

Влияние формы полевой зависимости вероятности диссоциации связанных электронно-дырочных пар на фототок и пространственное разрешение органических полевых фототранзисторов

В.А. Труханов^{1, *}

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
физический факультет, кафедра общей физики и волновых процессов
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 62

(Поступила в редакцию 29.04.2023; после доработки 19.06.2023; подписана в печать 28.06.2023)

В настоящей работе с помощью численного моделирования исследуются амбиполярные органические полевые фототранзисторы, в которых может иметь место пространственно-локализованный фотоэффект. Данный эффект состоит в том, что в канале транзистора имеется небольшая пространственно-локализованная фоточувствительная область, положением которой можно управлять, меняя напряжение на затворе. Целью настоящей работы является анализ взаимосвязи формы полевой зависимости вероятности диссоциации связанных электронно-дырочных пар (e/h -пар) с такими характеристиками исследуемых амбиполярных фототранзисторов, как нормированный фототок, пространственное разрешение, а также быстродействие. Показано, что оптимальной формой полевой зависимости вероятности диссоциации e/h -пар является форма, близкая к ступенчатой, которая может обеспечить высокое пространственное разрешение при больших значениях нормированного фототока без ухудшения быстродействия фототранзистора. Такая форма может быть достигнута, когда в органическом полупроводнике имеет место предельно узкое распределение e/h -пар по размеру, описываемое дельта-функцией. Также на примере нескольких распределений различной формы показано, что снижение ширины распределения ведет к увеличению пространственного разрешения. Обсуждаются подходы к подбору и модификации органических полупроводниковых материалов, которые бы обеспечили наиболее выраженный пространственно-локализованный фотоэффект в амбиполярных полевых транзисторах.

PACS: 42.79.Pw УДК: 535.215.6

Ключевые слова: органическая электроника, органические полупроводники, физика полупроводников, органический полевой транзистор, фототранзистор, пространственное разрешение, время отклика, амбиполярный транспорт зарядов.

DOI: [10.55959/MSU0579-9392.78.2360401](https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.78.2360401)

ВВЕДЕНИЕ

Органические полупроводниковые материалы являются перспективными для создания оптоэлектронных устройств, т.к. они могут обеспечить простоту и дешевизну производства, а также гибкость и малый вес. Кроме того, благодаря большому разнообразию органических соединений имеется возможность тонкого подбора параметров материалов, необходимых для создания тех или иных устройств с нужными свойствами. Органические полупроводники могут представлять собой сопряжённые полимеры [1], сопряжённые олигомеры [2], фуллерены [3], нанотрубки [4] и их производные, а также низкомолекулярные вещества, содержащие сопряжённые фрагменты. Можно выделить такие классы органических полупроводниковых материалов, как аморфные и поликристаллические плёнки, трёхмерные и двумерные кристаллы, а также смеси двух и более различных веществ (в частно-

сти, объёмный гетеропереход). Наиболее широко исследуемыми устройствами органической электроники являются органические светодиоды (OLED) [5], органические полевые транзисторы [6] и органические солнечные фотоэлементы и фотодиоды [7, 8]. Также представляют интерес и другие перспективные устройства, в частности исследуемые в настоящей работе фототранзисторы, которые объединяют в себе свойства полевых транзисторов и фотодиодов [9, 10]. Фототранзисторы могут быть униполярными, когда носители заряда в канале могут быть только одного типа (то есть либо только электроны, либо только дырки), либо амбиполярными, когда в канале носителями заряда могут выступать как электроны, так и дырки. Можно предположить, что более эффективными будут амбиполярные фототранзисторы, поскольку в таких устройствах и электроны, и дырки, образующиеся при поглощении света, могут достигнуть электродов и дать вклад в фототок [11, 12].

