Работа учащегося ГБОУ города Москвы лицей №1511 при НИЯУ «МИФИ».

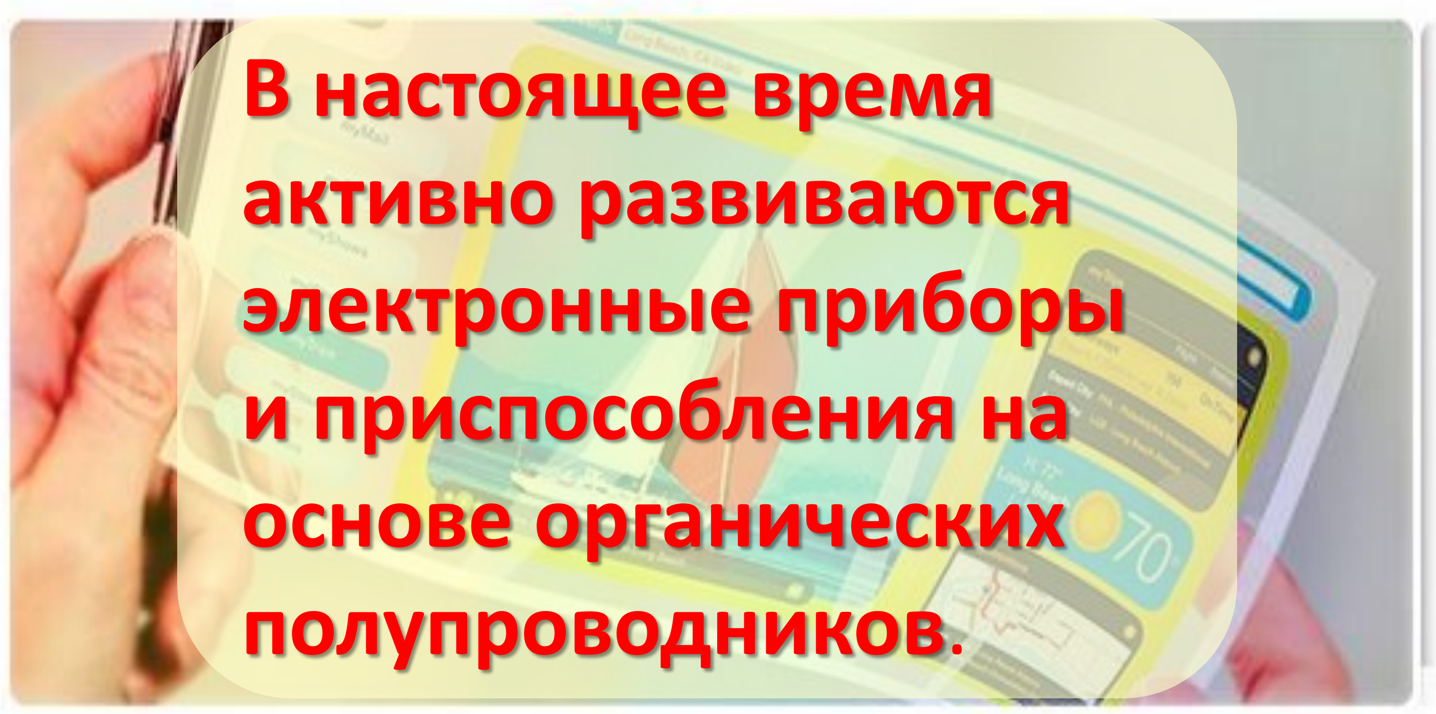
ПРЫЖКОВЫЙ ДРЕЙФ И ДИФФУЗИЯ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ: ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ МОНТЕ - КАРЛО

Выполнил: Каташкин Михаил Михайлович; научный руководитель: Никитенко Владимир Роленович, доктор ф.-м. наук, профессор каф. «Компьютерное моделирование и физика наноструктур и сверхпроводимости» НИЯУ МИФИ.

