

# Wysokoenergetyczne stany z przeniesieniem ładunku w kryształach kwatertiofenu

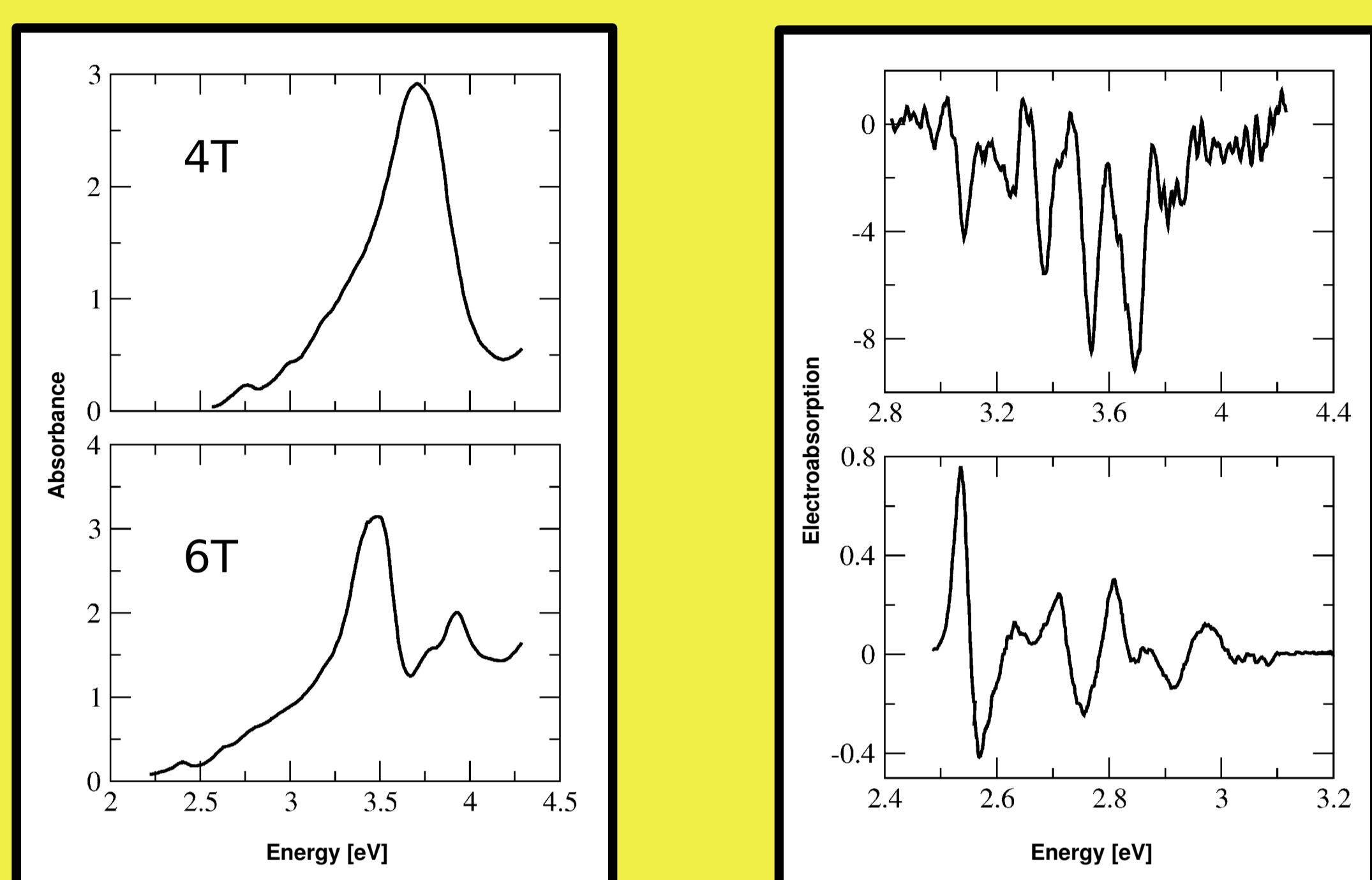


**Waldemar Kulig, Michał Sławik, Marcin Andrzejak**