В недавней работе с помощью численного моделирования для амбиполярных органических транзисторов была показана возможность пространственно-локализованного фотоэффекта [13]. Суть

* E-mail: vttrukhanov@mail.ru

данного эффекта состоит в том, что в активном слое амбиполярного фототранзистора, работающего в амбиполярном режиме, имеется небольшая область с повышенной напряжённостью электрического поля, благодаря которому в данной области фотогенерируемые электроны и дырки разделяются более эффективно, чем в других областях активного слоя (рис. 1); данная область является фоточувствительной областью и её пространственным положением можно управлять, меняя напряжение на затворе, и таким образом зависимость фототока от напряжения на затворе V_G может воспроизводить зависимость интенсивности падающего излучения от пространственной координаты. Благодаря таким свойствам амбиполярные фототранзисторы могут выступать в качестве позиционно-чувствительных детекторов, которые разрабатываются в области органической оптоэлектроники [14], и могут быть использованы для измерителей расстояния, в микромеханических устройствах и т.д. [15].

В другой недавней работе с помощью численного моделирования были исследованы временные характеристики пространственно-локализованного фотоэффекта (быстродействие), а также изучено влияние различных параметров на такие характеристики фототранзисторов, как квантовая эффективность, нормированный фототок, время отклика и пространственное разрешение (см. статью автора в этом журнале № 4. С. 47. (2020)). В этой работе автора было показано, что существенное влияние оказывает параметр a_0 (средний размер электронно-дырочной пары), причём путём варьирования этого параметра можно добиться улучшения характеристик фототранзистора. Данный параметр определяет форму полевой зависимости вероятности $P(E)$ диссоциации связанных e/h -пар на свободные заряды под действием электрического поля напряжённости E .

Для описания зависимости $P(E)$ в этой работе была использована модель Онзагера–Брауна [16, 17], которая применяется для описания процессов генерации и рекомбинации носителей заряда в различных материалах, в том числе и в органических полупроводниках при моделировании солнечных элементов и фотодиодов [18, 19]. В данной модели описывается полевая зависимость скорости диссоциации связанных e/h -пар, а при расчёте вероятности $P(E)$ учитывается разброс по размерам связанных e/h -пар, при этом рассматриваются различные функции распределения по размерам $f(a)$, в частности гауссово распределение [20]. При этом такая модель довольно хорошо описывает экспериментальные данные для солнечных фотоэлементов на основе сопряжённых полимеров. Однако в последние годы в органической оптоэлектронике активно разрабатываются новые низкомолекулярные полупроводниковые материалы, которые имеют преимущества перед полимерами за счёт строго определённой молекулярной структуры и меньшего разброса характеристик. Функции распределения e/h -пар

по размерам для таких материалов будут отличаться от таковых для полимеров, распределение может быть более узким. Более того, модель Онзагера–Брауна может быть неприменима для новых материалов и зависимости $P(E)$ могут иметь произвольную форму. Поэтому актуальным является исследование того, как различные формы распределений по размерам для e/h -пар, а также вообще форма зависимости $P(E)$ влияют на характеристики оптоэлектронных устройств.

В настоящей работе было рассмотрено несколько различных форм распределений e/h -пар по размерам $f(a)$ и полевой зависимости вероятности P и исследовано их влияние на характеристики фототранзистора: отношение фототока к темновому току, пространственное разрешение и быстродействие. Новизна настоящей работы заключается в том, что впервые было рассмотрено влияние формы полевой зависимости вероятности диссоциации e/h -пар, а также формы их распределения по размерам $f(a)$ на выраженность пространственно-локализованного фотоэффекта в органических полевых фототранзисторах.

1. ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ ФОТОТРАНЗИСТОРА

Для исследования применялась численная модель фототранзистора, подробно описанная в указанной выше работе автора в этом журнале и основанная на уравнении Пуассона для электрического потенциала, уравнениях непрерывности и уравнениях дрейфа и диффузии носителей заряда. Модель является одномерной. Численные значения всех задаваемых параметров брались такими же, как и в предыдущей работе, если не указано иное. В уравнениях непрерывности для носителей заряда учтена зависимость от времени t , а также полевая зависимость темпов генерации и рекомбинации свободных электронов и дырок, описываемая вероятностью $P(E)$. В частности, уравнение непрерывности для дырок имеет вид:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{e} \frac{\partial j_p}{\partial x} = P(E) G(x) - (1 - P(E)) \alpha (np - n_0 p_0), \quad (1)$$

где n и p — концентрации электронов и дырок, j_n и j_p — плотности токов электронов и дырок, e — заряд электрона, $G(x)$ — темп генерации связанных e/h -пар, α — константа рекомбинации носителей заряда, n_0 и p_0 равновесные — концентрации электронов и дырок. Уравнение непрерывности для электронов имеет аналогичный вид, но с другим знаком при плотности тока j_n .