1.ЦЕЛЬ РАБОТЫ

1) Провести численное моделирование прыжковой диффузии и дрейфа носителей заряда в неупорядоченных органических материалах методом Монте - Карло
2) Исследовать зависимости коэффициента диффузии и подвижности от времени, температуры и степени беспорядка
3)Проверить выполнение соотношения Эйнштейна

2.ПРАКТИЧЕСКОЕ ЗНАЧЕНИЕ

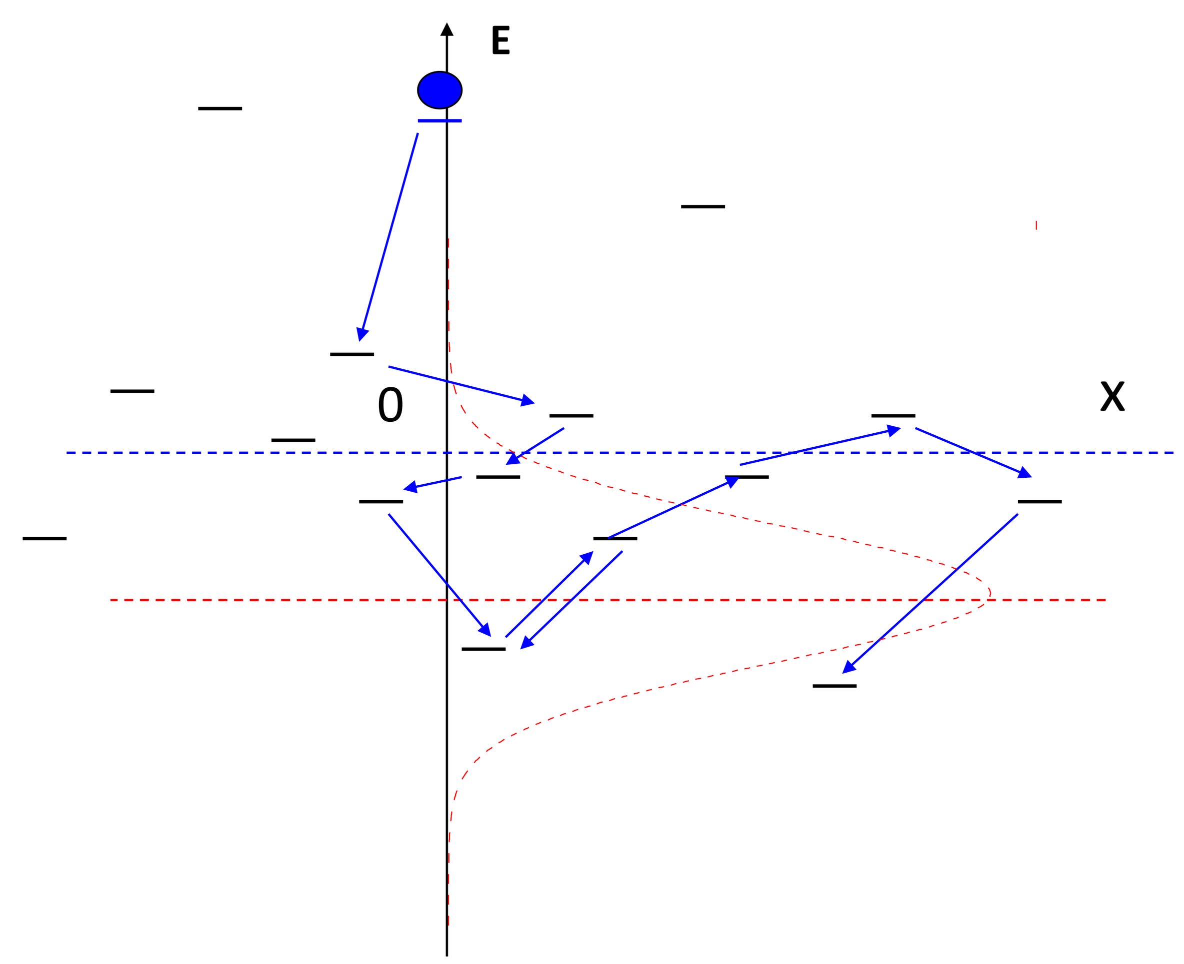


3.НАУЧНАЯ ЗНАЧИМОСТЬ

Перенос заряда в органических полупроводниках является прыжковым и поэтому имеет ряд необычных закономерностей. Моделирование переноса необходимо как для понимания этих закономерностей, так и для разработки электронных приборов (например, солнечных батарей)

В частности, зависимости коэффициента диффузии D и подвижности m фотогенерированных носителей заряда от времени и температуры, а также соотношение между D и m, требуют дополнительного исследования

