрах J, λ и L. J = 300 мэВ, λ = 100 мэВ, L = 5 мэВ

Fig. 2. Dependence of the charge transfer rate m_M between two molecules on the standard deviation σ_S of the energy of the molecule in the lattice simulating the system and the temperature T at the given parameters J, λ and L. J = 300 meV, λ = 100 meV, L = 5 meV

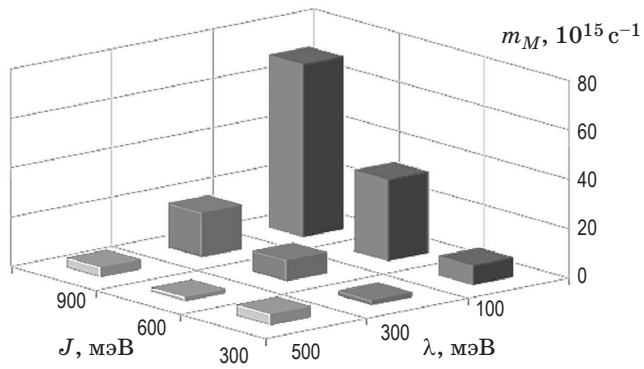

Рис. 3. Зависимость скорости переноса заряда m_M между двумя молекулами при варьировании параметров J и λ при L = 50 мэВ

Fig. 3. Dependence of the charge transfer rate m_M between two molecules with varying parameters J and λ at L = 50 meV

получаются при больших значениях J — интеграла переноса заряда.

Согласно результатам работы [11], значение J особенно возрастает в молекулах тетратиафульвалена и тетрацианхинодиметана с атомами фтора в центральном ароматическом фрагменте, а также в молекуле гексаметилена NDI с терминальными циклическими

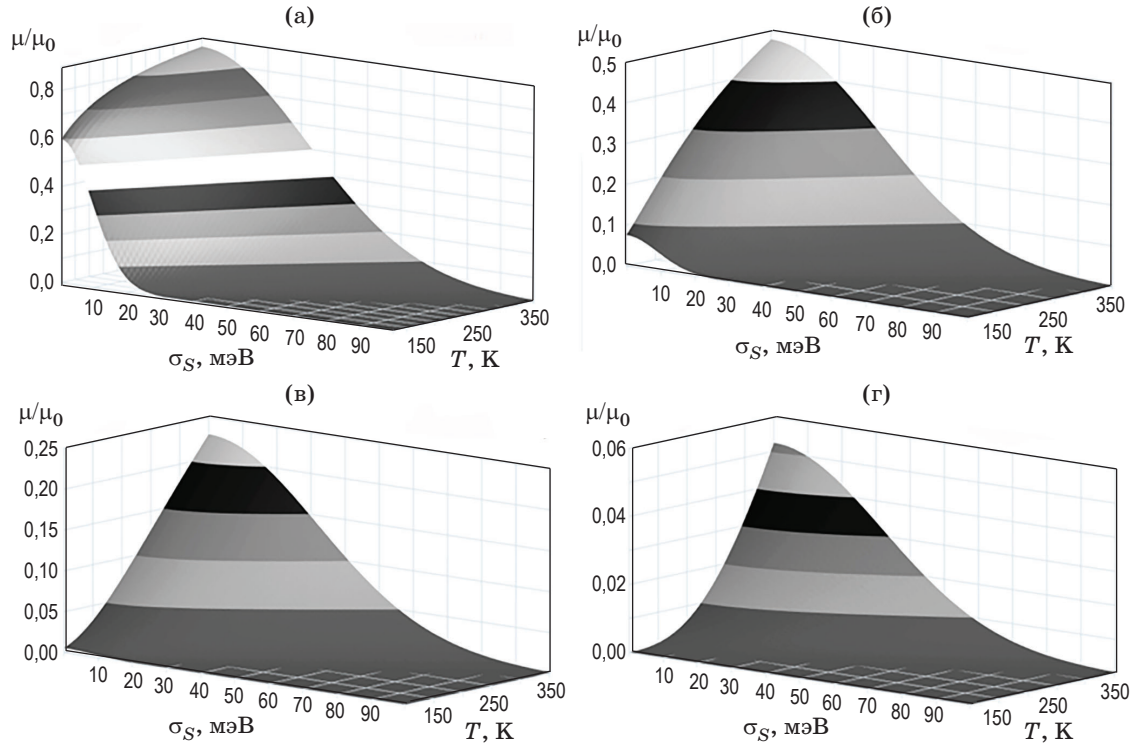

Рис. 4. Зависимости нормированной подвижности носителей заряда μ/μ_0 от температуры и статической компоненты СКО σ_S энергии молекулы в решетке при значениях параметра L 5 (а), 25 (б), 50 (в) и 100 (г) мэВ