Рассматриваются различные формы полевой зависимости вероятности $P(E)$. В частности, $P(E)$ рассчитывается согласно модели Онзагера–Брауна по формулам:

$$P(E) = \int_0^\infty \frac{k_{diss}(a, E)}{k_{diss}(a, E) + k_f} f(a, a_0) da, \quad (2)$$

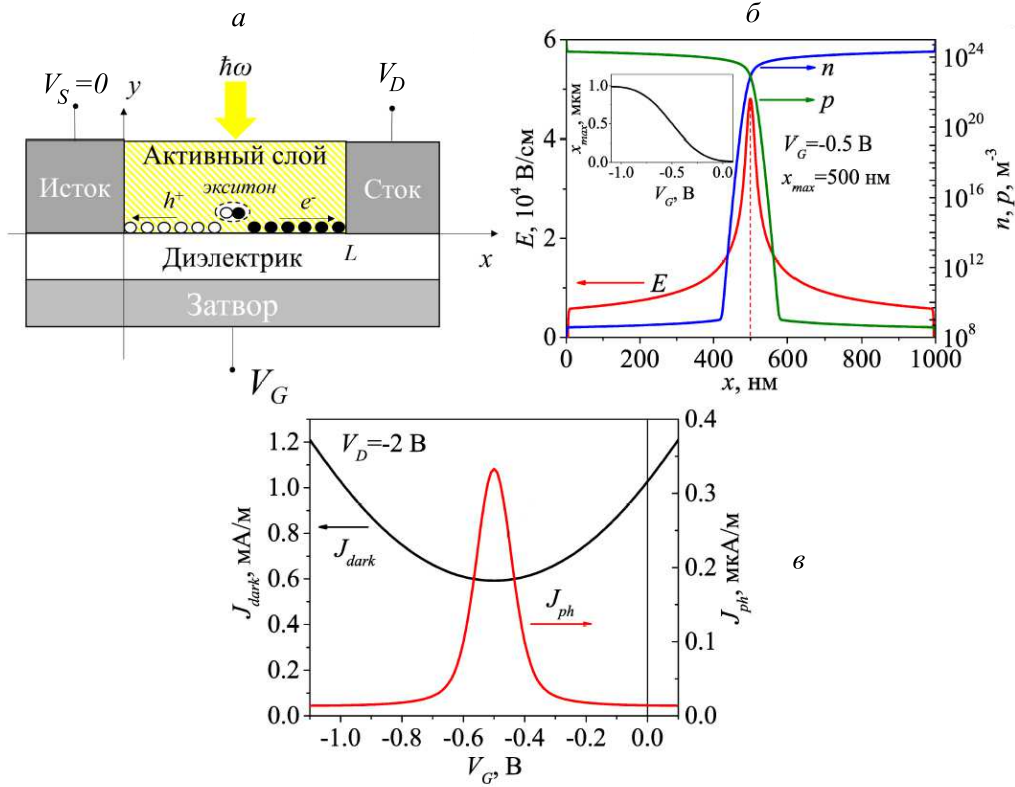


Рис. 1. *a* — Схема амбиполярного органического полевого фототранзистора (статья автора в этом журнале № 4. С. 47. (2020)). *б* — Распределения напряженности электрического поля E и концентраций электронов n и дырок p в канале амбиполярного фототранзистора (длина канала $L = 1$ мкм) при $V_G = -0.5$ В и $V_D = -2$ В, на вставке показана зависимость положения максимума $E(x)$ от напряжения на затворе V_G . *в* — Передаточная характеристика амбиполярного фототранзистора и зависимость фототока от напряжения на затворе V_G в случае падающего излучения, имеющего гауссово распределение интенсивности по оси x с центром в точке $x = 500$ нм и шириной на полувысоте 200 нм

$$k_{diss}(a, E) = \frac{3\alpha}{4\pi a^3} \exp\left[-\frac{e^2}{\varepsilon \varepsilon_0 a k T}\right] \cdot \frac{J_1(2\sqrt{-2b})}{\sqrt{-2b}},$$

$$b = \frac{e^3 |E|}{8\pi \varepsilon \varepsilon_0 k^2 T^2},$$
(3)