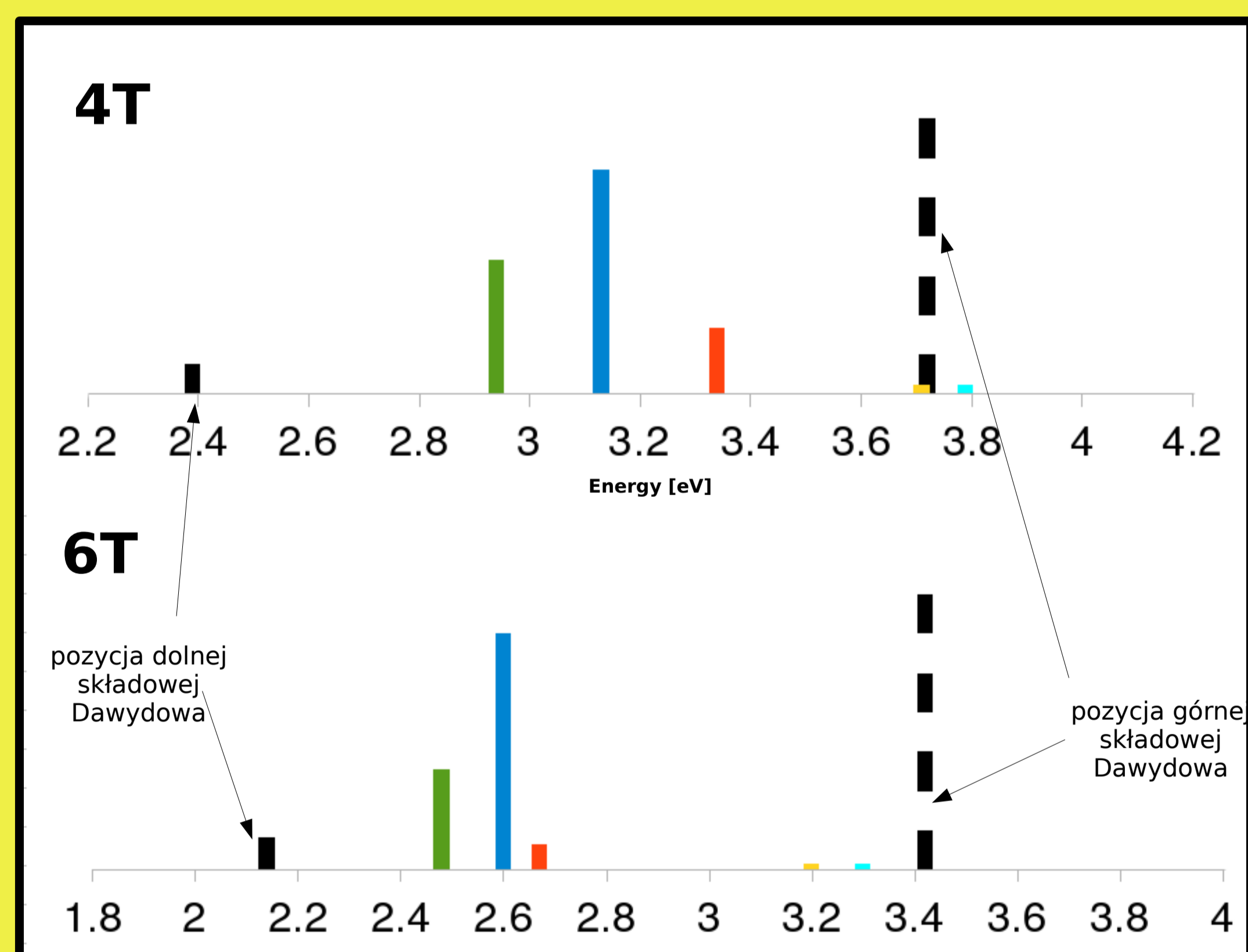
Zakład Chemii Teoretycznej im. K. Gumińskiego, Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego, 30-060 Kraków, ul. Ingardena 3

