

Взаимосвязь между низкочастотными колебаниями и подвижностью зарядов в монокристаллах 7,7,8,8-тетрацианохинодиметана (TCNQ) и его фтор замещенных производных

Венер М.В.,¹ Чернышов И.Ю.,¹ Фельдман Е.В.,² Паращюк Д.Ю.,² Сосорев А.Ю.²

¹Кафедра квантовой химии РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва 125047, РФ

²Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва 119991, РФ

Органическая электроника – быстроразвивающаяся высокотехнологичная область, предлагающая разработку и производство нового поколения электронных устройств на основе тонких пленок органических полупроводниковых соединений, обладающих рядом преимуществ перед традиционными неорганическими устройствами (выполненными в основном на основе кремния): гибкостью, легкостью, растяжимостью, устойчивостью к ударным нагрузкам, прозрачностью, а также возможностью создания материала под конкретную задачу. Для эффективной работы органических электронных устройств нужна высокая подвижность зарядов в их рабочих слоях. Несмотря на многолетние интенсивные исследования, в литературе отсутствуют работы, которые бы объясняли природу переноса заряда в высококомобильных органических полупроводниках на атомно-молекулярном уровне.

В данной работе были исследованы причины, обуславливающие высокую подвижность зарядов в кристалле 2,5-дифтор-7,7,8,8-тетрацианохинодиметана (F₂-TCNQ), по сравнению с кристаллами родственных соединений F_n-TCNQ ($n = 0$ и 4), при использовании комбинированного подхода. Последний был основан на совместном использовании спектроскопии КР и расчетов методами теории функционала плотности с периодическими граничными условиями (ТФП-ПГУ). В то время как значения энергий реорганизации практически одинаковы в ряду исследуемых кристаллов, КР спектр кристалла F₂-TCNQ сильно отличается от спектров TCNQ и F₄-TCNQ в низкочастотной области. Экспериментальная частота нижнего КР-активного колебания F₂-TCNQ практически в два раза выше частоты соответствующего колебания в кристаллах TCNQ и F₄-TCNQ [1]. Расчеты исследуемых кристаллов методом ТФП-ПГУ (приближение B3LYP/6-31G**), подтверждают этот экспериментальный факт. Данное явление обусловлено специфическим строением кристалла F₂-TCNQ (одна молекула в примитивной ячейке). В результате резко понижается электрон-фононное взаимодействие и возрастает подвижность зарядов в F₂-TCNQ по сравнению с кристаллами TCNQ и F₄-TCNQ.

Работа была поддержана Российским Фондом Фундаментальных Исследований (проекты №№ 16-32-60204, 17-02-00841).

[1] I.Yu. Chernyshov, M.V. Vener, E.V. Feldman, D.Yu. Paraschuk, A.Yu. Sosorev, *J. Phys. Chem. Lett.* **2017**, 8, pp 2875–2880.