

А.Н. Бимуханов\*, , А.А. Алдонгаров 

Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Казахстан, г. Нур-Султан

\*e-mail: Bimukhanov.92@gmail.com

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА КОМПЛЕКСА Si(DPP)<sub>2</sub>

В данной статье приведены данные по исследованию расчетов переноса заряда, энергии реорганизации, интеграла межмолекулярного переноса, скорости переноса для оптимизированной структуры нового нейтрального шестикоординационного кремниевого комплекса Si(DPP)<sub>2</sub>. Представлены основные расчетные и экспериментальные геометрические данные по оптимизированной структуре. Комплекс имеет искаженную октаэдрическую геометрию с усреднением коротких длин связей Si-N: расчетная – 1,958365 Å и экспериментальная – 1,9111 Å. Структура Si(DPP)<sub>2</sub> содержит два дифенилпиридин (DPP = 2,6-diphenylpyridine ligand) лиганда. Оптимизация, вычислительные расчеты необходимых данных для нахождения свойств переноса заряда были выполнены с использованием функционала – B3LYP и базисного набора – 6-31G\*. Геометрические параметры для оптимизации структуры, были получены из недавних, известных, экспериментальных данных. Было выполнено сравнение полученных теоретических данных переноса заряда исследуемой структуры Si(DPP)<sub>2</sub>, с известными экспериментальными данными. На основании сравнения экспериментальных данных с полученными результатами компьютерных вычислений, последние показали близкие результаты к первым. Эта работа показывает, что вычислительные методы могут помочь в дальнейшем изучении будущих структур, а также в прогнозировании будущих параметров еще не изученных кремниевых комплексов.

**Ключевые слова:** метод функционала плотности DFT, шестикоординационные комплексы кремния, пиридинсодержащие лиганды, энергия реорганизации, внутренняя энергия реорганизации.

A.N. Bimukhanov\*, A.A. Aldongarov

L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazakhstan, Nur-Sultan

\*e-mail: Bimukhanov.92@gmail.com

### Theoretical study of charge transport properties of a Si(DPP)<sub>2</sub> complex

This article provides a study of the calculations of charge transport, reorganization energy, intermolecular transfer integral and charge mobility for the optimized structure of the new neutral hexacoordinated silicon complex Si(DPP)<sub>2</sub>. The main calculated and experimental geometric data on the optimized structure are also presented. The complex has a distorted octahedral geometry with short Si-N bond lengths averaging: calculated - 1.958365 Å and experimental - 1.9111 Å. The Si(DPP)<sub>2</sub> structure contains two diphenylpyridine (DPP = 2,6-diphenylpyridine ligand) ligands. Optimization and computational calculations of the necessary data of charge transport were performed using a B3LYP functional and a 6-31G\* basis set. Geometrical parameters for structure optimization were obtained from recent, known, experimental data. The obtained theoretical data on the charge transport of the Si(DPP)<sub>2</sub> structure were compared with the known experimental data. Based on a comparison of the theoretical and experimental values for the charge transport properties of the Si(DPP)<sub>2</sub> compound, it was shown that the method we used for calculating the charge mobility gives relatively close values. This work shows that computational methods can help in the further study of future structures, as well as predict the future parameters of as yet unexplored silicon complexes.

**Key words:** density functional theory DFT, hexacoordinate silicon, pyridine containing ligands, reorganization energy, intermolecular transfer integral, electron transfer rate, charge mobility, organic electronics.

А.Н. Бимуханов\*, А.А. Алдонгаров  
Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ.  
\*e-mail: Bimukhanov.92@gmail.com