4.ИССЛЕДУЕМЫЕ ВЕЛИЧИНЫ



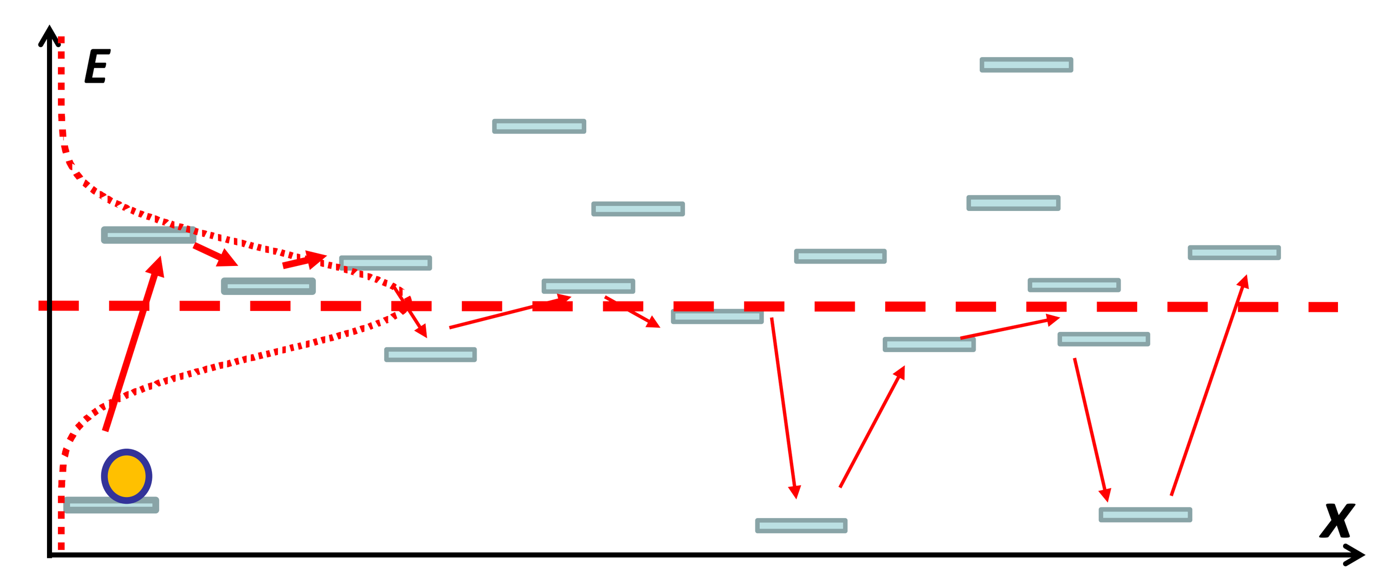
$$D = \left[\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2\right]/2t$$

$$\mu = \frac{\langle v\rangle}{F} = \frac{\langle x\rangle}{tF}$$

Соотношение Эйнштейна:

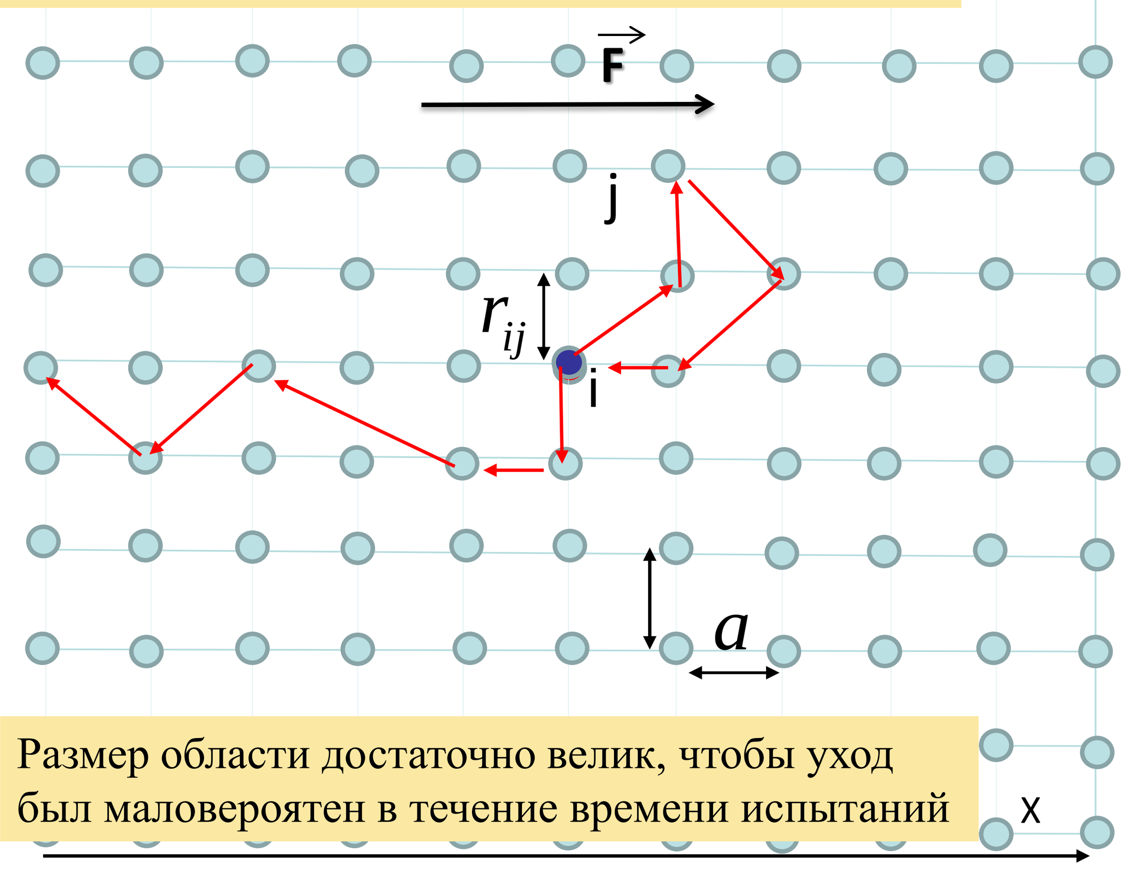
$$D/\mu = kT/e$$

5.ПРЫЖКОВЫЙ ТРАНСПОРТ



6. МОДЕЛЬ

Рассматривались случайные блуждания частицы по узлам регулярной решётки центров с гауссовским распределением энергий в электрическом поле.



Размер области достаточно велик, чтобы уход был маловероятен в течение времени испытаний

Распределение энергий состояний:

$$g(E) = \left(1\Big/\sqrt{\pi E_0^2}\right)\exp\left[-(E/E_0)^2\right]$$

Темпы переходов:

$$\nu = t_0^{-1}\exp\left[-\Delta E/kT\right],$$

$$\Delta E > 0,\ \ \Delta E = E_j - E_i + eF\Delta x$$

$$t_0 = \nu_0^{-1}\exp\left(2\gamma r_{ij}\right)$$

$$\nu = t_0^{-1}, E_j - E_i \le 0$$

Характерное время прыжка:

$$t = (1/6)\nu^{-1}$$

7.МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЙ

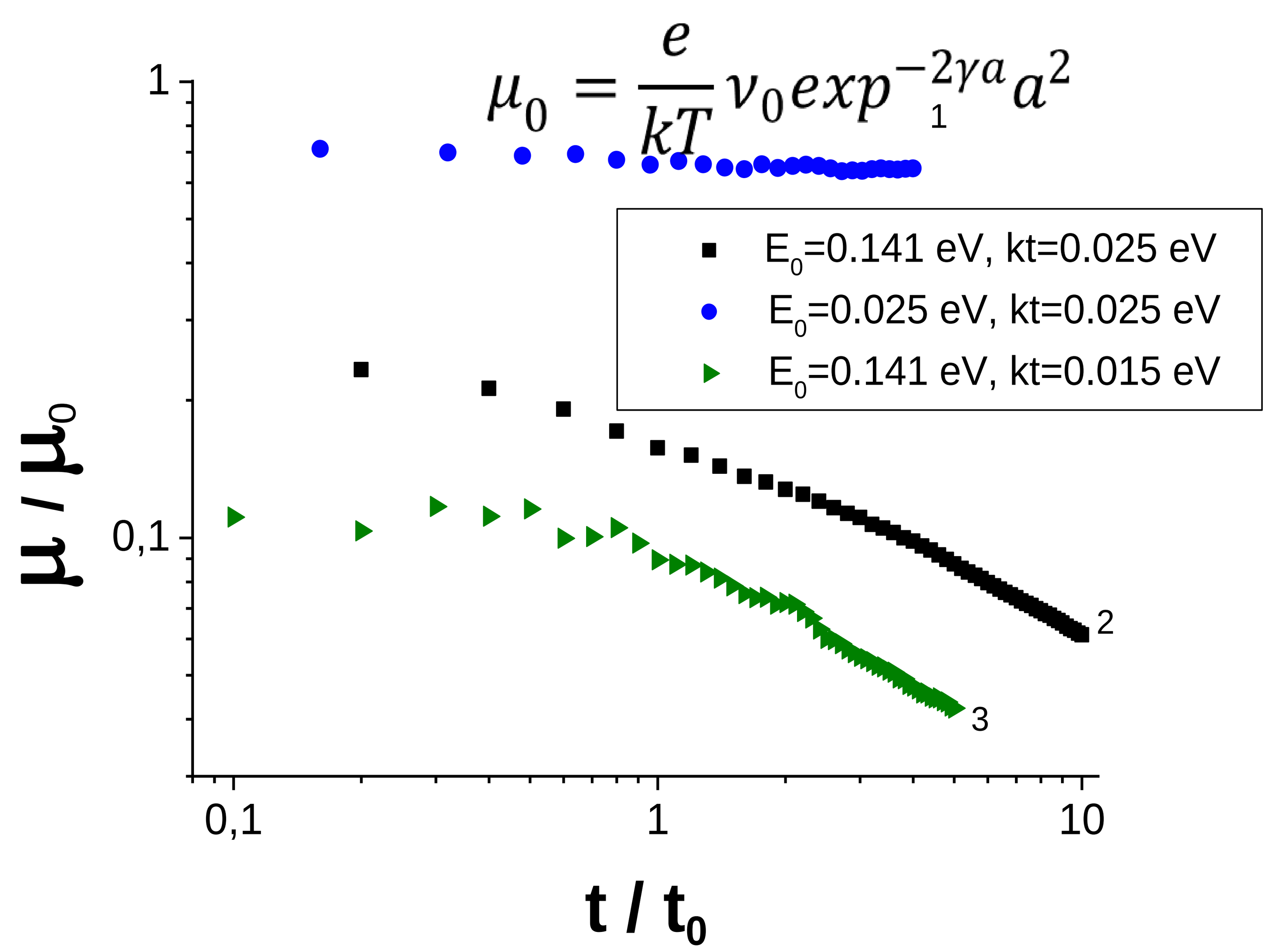
Численное моделирование произведено методом Монте-Карло с помощью генератора случайных чисел программы MATHEMATICA 5.

Алгоритм:
1. Задание случайного распределения энергий узлов в области.
2. Определение каждого конечного состояния.
3. Определение каждого времени прыжка.
4. Проверка превышения максимального времени прыжков
5. Вычисление коэффициента диффузии, подвижности, их отношения.
6. Вычисления повторяются с начала необходимое число раз.
7. Вычисляются средние значения рассматриваемых величин и их распределения.