Fig. 4. Dependence of the charge carriers μ/μ_0 normalized mobility on temperature and the standard deviation σ_S of the molecule energy in the lattice for various values of parameter L (a) 5, (б) 25, (в) 50, (г) 100 meV

гексаметиленовыми фрагментами. Среди рассмотренных в статье веществ самое высокое значение подвижности (13,5 см^2/(В с)) у рубрена (тетрафенилпентацен) для параметра J_Σ по сравнению с другими веществами.

В наших расчетах варьировались значения интеграла переноса заряда J, энергии преобразования состояния λ и энергии возмущений решетки L, в результате получена зависимость скорости переноса заряда между двумя молекулами m_M и подвижности μ от стандартного отклонения энергии молекулы в решетке, имитирующей систему, σ_S и температуры. Самые низкие значения J и, соответственно, подвижности получаются для линейных молекул олигоаренов (тетрафенил и др.).

Суммируя результаты моделирования, отметим, что при изменении интеграла переноса заряда J всего в 5 раз — от 0,1 до 0,5 эВ — можно изменить подвижность носителя заряда в 50 раз. Энергия локального электрон–фононного взаимодействия λ слабо меняется при изменении молекулярного строения.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛ ОРГАНИЧЕСКИХ ОПТОЭЛЕКТРОННЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ АТОМ–АТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

Кроме оценок энергии межмолекулярного и межатомного взаимодействий в модели диффузии на делокализованном поляроне выполнено моделирование взаимодействия молекул оптоэлектронных органических материалов методом атом–атомных потенциалов. Установлена зависимость энергии взаимодействия молекул от углов, характеризующих их ориентацию относительно друг друга. В качестве такого материала первоначально выбран фталоцианин – вещество, молекулы которого содержат макрогетероциклическое ядро (рис. 5). Производные фталоцианина имеют широкий спектр применения: красители, катализаторы, фотокатализаторы, лекарственные средства, диагностические средства и др. Оптические свойства систем с фталоцианином исследованы в работах [13, 14].

Применимость метода атом–атомных потенциалов для расчета межмолекулярной ориентации алифатических углеводородов (алканы, ароматические фрагменты молекул мезогенов) хорошо изучена [15–17]. В то же время имеется мало работ, посвященных ориентации дискообразных молекул с макрогетероциклическим ядром.

Структурные формулы дискообразных молекул фталоцианина с макрогетероциклическим ядром приведены на рис. 5. Модели молекул строятся по координатам их атомов, оптимизация которых проводится с помощью пакета программ физико-химического моделирования GROMACS. Рассматривается ориентация органической молекулы относительно другой такой же молекулы.

Взаимная ориентация молекул определяется углами θ, φ, ψ (рис. 6), которые при расчетах изменялись от 0 до 180° с шагом 10°. Начальное значение расстояния a от центра инерции молекулы до плоскости, проходящей через центры инерции атомов, составляющих поверхность, принималось равным 3 Å и проводилась минимизация энергии по высоте a.

Для вычислений использовался метод атом–атомных потенциалов [15]. Энергия взаимодействия E представляется в виде суммы значений энергии взаимодействия между атомами молекулы и атомами поверхности кристалла, которая определяется соотношением (потенциал Леннарда–Джонса) [17]

$$E = \sum_{ij} E_{ij},$$

$$E_{ij} = \varepsilon\left[\left(\frac{r_0}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r_{ij}}\right)^{6}\right], \qquad (6)$$

где $\varepsilon > 0$ — глубина энергетической ямы, r_0 — расстояние между отдельными атомами, при котором $E_{ij} = 0$, r_{ij} — расстояние между атомом поверхности i и атомом молекулы j.