## Si(DPP)<sub>2</sub> кешенінің заряд трансфердің қасиеттерін теориялық зерттеуі

Бұл мақалада Si(DPP)<sub>2</sub> жаңа бейтарап алтыкоординациялық кремний кешенінің оңтайландырылған құрылымы үшін зарядтың тасымалдануын, қайта құру энергиясын, молекулааралық тасымалдау интегралын, тасымалдау жылдамдығын есептеуді зерттеу ұсынылады. Оңтайландырылған құрылым бойынша негізгі есептік және эксперименттік геометриялық деректер де берілген. Кешеннің қысқа Si-N байланыс ұзындықтарының орташа мәні бар бұрмаланған октаэдрлік геометриясы бар: есептелген - 1,958365 Å және тәжірибелік - 1,9111 Å. Si(DPP)<sub>2</sub> құрылымында екі дифенилпиридин (DPP = 2,6-дифенилпиридин лиганд) лигандтары бар. Оңтайландыру, зарядты тасымалдау қасиеттерін табу үшін қажетті мәліметтерді есептеу есептеулері функционалды – B3LYP және базалық жиынтық – 6-31G\* көмегімен орындалды. Құрылымды оңтайландырудың геометриялық параметрлері соңғы, белгілі, тәжірибелік деректерден алынды. Зерттелетін Si(DPP)<sub>2</sub> құрылымының зарядты тасымалдауы туралы алынған теориялық мәліметтер белгілі эксперименттік мәліметтермен салыстырылды. Эксперименттік мәліметтерді компьютерлік есептеулердің нәтижелерімен салыстыру негізінде жақын нәтижесін көрсетті. Бұл жұмыс есептеу әдістері болашақ құрылымдарды одан әрі зерттеуге, сондай-ақ әлі зерттелмеген кремний кешендерінің болашақ параметрлерін болжауға көмектесетінін көрсетеді.

**Түйін сөздер:** тығыздықтың функционалды теориясы DFT, кремнийдің алтыкоординациялық кешендері, пиридині бар лигандтар, қайта құрылымдау энергиясы, ішкі қайта құру энергиясы.

### Введение

В последние годы наблюдается значительный рост интереса к светоизлучающим диодам на основе органических материалов, которые обычно называют органическими светоизлучающими диодами (organic light-emitting diode - OLED) [1,2]. Но в то же время, огромная волна коммерческого успеха порождает острую необходимость повышения эффективности, стабильности и устойчивости новых материалов [3]. Потребность усугубляется недавними достижениями в области органической электроники [4-6]. Органические полупроводники также находят применение в различных устройствах OPV [7-10] и OLED [11-14], в частности, в качестве слоя дырочной проводимости (HTL) [15,16] или в качестве слоя электронной проводимости (ETL) [17].

Изучая недавние достижения в области повышения эффективности, стоит выделить замечательную стабильность шестикоординационных комплексов кремния с пиридинсодержащими лигандами [18,19]. Шестикоординационные комплексы Si(ligand)<sub>2</sub> представляют собой многообещающий новый класс хелатных соединений металлов для органических электронных устройств. Богатое синтетическое разнообразие клешневидных лигандов, должно обеспечить ряд желательных и

подходящих комплексов для слоев переноса электронов и электролюминесценции [20].

В последние несколько лет, работы в области изучения шестикоординационных комплексов кремния с клешневидными лигандами [21,22], вызывают интерес к дальнейшим исследованиям. Желание улучшить физические свойства материалов привело к изучению свойств переноса зарядов. Измерение, оптимизация и установление структурно-функциональных взаимосвязей подвижности электронов и дырок имеет решающее значение для разработки эффективных устройств независимо от функции органического материала.

В данной работе объектом исследования являются нейтральные шестикоординационные кремниевые комплексы, содержащие два дифенилпиридин (DPP = 2,6-diphenylpyridine ligand) лиганда. Целью данной работы является теоретическое исследование свойств переноса заряда, на основе метода функционала плотности, новых нейтральных шестикоординационных кремниевых комплексов Si(DPP)<sub>2</sub>.

### Материалы и методы

При реализации квантово-химического исследования структуры Si(DPP)<sub>2</sub> использовался метод функционала плотности DFT реализуемый в программном пакете Gaussian09 [23]. На

сегодняшний день этот метод включает широкий набор различных функционалов. Для расчета свойств объектов был использован широко используемый функционал B3LYP [24-26]. Все расчеты проводились с использованием вычислительных ресурсов лаборатории физической и квантовой химии при Евразийском национальном университете им. Л.Н. Гумилева.

Для проведения расчетов рассмотрена структура Si(DPP)<sub>2</sub> (рисунок 1) которая была построена по известным экспериментальным данным [22]. В дальнейшем была выполнена оптимизация структуры с использованием базисного набора: 6-31G\* [27-35]. Расчеты частот продемонстрировали отсутствие отрицательных значений, что свидетельствует о том, что все полученные структуры соответствуют глобальному минимуму.

В таблице 1 приведены основные расчетные и экспериментальные [22] геометрические

параметры оптимизированного соединения Si(DPP)<sub>2</sub>.