где k_{diss} — вероятность диссоциации связанных e/h -пар на свободные носители в единицу времени, k_f — вероятность рекомбинации (схлопывания, возврата к основному состоянию) связанных e/h -пар в единицу времени, a — размер связанной e/h -пары, a_0 — среднее значение a , $f(a, a_0)$ — функция распределения связанных e/h -пар по размерам (далее зависимость f от a_0 будет опущена), ε — диэлектрическая проницаемость активного слоя (органического полупроводника), ε_0 — диэлектрическая постоянная, k — постоянная Больцмана, T — температура активного слоя. Кроме зависимости $P(E)$, описываемой формулами (2) и (3), исследовались другие зависимости $P(E)$, задаваемые формулами, приведёнными в конце данного раздела. В рамках модели Онзагера–Брауна в настоящей работе рассматривались шесть различных функций распределения e/h -пар по размерам $f(a)$:

(i) дельта-функция (δ)

$$f(a) = \delta(a - a_0);$$
(4)

(ii) экспоненциальная функция (EXP)

$$f(a) = (1/a_0) \exp(-a/a_0);$$
(5)

(iii) квадратично-экспоненциальная функция (QEXP)

$$f(a) = (4a^2/a_0^3) \exp(-2a/a_0);$$
(6)

(iv) квадратично-гауссова функция (QG)

$$f(a) = (4a^2/(\sqrt{\pi}a_0^3)) \exp(-a^2/a_0^2);$$
(7)

(v) смещённое распределение Гаусса (FG)

$$f(a) = \left[2\sqrt{\ln 2}/(\sqrt{\pi}w_f)\right] \exp\left[-4 \ln 2(a - a_0)^2/w_f^2\right];$$
(8)

(vi) прямоугольное распределение (FR)

$$f(a) = \begin{cases} 1/w_f, & a_0 - w_f < a \leq a_0 + w_f, \\ 0, & a_0 - w_f \geq a, \quad a > a_0 + w_f. \end{cases}$$
(9)

Данные функции использовались для описания процессов фотогенерации в различных веществах [21–23]. Последние два распределения характеризуются дополнительным параметром w_f , определяющим ширину распределения на половине высоты.

Также дополнительно рассматривались три различные формы полевой зависимости для вероятности диссоциации $P(E)$: константная вероятность, ступенчатая функция (гиперболический тангенс) и экспоненциальная (выпуклая) функция:

(i) константа (const)

$$P(E) = P_0 = \text{const}; \quad (10)$$

(ii) ступенчатая функция (tanh)

$$P(E) = \frac{1 - P_0}{1 + \exp[-\ln 19 \cdot (E - E_0)/w_P]} + P_0; \quad (11)$$

(iii) экспонента (exp)

$$P(E) = 1 - (1 - P_0) \exp(-E/E_0). \quad (12)$$

Параметр w_P характеризует ширину «размытия» ступени, параметр P_0 определяет значение вероятности при нулевой напряжённости электрического поля (для зависимости по формуле (11) — приблизительно), параметр E_0 в случае ступенчатой функции ($P(E)$) определяет положение ступени, а в случае экспоненциальной зависимости $P(E)$ обозначает некоторую характерную напряжённость электрического поля, при которой величина $1 - P$ изменяется в e раз по сравнению со значением при $E = 0$.

Последние три формулы описывают некоторые гипотетические формы зависимости $P(E)$ вне рамок модели Онзагера–Брауна. Данные формы были выбраны из соображений простоты (не более одной точки перегиба), а также что вероятность P должна быть неубывающей функцией E .