Энергия взаимодействия определялась соотношением (6), где значения параметров взаимодействия групп C′...C′, N...N, H...H были взяты из работ [17]. Потенциалы взаимодействия C′...H и C′...N рассчитывались по хорошо зарекомендовавшему себя принципу аддитивности ван-дер-ваальсовых радиусов и правилу среднего геометрического.

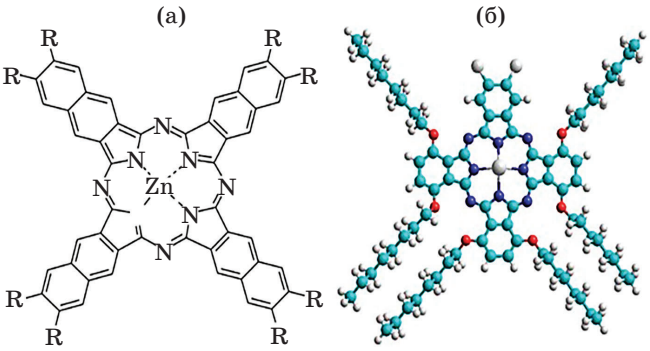

Рис. 5. Структурные формулы макромолекул исследованных замещенных нафталоцианинов — 2-нафталоцианина (а) и 3-нафталоцианина (б)

Fig. 5. Structural macromolecules formulas of the studied substituted naphthalocyanines — (а) 2-naphthalocyanine and (б) 3-naphthalocyanine

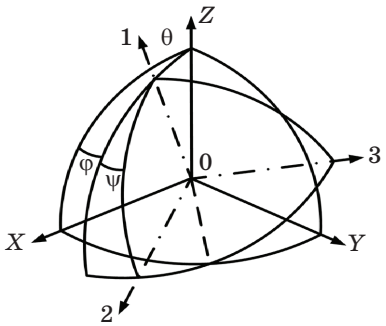

Рис. 6. Взаимное расположение систем координат, связанных с молекулой (1, 2, 3) и фиксированной системой (X, Y, Z). X, Y, Z — система координат, связанная с поверхностью кристалла, 1, 2, 3 — система координат, связанная с макромолекулой, θ — полярный угол оси 1 неподвижной системы координат, φ — азимут оси 1 (угол между плоскостями XZ и $1Z$), ψ — азимут подвижной системы координат (угол между плоскостями $1Z$ и 12)

Fig. 6. The relative position of coordinate systems associated with the molecule (1, 2, 3) and a fixed system (X, Y, Z). X, Y, Z is the coordinate system associated with the crystal surface, 1, 2, 3 is the coordinate system associated with the macromolecule, θ is the polar angle of axis 1 of the fixed system coordinates, φ is the azimuth of the axis 1 (the angle between the planes XZ and $1Z$), ψ is the azimuth of the moving system coordinates (the angle between the planes $1Z$ and 12)

В результате расчетов получены зависимости энергии взаимодействия молекул фталоцианина с макрогетероциклическим ядром [18, 19] от углов ориентации θ, φ, ψ (рис. 7).