Рисунок 1 - Оптимизированная структура Si(DPP)<sub>2</sub>

Таблица 1 - Основные расчетные и экспериментальные геометрические параметры оптимизированного соединения Si(DPP)<sub>2</sub>

Si(DPP) <sub>2</sub>		
Номер атома	Длина связи (Å)	
	Расчетные данные	Экспериментальные данные
Si30-C11	1.99151	1.97
Si30-C21	1.99151	1.97
Si30-N29	1.95837	1.9126
Si30-N31	1.95836	1.9095
C11-C14	1.40086	-
C14-C15	1.39673	-
C5-N29	1.35019	-
Линейный угол (°)		
C11-Si30-C21	163.288	-

## Обзор литературы

Энергия реорганизации ( $\lambda$ ) представляет собой геометрическую энергию релаксации молекулы из заряженного в нейтральное состояние и из нейтрального в заряженное состояние. Энергия реорганизации для дырки ( $\lambda_h$ ) и электрона ( $\lambda_e$ ) оценивалась как:

$$\lambda_{hole} = \lambda_+ + \lambda_1, \quad (1)$$

$$\lambda_{electron} = \lambda_- + \lambda_2, \quad (2)$$

$$\lambda_{hole} = \lambda_+ + \lambda_1 = [E^+(A) - E^+(A^+)] + [E(A^+) - E(A)] = IP(v) - HEP, \quad (3)$$

где  $E(A)$  – энергия нейтральной молекулы после оптимизации;  $E(A^+)$  – энергия катиона молекулы после оптимизации;  $E+(A^+)$  – энергия положительно заряженной молекулы при геометрии нейтральной молекулы;  $E+(A)$  – энергия нейтральной молекулы при

использовании геометрии катиона;  $IP(v)$  (vertical ionization potential) – вертикальный потенциал ионизации;  $HEP$  (hole extraction potential) – дырочный потенциал извлечения.

Эти два члена были рассчитаны непосредственно из адиабатических поверхностей потенциальной энергии для  $\lambda_h$  и  $\lambda_e$  [38-40].

Энергия реорганизации для дырки ( $\lambda_h$ ) рассчитывалась как:

использовании геометрии катиона;  $IP(v)$  (vertical ionization potential) – вертикальный потенциал ионизации;  $HEP$  (hole extraction potential) – дырочный потенциал извлечения.

Энергия реорганизации электрона ( $\lambda_e$ ) будет оцениваться как:

$$\lambda_{electron} = \lambda_- + \lambda_2 = [E^-(A) - E^-(A^-)] + [E(A^-) - E(A)] = EEP - EA(v), \quad (4)$$

где  $E(A)$  – энергия нейтральной молекулы после оптимизации;  $E(A^-)$  – энергия аниона молекулы после оптимизации;  $E-(A^-)$  – энергия отрицательно заряженной молекулы при геометрии нейтральной молекулы;  $E-(A)$  – энергия нейтральной молекулы при использовании геометрии аниона;  $EA(v)$  (vertical

electron affinity) – вертикальное сродство к электрону;  $EEP$  (electron extraction potential) – потенциал извлечения электрона.

На рисунке 2 представлено схематическое распределение внутренней энергии реорганизации для переноса дырок и электронов.

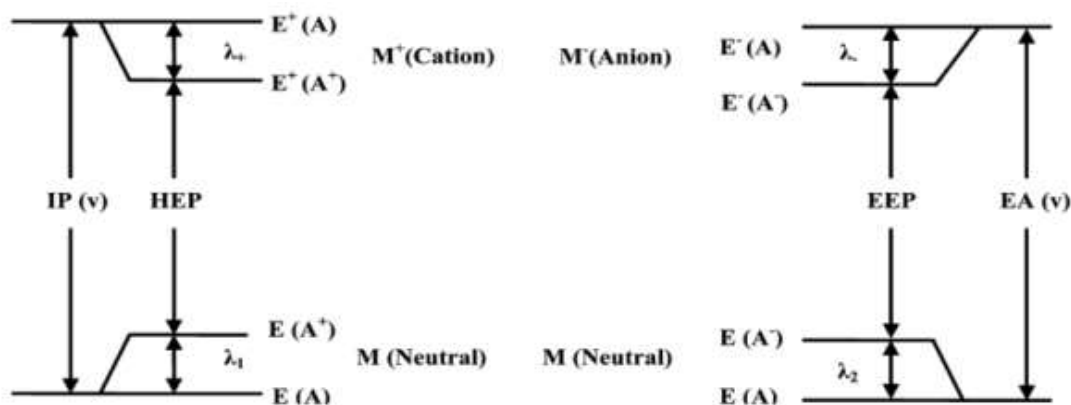


Рисунок 2 - Внутренняя энергия реорганизации для переноса дырок и электронов

На следующем этапе были выполнены расчеты, связанные с интегралом межмолекулярного переноса. Появляющийся интеграл межмолекулярного переноса  $V_{h/e}$  характеризует силу электронной связи между соседними молекулами. Самый простой подход, который широко использовался для оценки электронных взаимодействий в органических полупроводниках, относится к теореме Купманса