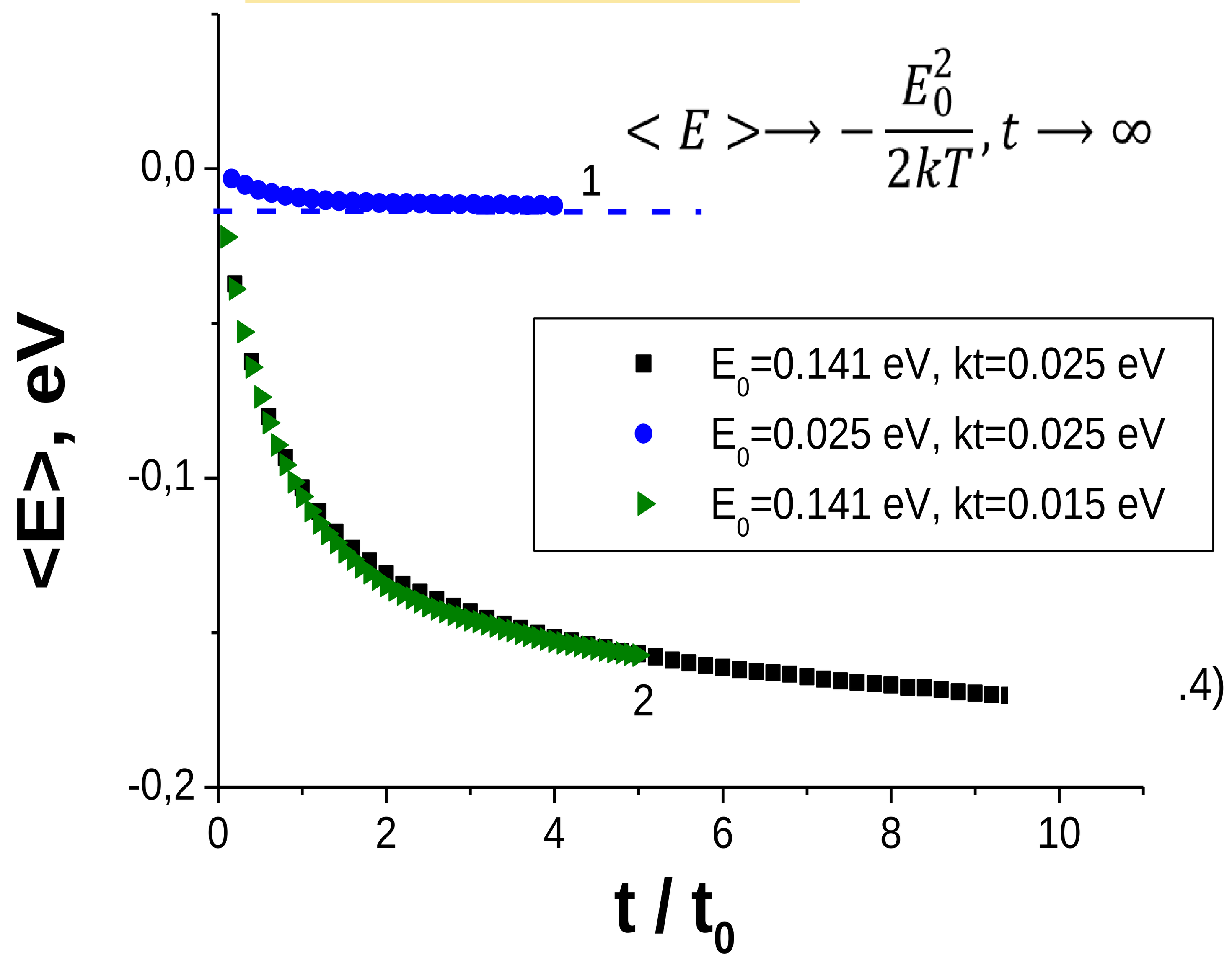
Вычисления проводятся до тех пор, пока не превышено предельное время вычислений или частица дошла до границы области.