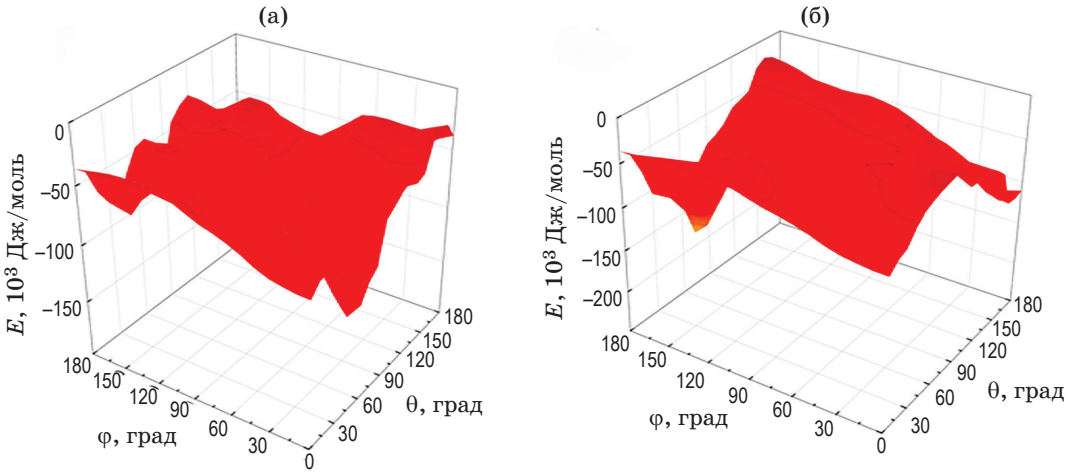

Рис. 7. Зависимости энергии межмолекулярного взаимодействия молекул фталоцианина с макрогетероциклическим ядром от полярного угла θ оси 1 неподвижной системы координат и азимутального угла φ оси 1 при заданном значении азимутального угла ψ подвижной системы координат при $\psi = 30°$ (а) и $\psi = 10°$ (б)

Fig. 7. The dependences of the intermolecular interaction of phthalocyanine molecules with macroheterocyclic core on the polar angle θ of the axis 1 of the fixed coordinate system and the azimuthal angle φ axis 1 for a given value of the azimuthal angle ψ of the moving coordinate system at (а) $\psi = 30°$ and (б) $\psi = 10°$

На рис. 7 видно, что энергия межмолекулярного взаимодействия молекул фталоцианина с макрогетероциклическим ядром существенно зависит от трех углов ориентации θ, φ, ψ, при этом существует область ориентационных состояний молекул фталоцианина, энергия взаимодействия которых на порядок больше энергии остальных состояний.

При разных углах θ, φ, ψ колебания этой энергии составляют 10^4–10^5 Дж/моль, или 0,1–1 эВ, что согласуется со значениями параметров, использованных в первой части настоящей работы для расчета подвижности носителей заряда. Эта энергия может содержать компоненты, присутствующие в модели Сосорева [11]: J (интеграл переноса заряда, описывающий электронную связь между зарядами), λ (энергия преобразования состояния, которая описывает локальное электрон–фононное взаимодействие), L (энергия возмущений решетки, соответствующая нелокальному электрон–фононному взаимодействию), которые напрямую отсутствуют в формуле (6), служащей для прямого суммирования взаимодействия всех атомов молекулы. Поэтому можно сделать вывод о сопоставимости и взаимодополнительности результатов расчетов энергии взаимодействия атомов в органических молекулах обоими представленными методами.

Поэтому одной из задач развития этой модели является установление взаимосвязи энергетических параметров, получаемых двумя приведенными методами расчета, и более четкое установление влияния этих параметров на подвижность носителей заряда в органических материалах электроники.

ВЫВОДЫ

Разработаны и усовершенствованы модели межмолекулярного и межатомного взаимодействий материалов органической электроники со сложной молекулярной структурой.

С использованием модели диффузии на делокализованном поляроне [11] выполнены оценки скорости переноса заряда между двумя органическими молекулами материала оптоэлектроники или их частями и подвижности носителей заряда с учетом электронной связи между зарядами локального и нелокального электрон–фононного взаимодействия.

При изменении энергии возмущений решетки, соответствующей нелокальному электрон–фононному взаимодействию, с 5 до 100 мэВ подвижность уменьшается в 17 раз. Влияние статической компоненты σ_S стандартного отклонения энергии молекулы в решетке, моделирующей систему, выражено значительнее

при температурах, соответствующих условиям эксплуатации электронных приборов с органическим материалом. С ростом σ_S подвижность, нормированная на μ_0, падает.

Также методом атом–атомных потенциалов выполнено моделирование ориентации молекул органических полупроводников. Установлено, что энергия взаимодействия молекул или их фрагментов изменяется на 10^4–10^5 Дж/моль, или 0,1–1 эВ, при изменении углов, характеризующих ориентацию молекул относительно друг друга. Это согласуется со значениями параметров, использованных для расчета подвижности носителей заряда согласно модели Сосорева [11].