[41], которая основана на одноэлектронном приближении. Абсолютные значения интеграла межмолекулярного переноса можно хорошо оценить как половину электронного расщепления уровней НОМО (LUMO) для дырок (электронов) в димере, состоящий из двух нейтральных молекул.

$$V_{h/e} = \frac{\varepsilon_{H[L+1]} - \varepsilon_{H-1[L]}}{2}, \quad (5)$$

где  $\varepsilon_{H[L+1]}$  – энергия НОМО (LUMO+1);  $\varepsilon_{H-1[L]}$  – энергия НОМО-1, (LUMO), взятые из

замкнутой конфигурации нейтрального состояния димера.

Дальнейшим действием было нахождение скачковой скорости переноса заряда, которая может быть приблизительно описана уравнением Маркуса-Хаша [42,43].

$$K_{et_{h/e}} = \left( \frac{\pi}{\lambda_{h/e} k_B T} \right)^{1/2} \times \frac{V_{h/e}^2}{\hbar} \times \exp \left( - \frac{\lambda_{h/e}}{4 k_B T} \right), \quad (6)$$

где  $V_{h/e}$  – интеграл межмолекулярного переноса;  $T$  – температура;  $k_B$  – постоянная Больцмана;  $\hbar$  – постоянная Планка;  $\lambda_{h/e}$  – энергия реорганизации дырки/электрона.

Известно, что перенос заряда может быть охарактеризован процессом диффузии, при котором носитель заряда прыгает между соседними молекулами в соответствии со скоростями переноса заряда, которые применяются в отсутствие внешнего электрического поля. В пределе слабого поля подвижность носителей хорошо описывается соотношением Эйнштейна [44].

$$\mu = \frac{eD}{k_B T}, \quad (7)$$

где  $e$  – заряд электрона,  $D$  – коэффициент диффузии носителей заряда

Коэффициент диффузии носителей заряда который можно рассчитать с помощью уравнения Эйнштейна-Смолуховского [45]

$$D = \frac{L^2 K_{et}}{2}.$$

### Результаты и обсуждение

В таблицах 2 и 3 указаны данные для вычисления энергии реорганизации для дырки и электрона соответственно.

**Таблица 2** - Данные энергии реорганизации для дырки

$\lambda_{hole}$ (эВ)			
E(A)	E(A+)	E+(A+)	E+(A)
-92911,0676	-92905,27374	-92905,20803	-92911,00102

**Таблица 3** - Данные энергии реорганизации для электрона

$\lambda_{electron}$ (эВ)			
E(A)	E(A-)	E-(A-)	E-(A)
-92911,0676	-92911,67285	-92911,61771	-92910,96724

Используя данные из таблиц 2 и 3, были получены следующие результаты для энергии реорганизации:

$$\lambda_{hole} = 0,85e-3 \text{ (эВ)}, \lambda_{electron} = 45,2e-3 \text{ (эВ)}$$

Для вычисления интеграла межмолекулярного переноса использовались данные из таблицы 4

**Таблица 4** - Данные интеграла межмолекулярного переноса для дырки и электрона

$V_{hole}$ (эВ)		$V_{electron}$ (эВ)	
$E_{НОМО}$	$E_{НОМО-1}$	$E_{LUMO}$	$E_{LUMO+1}$
-4,989568	-4,98984	-1,425824	-1,425008

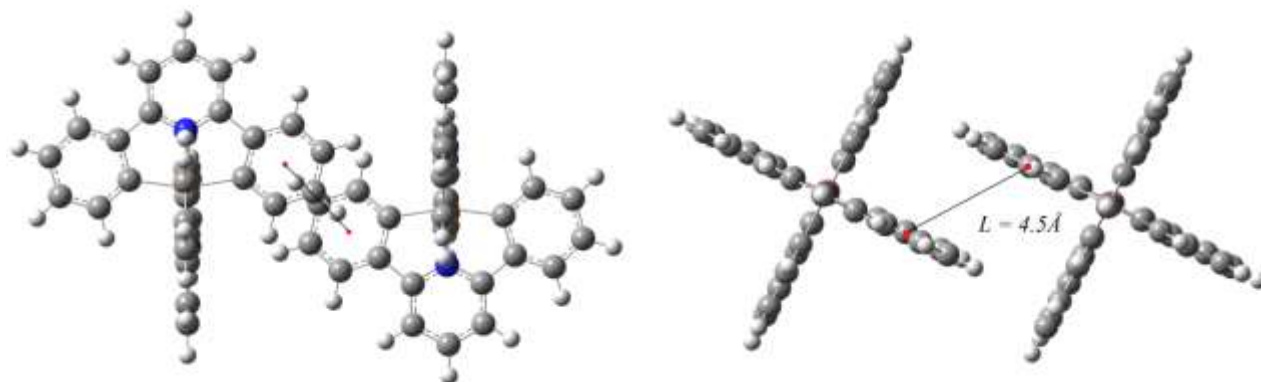
Полученные результаты вычисления интеграла межмолекулярного переноса:

$$V_{hole} = 0,13e-3 \text{ (эВ)}, V_{electron} = 0,4e-3 \text{ (эВ)}$$

Используя ранее полученные результаты, а также известные физические константы находим скорость переноса электронов:

$$K_{hole} = 1,06e+10 \text{ (с}^{-1}\text{)}, K_{electron} = 8,48e+09 \text{ (с}^{-1}\text{)}$$

Для расчета коэффициента диффузии носителей заряда необходимо знать значения расстояния в димере. На рисунке 3 представлена структура нейтрального симметричного димера из соединения  $\text{Si(DPP)}_2$ .



**Рисунок 3** - Структура нейтрального симметричного димера из соединения  $\text{Si(DPP)}_2$

Для вычисления значения диффузии, из известных экспериментальных данных [14] по рассматриваемой структуре  $\text{Si(DPP)}_2$ , возьмем расстояние в димере ( $L$ ) равным  $4.5\text{Å}$ :

$$D_{hole} = 1,07e-05 \text{ (см}^2\text{с}^{-1}\text{)}, \\ D_{electron} = 8,58e-06 \text{ (см}^2\text{с}^{-1}\text{)}$$

Полученные ранее результаты позволяют найти подвижность заряда для дырки и электрона:

$$\mu_{hole} = 4,26E-04 \text{ (см}^2\text{В}^{-1}\text{с}^{-1}\text{)},$$

$$\mu_{electron} = 3,4E-04 \text{ (см}^2\text{В}^{-1}\text{с}^{-1}\text{)}$$

Ниже в таблице 5 приведены полученные результаты в сравнении с ранее полученными экспериментальными данными [14] по рассматриваемой структуре  $\text{Si(DPP)}_2$ .

**Таблица 5** - Результаты теоретических и экспериментальных данных для структуры  $\text{Si(DPP)}_2$

Значения	Дырка	Электрон
$\lambda$ (мэВ)	0,85	45,2
$V$ (мэВ)	0,13	0,4
$\mu_{calc}$ (см <sup>2</sup> В <sup>-1</sup> с <sup>-1</sup> )	$4,26 \times 10^{-4}$	$3,4 \times 10^{-4}$
$\mu_{exp}$ (см <sup>2</sup> В <sup>-1</sup> с <sup>-1</sup> )	$1,1 \times 10^{-5}$	$18 \times 10^{-5}$

### Заключение

В данной работе мы исследовали теоретические и экспериментальные данные свойств переноса заряда нейтрального, гексакоординационного, кремниевого комплекса  $\text{Si(DPP)}_2$ . С использованием функционала - B3LYP и базисного набора - 6-31G\* мы рассчитали необходимые данные для получения теоретических результатов по исследуемой структуре. Полученные теоретические данные сравнивались с известными экспериментальными данными. На основании сравнения теоретических

и экспериментальных значений по свойствам переноса заряда исследуемой структуры было показано, что использованный метод расчета подвижности зарядов дает расхождение на порядок величины в сравнении с экспериментальными данными для кремниевого комплекса  $\text{Si(DPP)}_2$ . Расхождение в величинах подвижности зарядов можно объяснить приближениями использованных моделей и так же не учётом влияния окружения других молекул, так как в модели рассматривался только димер молекулы  $\text{Si(DPP)}_2$ . Таким образом, расчеты в приближении DFT можно использовать для

определения подвижности зарядов в шестикоординационных комплексах кремния с учетом этой погрешности.

### Благодарности

Исследование выполнено при финансовой

поддержке Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан (грант №AP08052504 «Моделирование и разработка новых нейтральных шестикоординационных комплексов кремния для органической электроники»).