Для перечисленных выше функций $f(a)$ и $P(E)$ при различных значениях параметров, описывающих данные функции, были рассчитаны значения следующих характеристик фототранзисторов: отношение фототока к темновому току J_{ph}/J_{dark} (т.н. нормированный фототок), пространственное разрешение и быстродействие. Данные характеристики рассчитывались аналогично тому, как это проводилось в указанной выше работе автора. Внешняя квантовая эффективность не исследовалась, поскольку её значения пропорциональны фототоку и в случае варьирования параметров функций $f(a)$ и $P(E)$ существенно будет изменяться только фототок, а темновой ток будет меняться слабо, и поэтому влияние данных параметров на внешнюю квантовую эффективность будет аналогично влиянию на отношение J_{ph}/J_{dark} . Значение J_{ph}/J_{dark} бралось максимальным по V_G (а именно при $V_G = -0.5$ В), при этом распределение темпа генерации e/h -пар $G(x)$ (которое пропорционально

интенсивности падающего излучения) бралось в виде гауссовой функции с центром в середине канала (т.е. при $x = 500$ нм) с шириной на полувысоте 200 нм. Пространственное разрешение характеризовалось параметром $\Delta W_R = W_R - 100$ нм, где W_R — ширина на половине высоты зависимости J_{ph}/J_{dark} от V_G , полученной при зависимости $G(x)$ прямоугольной формы с центром в середине канала (т.е. в точке $x = 500$ нм) и шириной 100 нм. Времена отклика рассчитывались для мгновенного включения падающего излучения с гауссовым распределением интенсивности по x с центром в середине канала и шириной на полувысоте 200 нм, а также для мгновенного переключения напряжения V_G с -0.05 В до -0.5 В и с -0.44 до -0.43 В. В случае включения падающего излучения рассчитывались два времени отклика $\tau_{1,2}$ из аппроксимации зависимости фототока от времени биэкспоненциальной функцией. В случае переключения напряжения время отклика τ_v рассчитывалось из аппроксимации зависимости отношения J_{ph}/J_{dark} от времени моноэкспоненциальной функцией. Во всех расчётах напряжение между стоком и истоком V_D бралось равным -2 В.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Сначала было исследовано влияние формы распределения $f(a)$ e/h -пар по размеру на полевую зависимость вероятности их диссоциации $P(E)$ и на характеристики фототранзистора (нормированный фототок J_{ph}/J_{dark} , пространственное разрешение и быстродействие) в рамках модели Онзагера–Брауна, когда вероятность $P(E)$ описывается формулами (2)–(3). Для четырех основных функций распределения $f(a)$, известных из литературных данных [21–23] и описываемых формулами (4)–(7), а именно дельта-функции, экспоненциальной, квадратично-экспоненциальной и квадратично-гауссовой, соответствующие зависимости $P(E)$ приведены на рис. 2, а. На вставке показаны сами распределения. Значение параметра a_0 , который характеризует средний размер связанной e/h -пары, выбрано равным 1.3 нм, значение скорости рекомбинации связанных e/h -пар равно 10^4 с $^{-1}$. Для случая, когда зависимость $f(a)$ представляет собой дельта-функцию, полевая зависимость вероятности $P(E)$ имеет S-образную форму: при напряженности электрического поля $E < 10^5$ В/см вероятность диссоциации связанных e/h -пар близка к нулю, в диапазоне напряженности поля от 1×10^5 до 3×10^5 В/см полевая зависимость вероятности P наиболее резкая, а при значениях E , больших 3×10^5 В/см, значение вероятности P близко к единице. Для трёх других функций распределения $f(a)$ зависимость $P(E)$ имеет форму выпуклых растущих функций, причём наибольшая скорость возрастания $P(E)$ имеет место для квадратично-гауссовой функции распределения $f(a)$, а в случае экспоненциальной формы функции распределения $f(a)$ зависимость $P(E)$ наиболее пологая.

Исходя из приведённых зависимостей можно заключить, что ширина функции распределения $f(a)$ оказывает существенное влияние на форму полевой зависимости вероятности P . На рис. 2, б, в приведены зависимости $P(E)$, рассчитанные в рамках модели Онзагера–Брауна по формулам (2)–(3), для гауссовой и прямоугольной функций распределения связанных e/h -пар по размерам $f(a)$, описываемых формулами (8)–(9), с различными ширинами на половине высоты; значения параметров a_0 и k_f взяты такие же, как и в предыдущем случае. Видно, что как и для гауссовой, так и для прямоугольной функции распределения $f(a)$ при уменьшении ширины распределения полевая зависимость вероятности P становится существенно более выраженной — происходит переход от плавной выпуклой зависимости к S-образной форме $P(E)$, близкой к ступенчатой форме.