Представленные методы могут использоваться для разработки перспективных материалов для различных видов оптоэлектронных устройств — фотовольтаических элементов, органических светодиодов и светотранзисторов, аккумуляторов, дисплеев, в том числе гибких, и др.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Жукова М.О., Перлин Е.Ю. Поглощение света свободными электронами в полупроводниках. II. Процессы с участием акустических фононов // Оптический журнал. 2017. Т. 84. № 10. С. 3–6.
   Zhukova M.O., Perlin E.Yu. Absorption of light by free electrons in semiconductors. II. Processes involving acoustic phonons // J. Opt. Technol. 2017. V. 84. № 10. P. 651–653. https://doi.org/10.1364/JOT.84.000651
2. Беляев В.В., Чилая Г.С. Жидкие кристаллы в начале XXI века. М.: ИИУ МГОУ, 2017. 142 с.
   Belyaev V.V., Chilaya G.S. Liquid crystals at the beginning of the XXI century [in Russian]. Moscow: Moscow Region State University Editorial Office, 2017. 142 p.
3. Yuvaraj A.R., Renjith A., Kumar S. Novel electron-deficient phenanthridine based discotic liquid crystals // J. Molecular Liquids. 2018. V. 272. P. 583–589. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2018.09.120
4. Vinayakumara D.R., Ulla H., Kumar S., et al. New fluorescent columnar mesogens derived from phenanthrene-cyanopyridone hybrids for OLED applications // Mat. Chem. Frontiers. 2018. V. 2. № 12. P. 2297–2306. https://doi.org/10.1039/C8QM00377G
5. Vinayakumara D.R., Kumar S., Adhikari A.V. Supramolecular columnar self-assembly of wedge-shaped rhodanine based dyes: Synthesis and optoelectronic properties // J. Molecular Liquids. 2019. V. 274. P. 215–222. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2018.10.139
6. Казак А.В., Беляев В.В., Чаусов Д.Н. и др. Способ формирования флуоресцентных тонких пленок на основе смешанно-замещенного производного фталоцианина // Патент РФ № 2806720. Бюл. 2022. № 19.
   Kazak A.V., Belyaev V.V., Chausov D.N., et al. Method for forming fluorescent thin films based on a mixed-substituted phthalocyanine derivative // Russian Federation Patent № 2806720. Bull. 2022. № 19.
7. Hu P., He X., Jiang H. Greater than 10 $cm^2\ V^{-1}\ s^{-1}$: A breakthrough of organic semiconductors for field-effect transistors // InfoMat. 3. № 6. P. 613–630. https://doi.org/10.1002/inf2.12188
8. Rolin C., Kang E., Lee J.-H., et al. Charge carrier mobility in thin films of organic semiconductors by the gated van der Pauw method // Nature Commun. 2017. V. 8. № 1. P. 14975. https://doi.org/10.1038/ncomms14975
9. Karl N. Charge-carrier mobility in organic crystals // Organic Electronic Materials: Conjugated Polymers and Low Molecular Weight Organic Solids. 2001. V. 41. P. 283–326. https://doi.org/10.1007/978-3-642-56425-3_8
10. Paterson A.F., Singh S., Fallon K.J., et al. Recent progress in high-mobility organic transistors: A reality check // Adv. Mat. 2018. V. 30. № 36. P. 1801079. https://doi.org/10.1002/adma.201801079
11. Sosorev A.Yu. Simple charge transport model for efficient search of high-mobility organic semiconductor crystals // Materials & Design. 2020. V. 192. P. 108730. https://doi.org/10.1016/j.matdes.2020.108730
12. Zhou Q., Yang J., Du M., et al. New near-infrared absorbing conjugated electron donor-acceptor molecules with a fused tetrathiafulvalene naphthalene diimide framework // J. Mat. Chem. C. 2022. V. 10. № 7. P. 2814–2820. https://doi.org/10.1039/D1TC04291B
13. Денисюк И.Ю., Мешков А.М., Акимов И.А. Электрофотографические фоторецепторы на основе сублимированных фталоцианинов // Оптический журнал. 2003. Т. 70. № 5. С. 3–7.
   Denisyuk I.Y., Meshkov A.M., Akimov I.A. Electrophotographic photoreceptors based on sublimated phthalocyanines // J. Opt. Technol. 2003. V. 70. № 5. P. 303–305. https://doi.org/10.1364/JOT.70.000303
14. Казак А.В., Усольцева Н.В., Смирнова А.И. и др. Оптические свойства и надмолекулярная организация гольмиевого комплекса смешанно-замещенного фталоцианина в пленках Ленгмюра–Шеффера // Макрогетероциклы. 2015. Т. 8. № 3. С. 284–289.
   Kazak A.V., Usol'tseva N.V., Smirnova A.I., et al. Optical properties and supramolecular organization of mix-substituted phthalocyanine holmium complex in Langmuir–Schaefer films [in Russian] // Macroheterocycles. 2015. V. 8. № 3. P. 284–289. https://doi.org/10.6060/mhc150972k
15. Israelachvili J.N. Intermolecular and surface forces. London: Academic Press, 2011. 645 p.
16. Chausov D.N., Suleymanova S., Kazak A.V., et al. Intermolecular interactions of layers octa-phenyl-2,3-naphthalocyaninato zinc // J. Phys.: Conf. Ser. 2021. V. 2056. № 1. P. 012014. https://doi.org/10.1088/1742-6596/2056/1/012014
17. Dadivanyan A.K., Pashinina Y.M., Chausov D.N., et al. Mesogen molecules orientation on crystal surfaces // Molecular Crystals and Liquid Crystals. 2011. V. 545. № 1. P. 159–167. https://doi.org/10.1080/15421406.2011.571998
18. Казак А.В., Дубинина Т.В., Чаусов Д.Н. и др. Самоорганизация субфталоцианина бора A2B типа в плавающих слоях и пленках Ленгмюра–Шеффера // Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2021. Т. 21. № 1. С. 72–80. https://doi.org/10.18083/LCAppl.2021.1.72
   Kazak A.V., Dubinina T.V., Chausov D.N., et al. Self-organization of A2B type boron subphthalocyanine in floating layers and Langmuir–Schaeffer films [in Russian] // Liquid Crystals and their Application J. 2021. V. 21. № 1. P. 72–80.
19. Kazak A.V., Marchenkova V.A., Dubinina T.V., et al. Self-organization of octa-phenyl-2,3-naphthalocyaninato zinc floating layers // New J. Chem. 2020. V. 44. P. 3833–3837. https://doi.org/10.1039/c9nj06041c