### Литература

- 1 Kwon B. et al. Organic/Inorganic Hybrid Thin-Film Encapsulation Using Inkjet Printing and PEALD for Industrial Large-Area Process Suitability and Flexible OLED Application // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. – 2021. – Vol. 13. – P. 55391–55402.
- 2 Joo W. et. al. Metasurface-Driven OLED Displays Beyond 10,000 Pixels per Inch // *Science*. – 2020. – Vol. 370. – P. 459–463.
- 3 Song J. et al. Organic Light-Emitting Diodes: Pushing Toward the Limits and Beyond // *Adv. Mater.* – 2020. – Vol. 32, – P. 1907539.
- 4 Zhang, D. et al. Emerging Self-Emissive Technologies for Flexible Displays // *Adv. Mater.* – 2020. – Vol. 32. – P. 1902391.
- 5 Bae S.K. et al. Transparent Ultra-Thin Silver Electrodes Formed via a Maskless Evaporation Process for Applications in Flexible Organic Light-Emitting Devices // *Nano Energy*. - 2020. - Vol. 71, - P. 104649.
- 6 Li N. et al. Molecular Engineering by  $\sigma$ -Bond Spacer Enables Solution-Processable Host Materials for TADF Emitter towards High-Performance OLEDs // *Chem. Eng. J.* - 2020. - Vol. 396. – P. 125276.
- 7 Green M.A. et al. Solar cell efficiency tables (version 50) // *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*. - 2017. – Vol. 25. – P. 668-676.
- 8 Zhao W. et al. Molecular Optimization Enables over 13% Efficiency in Organic Solar Cells // *J. Am. Chem. Soc.* – 2017. – Vol. 139. – P. 7148–7151.
- 9 Kang H. et al. Bulk-Heterojunction Organic Solar Cells: Five Core Technologies for Their Commercialization // *Adv. Mater.* – 2016. – Vol. 28. – P. 7821–7861.
- 10 Hedley G.J. et al. Light Harvesting for Organic Photovoltaics // *Chem. Rev.* - 2017. - Vol. 117(2). – P. 796-837.
- 11 Tremblay J.-F. et al. The rise of OLED displays // *C&EN*. – 2016. - Vol. 94(28). – P. 30-34.
- 12 Kim Y. et al. An ultra thin implantable system for cerebral blood volume monitoring using flexible OLED and OPD // *Int. El. Devices Meet.* – 2015. 29.6.1-26.6.4.
- 13 Man J.-X. et al. Black Phase-Changing Cathodes for High-Contrast Organic Light-Emitting Diodes // *ACS Photonics*. – 2017. – Vol. 4. – P. 1316-1321.
- 14 Levermore P. et al. Ink-Jet-Printed OLEDs for Display Applications // *SID Int. Symp. Dig. Tec.* – 2016. – Vol. 47. – P. 484-486.
- 15 Xu H. et al. Printable Hole Transport Layer for 1.0 cm<sup>2</sup> Organic Solar Cells // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. – 2020. – Vol. 12(46). – P. 52028–52037.
- 16 Kang S. et al. Improved Electroluminescence Performance of Perovskite Light-Emitting Diodes by a New Hole Transporting Polymer Based on the Benzocarbazole Moiety // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. – 2020. – Vol. 12(46). – P. 51756–51765.
- 17 Kim J.-H. et al. Designing an electron-transport layer for highly efficient, reliable, and solution-processed organic light-emitting diodes // *J. Mater. Chem. C*. – 2017. – Vol. 5(12). – P. 3097–3106.
- 18 Peloquin D.M. et al. Recent advances in hexacoordinate silicon with pyridine-containing ligands: Chemistry and emerging applications // *Coord. Chem. Rev.* – 2016. – Vol. 323. – P. 107–119.
- 19 Li Y. et al. Optical dielectric function of Si(2,6-bis(benzimidazol-2'-yl)pyridine)<sub>2</sub> determined by spectroscopic ellipsometry // *Opt. Mat. Express*. – 2019. – Vol. 9(8). – P. 3469-3475.
- 20 Kocherga M. et al. Si(bzimpy)<sub>2</sub> – a hexacoordinate silicon pincer complex for electron transport and electroluminescence // *Chem. Commun.* – 2018. – Vol. 54(100). – P. 14073–14076.
- 21 Kocherga M. et al. Exploring the molecular electronic device applications of synthetically versatile silicon pincer complexes as charge transport and electroluminescent layers // *Mater. Adv.* - 2021.
- 22 Earnhardt A.W. et al. Bipolar charge transport in a robust hexacoordinate organosilane // *Journal of Organometallic Chemistry*. – 2021. – Vol. 961.
- 23 Frisch M.J., et al. Gaussian 09, Revision E.01 (Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010).
- 24 Becke A.D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // *J. Chem. Phys.* – 1993. – Vol. 98. – P. 5648.
- 25 Lee C. et al. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // *Phys. Rev.* – 1988. - Vol. 37. – P. 785.

