Рекомбинация носителей заряда в аморфных органических полупроводниках: эффекты пространственной корреляции энергетического ландшафта

Новиков С.В.^{1,2}, Тамеев А.Р.^{1,2}

¹ Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, 119071, Москва, Ленинский просп. 31

² Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», 101000, Москва, Мясницкая ул. 20

DOI 10.34077/Semicond2019-385

Характерной чертой аморфных органических полупроводников является сильная пространственная корреляция случайного энергетического ландшафта $U(\vec{r})$, оказывающая существенное влияние на прыжковый транспорт носителей заряда в этих материалах, в том числе и на процесс рекомбинации носителей. Между тем рекомбинация носителей заряда в коррелированном случайном ландшафте практически не исследовалась. В докладе представлена теория такой рекомбинации [1], наиболее подробно рассмотрен случай полярного аморфного материала (дипольного стекла), в котором энергия носителя определяется взаимодействием со случайно расположенными и ориентированными диполями и соответствующая корреляционная функция убывает очень медленно $C(\vec{r}) = \langle U(\vec{r})U(0) \rangle \propto 1/r$. Рекомбинация может быть описана как происходящая между частицами, эффективный заряд которых зависит от глубины ямы, в которой они захвачены. Величина заряда уменьшается с ростом глубины ямы, ослабляя притяжение между электроном и дыркой. Последующее усреднение по плотности занятых состояний дает возможность вычислить полную константу скорости рекомбинации γ . Аналогичное вычисление возможно и для других типов корреляционной функции, например описывающей неполярный материал с доминирующим вкладом молекулярных квадруполь, хотя качественная картина рекомбинации эффективных зарядов будет неприменима.

Рис.1. — Зависимость γ/γ_L в дипольном стекле от температуры для разных значений амплитуды беспорядка (указана у соответствующих кривых).

Основной результат заключается в том, что коррелированный электростатический беспорядок неизбежно ведет к уменьшению γ по сравнению с ланжевеновским значением $\gamma_L = 4\pi e(\mu_p + \mu_n)/\varepsilon$ (Рис. 1), и чем сильнее пространственные корреляции, тем меньше значение γ (здесь μ_p и μ_n - подвижности дырок и электронов, ε - диэлектрическая постоянная среды). Это именно эффект корреляций, поскольку сам по себе энергетический беспорядок, вне зависимости от его амплитуды, не ведет к отличию γ от γ_L . Этот вывод хорошо согласуется с результатами компьютерного моделирования рекомбинации в средах без корреляции [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФИ 16-29-06423_офи-м и Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

[1] S.V. Novikov, *J. Phys. Chem. C*, **122**, 22856 (2018).

[2] C. Groves, N.C. Greenham, *Phys. Rev. B*, **78**, 155205 (2008).