АВТОРЫ

Виктор Васильевич Беляев — доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник, Государственный университет просвещения, Москва, 105005, Российская Федерация; профессор Российского университета дружбы народов, Москва, 117198, Российская Федерация; Scopus ID: 55423741600; https://orcid.org/0000-0003-0553-9358; vic_belyaev@mail.ru, vv.belyaev@guppros.ru

Денис Николаевич Чаусов — доктор физико-математических наук, доцент, заведующий лабораторией, Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, 119991, Российская Федерация; главный научный сотрудник, Государственный университет просвещения, Москва, 105005, Российская Федерация; профессор Московского финансово-промышленного университета «Синергия», Москва, 129090, Российская Федерация; Scopus ID: 23983935000; https://orcid.org/0000-0002-1287-6427; d.chausov@yandex.ru

Алексей Сергеевич Соломатин — доктор технических наук, доцент, профессор Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева, Москва, 125047, Российская Федерация; профессор Государственного университета просвещения, Москва, 105005, Российская Федерация; Scopus ID: 56338542200; https://orcid.org/0009-0002-0203-3853; sotrudnica_unc@mail.ru

Роман Николаевич Кучеров — инженер, Государственный университет просвещения, Москва, 105005, Российская Федерация; младший научный сотрудник, Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, 119991, Российская Федерация; ассистент Московского финансово-промышленного университета «Синергия», Москва, 129090, Российская Федерация; Scopus ID: 57216950459; https://orcid.org/0000-0002-4580-3945; rn.kucherov@gmail.com

Сандип Кумар — профессор Технологического института Нитте Менакши, Елаханка, Бангалор, Карнатака, 560064, Индия; Scopus ID: 57202477419; https://orcid.org/нет; skumar.sandeep@gmail.com

Акоп Левонович Маргарян — кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Ереванский государственный университет, Ереван, 0025, Республика Армения; Scopus ID: 6506478542; https://orcid.org/0000-0001-7326-6107; marhakob@ysu.am

Нуне Грантовна Акопян — научный сотрудник, Ереванский государственный университет, Ереван, 0025, Республика Армения; Scopus ID: 24824420500; https://orcid.org/0000-0003-3307-4957, nune.hakobyan@ysu.am

Мария Вадимовна Ермакова — аспирант, Государственный университет просвещения, Москва, 105005, Российская Федерация; mermakva@mail.ru