- 26 Stephens P.J. et al. Ab Initio Calculation of Vibrational Absorption and Circular Dichroism Spectra Using Density Functional Force Fields // *J. Phys. Chem.* – 1994. – Vol. 98, - P. 11623.
- 27 Hehre W.J. et al. Self-Consistent Molecular Orbital Methods. Further extensions of Gaussian-type basis sets for use in molecular-orbital studies of organic-molecules // *J. Chem. Phys.* – 1972. – Vol. 56. – P. 2257.
- 28 Hariharan P.C., Pople J.A. Influence of polarization functions on molecular-orbital hydrogenation energies // *Theor. Chem. Acc.* – 1973. – Vol. 28. – P. 213-22.
- 29 Hariharan P.C., Pople J.A. Accuracy of AH equilibrium geometries by single determinant molecular-orbital theory // *Mol. Phys.* – 1974. – Vol. 27. – P. 209-214.
- 30 Gordon M.S. The isomers of silacyclop propane // *Chem. Phys. Lett.* - 1980. - Vol. 76. - P.163-68.
- 31 Francl M.M. et al. Self-Consistent Molecular Orbital Methods. 23. A polarization-type basis set for 2nd-row elements // *J. Chem. Phys.* – 1982. – Vol. 77. – P. 3654-65.
- 32 Binning Jr R.C., Curtiss L.A. Compact contracted basis-sets for 3rd-row atoms - GA-KR // *J. Comp. Chem.* – 1990. – Vol. 11. – P. 1206-16.
- 33 Blaudeau J.-P. et al. Extension of Gaussian-2 (G2) theory to molecules containing third-row atoms K and Ca // *J. Chem. Phys.* – 1997. – Vol. 107. – P. 5016-21.
- 34 Rassolov V.A. et al. 6-31G\* basis set for atoms K through Zn // *J. Chem. Phys.* - 1998. - Vol. – P. 109. – P. 1223-29.
- 35 Rassolov V.A. et al. 6-31G\* Basis Set for Third-Row Atoms // *J. Comp. Chem.* – 2001. – Vol. 22. – P. 976-84.
- 36 Gruhn N. E. et al. The Vibrational Reorganization Energy in Pentacene: Molecular Influences on Charge Transport // *J. Am. Chem. Soc.* – 2002. – Vol. 124. – P. 7918-19.
- 37 Reimers J.R. A practical method for the use of curvilinear coordinates in calculations of normal-mode-projected displacements and Duschinsky rotation matrices for large molecules // *J. Chem. Phys.* – 2001. – Vol. 115. – P. 9103.
- 38 Li Y. et al. Theoretical study on the electronic structures and photophysical properties of a series of dithienylbenzothiazole derivatives // *Comput. Theor. Chem.* – 2012. – Vol. 981. – P. 14-24.
- 39 Irfan A. et al. Designing of Disubstituted Derivatives of mer-Alq<sub>3</sub>: Quantum Theoretical Study // *Theor. Chem. Acc.* – 2009. – Vol. 122. – P. 275.
- 40 Coropceanu V. et al. Probing Charge Transport in  $\pi$ -Stacked Fluorene-Based Systems // *J. Phys. Chem. B.* – 2006. – Vol. 110. – P. 9482.
- 41 Coropceanu V. et al. Charge Transport in Organic Semiconductors // *Chem. Rev.* - 2007. - Vol. 107. – P. 926..
- 42 Marcus R.A., Sutin N. Electron transfers in chemistry and biology // *Biochim. Biophys. Acta.* – 1985. – Vol. 811. – P. 265.
- 43 Marcus R.A. Electron transfer reactions in chemistry. Theory and experiment // *Rev. Mod. Phys.* – 1993. – Vol. 65. – P. 599.
- 44 Wang L.J. et al. Computational methods for design of organic materials with high charge mobility // *Chem. Soc. Rev.* – 2010. – Vol. 39. – P. 423.
- 45 Kuo M.Y. et al. Cyanation: providing a three-in-one advantage for the design of n-type organic field-effect transistors // *Chem.—Eur. J.* – 2007. – Vol. 13. – P. 4750.