E-mail: wkulig@chemia.uj.edu.pl

**Obserwacja:** Widma absorpcyjne kwatertiofenu (4T) oraz seksitiofenu (6T) są bardzo podobne natomiast widma elektroabsorpcyjne (EA) różnią się drastycznie.

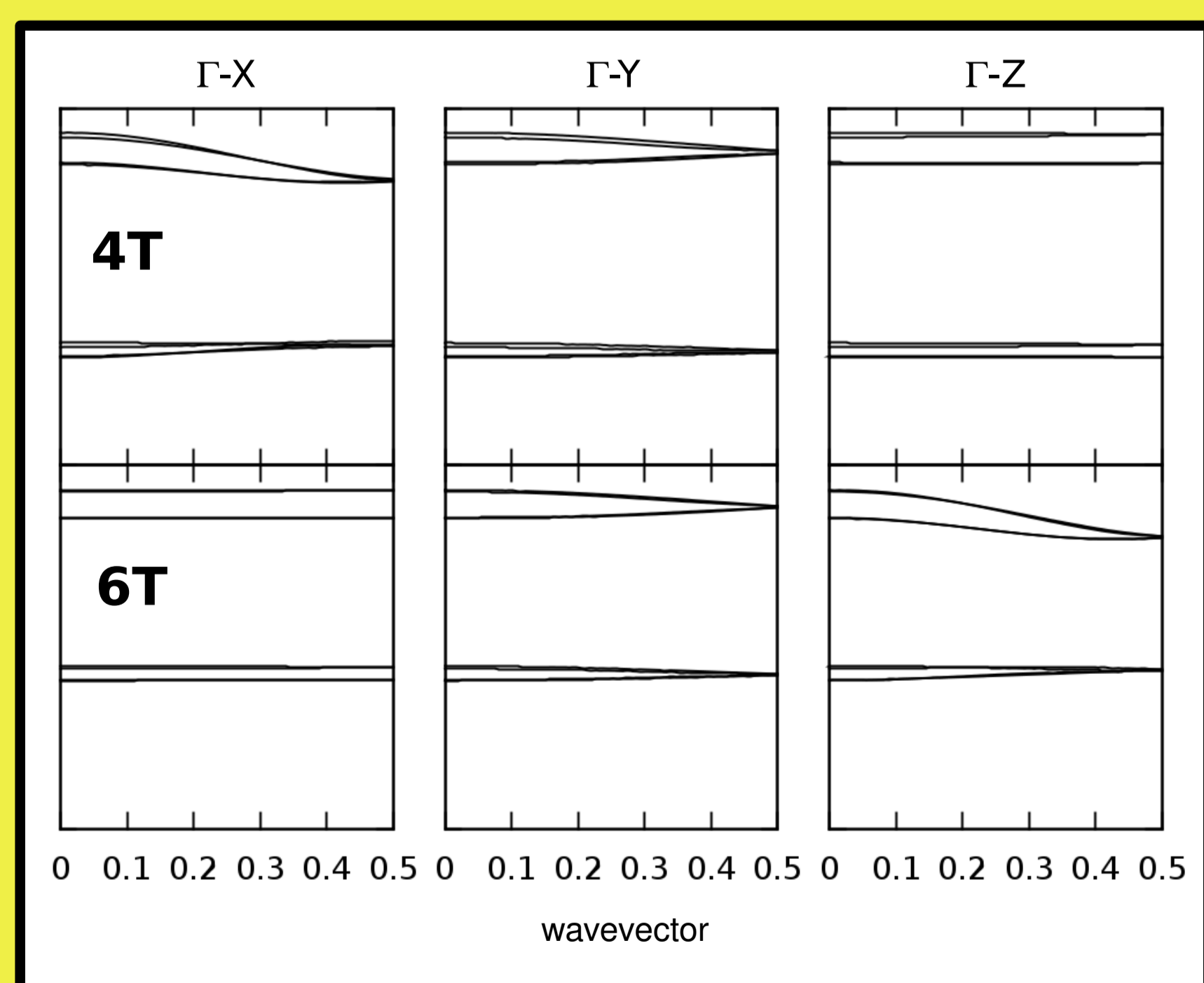


**Kwatertiofen vs. seksitiofen\*:**



\* wysokość linii odpowiada względnej wartości całki przeniesienia ładunku

**Całki przeniesienia ładunku\*:**



4T	6T
0.040	0.038
0.088	0.120
-0.019	-0.010
0.005	0.002
0.003	0.002

\* obliczone na podstawie dopasowania do struktury pasmowej (DFT w bazie fal płaskich z obciążeniem 310eV)

**Hipoteza:** Z uwagi na małą intensywność absorpcji oraz dużą podatność na pole elektryczne, to stany z przeniesieniem ładunku (CT) są odpowiedzialne za tę różnicę.

**Stany CT:**

$$E_{CT} = I - A + P_{e-h} + C$$

gdzie:

$I$  – potencjał jonizacyjny

$A$  – powinowactwo elektronowe

$P_{e-h}$  – energia polaryzacji kryształu przez elektron i dziurę

$C$  – ekranowane oddziaływanie kulombowskie między ładunkami

**Diagonalne energie stanów CT (z obliczeń mikroelektrostatycznych):**

4T	6T
2.94 <sup>a)</sup>	2.48
3.13	2.60
3.34	2.67
3.71	3.20
3.79	3.30

- skośny w płaszczyźnie największego upakowania
- wzdłuż krótszego okresu w płaszczyźnie największego upakowania
- wzdłuż dłuższego okresu w płaszczyźnie największego upakowania
- pomiędzy płaszczyznami największego upakowania