РЕЗУЛЬТАТЫ

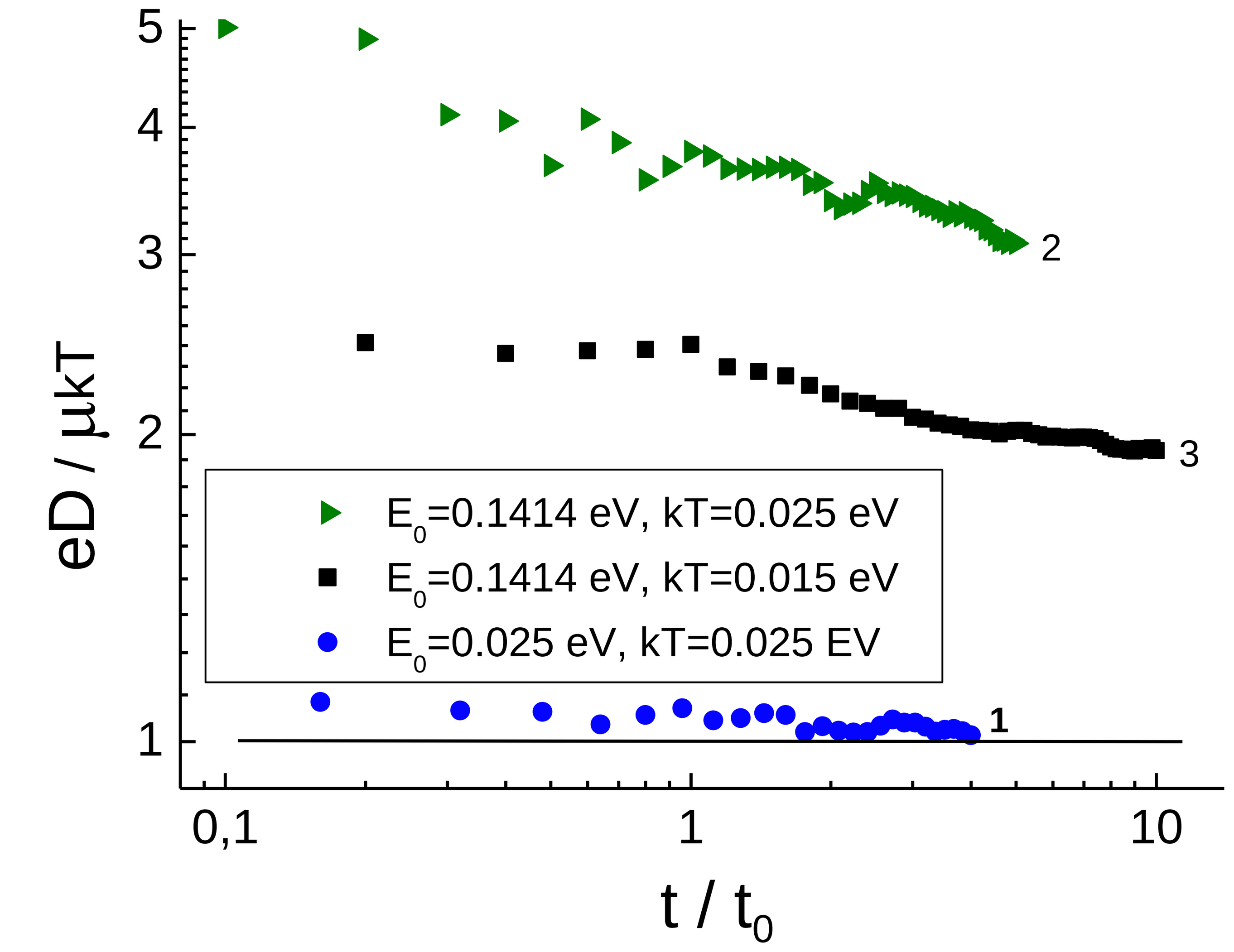
ПОДВИЖНОСТЬ



СРЕДНЯЯ ЭНЕРГИЯ



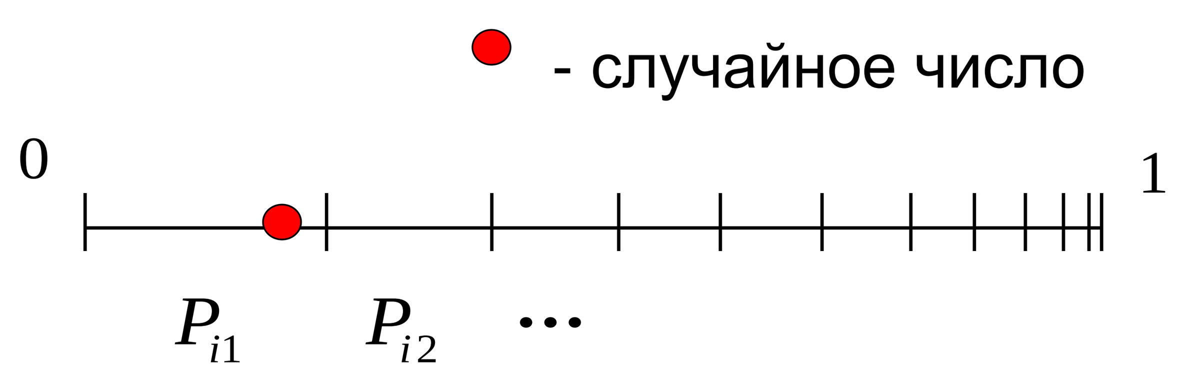
СООТНОШЕНИЕ ПОДВИЖНОСТИ И КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ



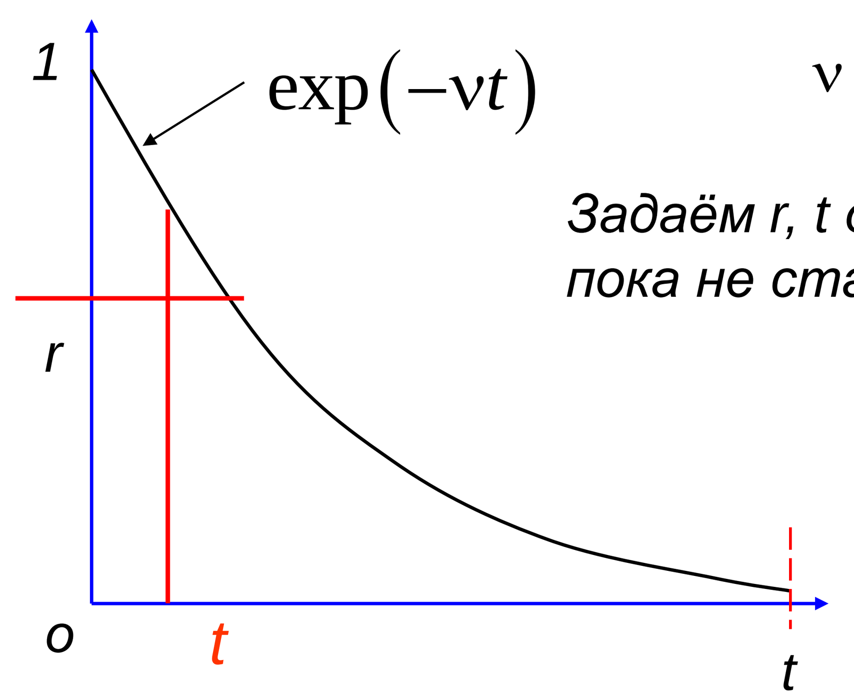
ПРИЛОЖЕНИЯ

ВЫБОР КОНЕЧНОГО СОСТОЯНИЯ

$$P_{ij} = \frac{\nu_{ij}}{\nu_{i1} + \nu_{i2} + \ldots + \nu_{iN}}$$



ВЕРОЯТНОСТЬ ОСТАТЬСЯ НА ИСХОДНОМ УЗЛЕ

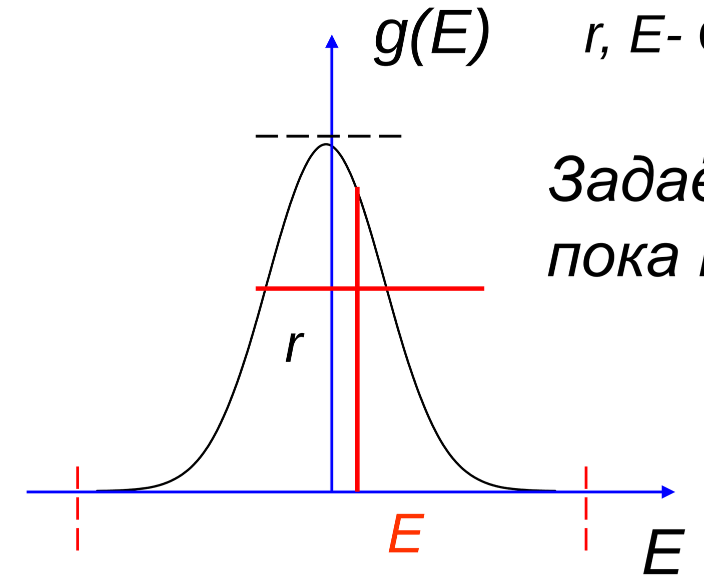


$$\nu = \nu_{i1} + \nu_{i2} + \ldots + \nu_{iN}$$

Задаём r, t до тех пор, пока не станет

$$\exp(-\nu t) > r$$

ЗАДАНИЕ СЛУЧАЙНОЙ ЭНЕРГИИ В СООТВЕТСТВИИ С ГАУССОВСКИМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ



r, E- случайные числа

Задаём r, E до тех пор, пока не станет

$$g(E) > r$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Звягин И.П. Кинетические явления в неупорядоченных полупроводниках. М., МГУ, 1984.
2. H. Bässler//Phys. Status Solidi B. 1981 V. 107. P. 15–45
3. И. М. Соболь. Метод Монте-Карло. М. Наука, 1985.

ВЫВОДЫ

Рассмотрены 2 предельных случая диффузии.

При слабом беспорядке ($E_0 \leq kT$) уже после нескольких прыжков величины D и μ достигают своих равновесных значений. Выполняется соотношение Эйнштейна: $D/\mu = kT/e$.

В случае $E_0 \gg kT$ на всем исследуемом интервале времени эти величины продолжают убывать, причем, как впервые показано для гауссовского распределения энергий, отношение $D/\mu \gg kT/e$ и убывает со временем.

По – видимому, причина отличий в том, что при сильном беспорядке транспорт происходит в условиях, далеких от термодинамического равновесия. Фотогенерированный носитель заряда в ходе случайных блужданий движется в основном прыжками вниз по энергии вплоть до конца испытания.

Все эти особенности неравновесной диффузии и дрейфа нужно учитывать при численном моделировании тонкопленочных электронных приборов.