Андрей Андреевич Беляев — инженер I категории, Государственный университет просвещения, Москва, 105005, Российская Федерация; https://orcid.org/0009-0002-2921-2421; lartalini@list.ru

Георгий Михайлович Ханна — аспирант Российского университета дружбы народов, Москва, 117198, Российская Федерация; 1142221195@rudn.ru

Артём Робертович Вечканов — аспирант Российского университета дружбы народов, Москва, 117198, Российская Федерация; Scopus ID: 1103234; https://orcid.org/0009-0004-8188-8220; temka1012@mail.ru

Антон Валерьевич Андреев — старший преподаватель, Московский финансово-промышленный университет «Синергия», Москва, 129090, Российская Федерация; https://orcid.org/0000-0002-8054-8257; aav3008@mail.ru

AUTHORS

Victor V. Belyaev — Dr. Sci. (Engineering), Full Professor, Principal Scientist, State University of Education, Moscow, 105005, Russian Federation; Professor at the RUDN University (Peoples' Friendship University of Russia), Moscow, 117198, Russian Federation; Scopus ID: 55423741600; https://orcid.org/0000-0003-0553-9358; vic_belyaev@mail.ru, vv.belyaev@guppros.ru

Denis N. Chausov — Dr. Sci. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Head of the laboratory, A.M. Prokhorov General Physics Institute of the RAS, Moscow, 119991, Russian Federation; Chief Researcher of the State University of Education, 10A, Moscow, 105005, Russian Federation; Professor at the Moscow Financial and Industrial University "Synergy", Moscow, 129090, Russian Federation; Scopus ID: 23983935000; https://orcid.org/0000-0002-1287-6427; d.chausov@yandex.ru

Alexey S. Solomatin — Dr. Sci. (Engineering), Associate Professor, Professor at the D.I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology, Moscow, 125047, Russian Federation; Professor at the State University of Education, Moscow, 105005, Russian Federation; Scopus ID: 56338542200; https://orcid.org/0009-0002-0203-3853sotrudnica_unc@mail.ru

Roman N. Kucherov — Engineer, State University of Education, Moscow, 105005, Russian Federation; Junior Research, A.M. Prokhorov General Physics Institute of the RAS, Moscow, 119991, Russian Federation; Assistant. Moscow Financial and Industrial University "Synergy", Moscow, 129090, Russian Federation; Scopus ID: 57216950459; https://orcid.org/0000-0002-4580-3945; rn.kucherov@gmail.com

Sandeep Kumar — Professor of the Nitte Meenakshi Institute of Technology, Elahanka, Bangalore, Karnataka, 560064, India; Scopus ID: 57202477419; https://orcid.org/нет; skumar.sandeep@gmail.com

Hakob L. Margaryan — PhD (Physics and Mathematics), Leading Researcher Yerevan State University, Yerevan, 0025, Republic of Armenia; Scopus ID: 6506478542; https://orcid.org/0000-0001-7326-6107; marhakob@ysu.amn

Nune G. Hakobyan —Researcher, Yerevan State University, Yerevan, 0025, Republic of Armenia; Scopus ID: 24824420500; https://orcid.org/0000-0003-3307-4957; nune.hakobyan@ysu.am

Maria V. Ermakova — PhD Student, State University of Education, Moscow, 105005, Russian Federation; mermakva@mail.ru

Andrey A. Belyaev — Engineer of the I category, State University of Education, Moscow, 105005, Russian Federation; lartalini@list.ru

George M. Hanna — PhD Student, RUDN University, Moscow, 117198, Russian Federation; 1142221195@rudn.ru

Artyom R. Vechkanov — PhD Student, RUDN University, Moscow, 117198, Russian Federation; Scopus ID: 1103234; https://orcid.org/0009-0004-8188-8220; temka1012@mail.ru

Anton V. Andreev — Senior Lecturer, Moscow Financial and Industrial University "Synergy", Moscow, 129090, Russian Federation; https://orcid.org/0000-0002-8054-8257; aav3008@mail.ru

Статья поступила в редакцию 18.04.2023
Одобрена после рецензирования 15.04.2024
Принята к печати 30.09.2024

The article was submitted to the editorial office 18.04.2023
Approved after review 15.04.2024
Accepted for publication 30.09.2024