<sup>a)</sup> wszystkie energie wyrażone w eV

**Wnioski:**

Analiza porównawcza stanów z przeniesieniem ładunku dla kryształów kwatertiofenu i seksitiofenu wykazuje że:

- duża intensywność wysokoenergetycznej części widma EA kwatertiofenu wynika głównie z oddziaływania górnej (intensywnej) składowej Dawydowa ze stanem typu CT spolaryzowanym wzdłuż dłuższego z okresów identyczności w płaszczyźnie największego upakowania
- w widmie elektroabsorpcyjnym seksitiofenu oddziaływanie pomiędzy górną składową Dawydowa a stanem CT wzdłuż dłuższego okresu nie zaznacza się tak wyraźnie jak w przypadku 4T (z uwagi na dużą odległość energetyczną pomiędzy tymi stanami oraz małą wartość odpowiednich całek przeniesienia ładunku)
- udział pozapłaszczyznowych stanów CT w interpretacji widm EA jest znikome ze względu na bardzo małe wartości odpowiednich całek przeniesienia ładunku

Autorzy składają serdeczne podziękowania Panu prof. dr. hab. Piotrowi Petelenzowi za owocne rozmowy oraz cenne wskazówki.

**Publikacje:**

- G. Weiser and S. Möller, Org. Electronics **5** (2004) 91.
- S. Möller, G. Weiser and F. Garnier, Phys. Rev. B **61** (2000) 15749.
- M. Andrzejak, P. Petelenz, Mol. Cryst. Liq. Cryst. Sci. Technol., Sect A **355** (2001) 65.
- P. Petelenz, M. Sławik, W. Kulig, Phys. Stat. Sol. C - przyjęto