## References

- 1 B. Kwon, et al. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 13, 55391–55402 (2021).
- 2 W. Joo, et. al. *Science*, 370, 459–463 (2020).
- 3 J. Song, et al. *Adv. Mater.*, 32, 1907539 (2020).
- 4 D. Zhang, et al. *Adv. Mater.*, 32, 1902391 (2020).
- 5 S.K Bae, et al. *Nano Energy*, 71, 104649 (2020).
- 6 N. Li, et al. *Chem. Eng. J.*, 396, 125276 (2020).
- 7 M.A. Green, et al. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 25, 668-676 (2017).
- 8 W. Zhao, et al. *J. Am. Chem. Soc.*, 139, 7148–7151 (2017).
- 9 H. Kang, et al. *Adv. Mater.* 28, 7821–7861 (2016).
- 10 G.J. Hedley, et al. *Chem. Rev.*, 117(2), 796-837 (2017).
- 11 J.-F. Tremblay, et al. *C&EN.*, 94(28), 30-34 (2016).
- 12 Y. Kim, et al. *Int. El. Devices Meet.*, 29.6.1-26.6.4 (2015).
- 13 J.-X. Man, et al. *ACS Photonics*, 4, 1316-1321 (2017).
- 14 P. Levermore, et al. *SID Int. Symp. Dig. Tec.*, 47, 484-486 (2016).
- 15 H. Xu, et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 12(46), 52028–52037 (2020).
- 16 S. Kang, et al. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 12(46), 51756–51765 (2020).
- 17 J.-H. Kim, et al. *J. Mater. Chem. C.*, 5(12), 3097–3106 (2017).
- 18 D.M. Peloquin, et al. *Coord. Chem. Rev.*, 323, 107–119 (2016).
- 19 Y. Li, et al. *Opt. Mat. Express*, 9(8), 3469-3475 (2019).
- 20 M. Kocherga, et al. *Chem. Commun.*, 54(100), 14073–14076 (2018).
- 21 M. Kocherga, et al. *Mater. Adv.*, (2021). <https://doi.org/10.1039/D1MA00737H>.



- 22 A.W. Earnhardt, et al. *Journal of Organometallic Chemistry*, 961, (2021).
- 23 M.J. Frisch, et al. *Gaussian 09, Revision E.01* (Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010).
- 24 A.D. Becke, *J. Chem. Phys.*, 98, 5648 (1993).
- 25 C. Lee, et al., *Phys. Rev.*, 37, 785 (1988).
- 26 P.J. Stephens, et al., *J. Phys. Chem.*, 98, 11623 (1994).
- 27 W.J. Hehre, et al., *J. Chem. Phys.*, 56, 2257 (1972).
- 28 P.C. Hariharan, J.A. Pople, *Theor. Chem. Acc.*, 28, 213-22 (1973).
- 29 P.C. Hariharan, J.A. Pople, *Mol. Phys.*, 27, 209-214 (1974).
- 30 M.S. Gordon, *Chem. Phys. Lett.*, 76, 163-68 (1980).
- 31 M.M. Francl, et al., *J. Chem. Phys.*, 77, 3654-65 (1982).
- 32 R.C. Binning Jr, *J. Comp. Chem.*, 11, 1206-16 (1990).
- 33 J.-P. Blaudeau, et al., *J. Chem. Phys.*, 107, 5016-21 (1997).
- 34 V.A. Rassolov, et al., *J. Chem. Phys.*, 109, 1223-29 (1998).
- 35 V.A. Rassolov, et al., *J. Comp. Chem.*, 22, 976-84 (2001).
- 36 N.E. Gruhn, et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 124, 7918-19 (2002).
- 37 J.R. Reimers, *J. Chem. Phys.*, 115, 9103 (2001).
- 38 Y. Li, et al., *Comput. Theor. Chem.*, 981, 14-24 (2012).
- 39 A. Irfan, et al., *Theor. Chem. Acc.*, 122275 (2009).
- 40 V. Coropceanu, et al., *J. Phys. Chem. B.*, 110, 9482 (2006).
- 41 V. Coropceanu, et al., *Chem. Rev.*, 107, 926 (2007).
- 42 R.A. Marcus, N. Sutin, *Biochim. Biophys. Acta.*, 811, 265 (1985).
- 43 R.A. Marcus, *Rev. Mod. Phys.*, 65, 599 (1993).
- 44 L.J. Wang, et al., *Chem. Soc Rev.*, 39, 423 (2010).
- 45 M.Y. Kuo, et al., *Chem.—Eur. J.*, 13, 4750 (2007).