Исходя из формы зависимости напряженности поля от координаты x (рис. 1, б), имеющего вид пика, положением которого можно управлять, меняя напряжение V_G , можно предположить, что наиболее предпочтительной формой зависимости $P(E)$ будет ступенчатая зависимость с положением ступени при напряженности поля, чуть меньше, чем его значение в максимуме. Это позволит максимизировать вклад в фототок небольшой области вблизи максимума напряженности электрического поля и минимизировать вклад в фототок от других областей активного слоя, что должно существенно улучшить пространственное разрешение без снижения квантовой эффективности и быстродействия. Из рассмотренных функций распределения $f(a)$ наиболее близкая к ступенчатой зависимость $P(E)$ получается для $f(a)$ в виде дельта-функции.

Далее было рассмотрено влияние формы функций распределения e/h -пар по размерам $f(a)$ на характеристики фототранзисторов, такие как нормированный фототок, пространственное разрешение и быстродействие при различных значениях параметров a_0 , k_f и w_f . На рис. 3, а, б приведены рассчитанные зависимости нормированного фототока J_{ph}/J_{dark} , параметра пространственного разрешения ΔW_R и времени отклика τ_1 от среднего значения размера связанных e/h -пар a_0 (при $k_f = 10^4 \text{ с}^{-1}$) и от скорости рекомбинации k_f (при $a_0 = 1.3 \text{ нм}$) для экспоненциального, квадратично-экспоненциального и квадратично-гауссова распределения по размерам $f(a)$, а также для $f(a)$ в виде дельта-функции. Для всех распределений наблюдается увеличение нормированного фототока с одновременным увеличением параметра ΔW_R (т.е. ухудшением пространственного разрешения) при увеличении среднего размера e/h -пары a_0 . При изменении скорости рекомбинации k_f в диапазоне от 10^2 до $2 \times 10^4 \text{ с}^{-1}$ пространственное разрешение почти не изменяется для всех функций распределения $f(a)$, имеет место лишь небольшой рост с уменьшением k_f при k_f менее 2000 с^{-1} , а нормированный фототок J_{ph}/J_{dark} незначительно растёт с уменьшением k_f для всех функций $f(a)$ кроме дельта-функ-

ции; в случае когда $f(a)$ является дельта-функцией, наблюдается существенный рост нормированного фототока J_{ph}/J_{dark} при уменьшении скорости рекомбинации k_f , который составляет более двух порядков при уменьшении k_f с 2×10^4 до 10^2 с^{-1} . Время отклика на падающее излучение τ_1 незначительно растёт при увеличении a_0 и практически не меняется при изменении k_f для всех функций распределения $f(a)$. Также можно заметить, что зависимости J_{ph}/J_{dark} и ΔW_R от параметров a_0 и k_f становятся тем более выраженными, чем более узкой является функция распределения: так, для экспоненциального распределения (вставка на рис. 2, а, красная линия), которая является наиболее «размытой» из рассмотренных функций $f(a)$, данные зависимости наименее выражены, а в случае квадратично-экспоненциальной функции распределения (вставка на рис. 2, а, синяя линия) данные зависимости становятся чуть более резкими. В случае квадратично-гауссовой функции $f(a)$, которая, как можно видеть из вставки на рис. 2, а (розовая линия), является более узкой, чем квадратично-экспоненциальное распределение, наблюдается ещё более выраженное изменение J_{ph}/J_{dark} и ΔW_R при изменении параметров a_0 и k_f (рис. 3, а, б). В случае же дельта-функции, которая является предельно узкой, данные зависимости наиболее выражены, как указано выше. Поэтому представляет интерес исследовать зависимости характеристик фототранзистора от ширины функции распределения $f(a)$.

На рис. 3, в приведены рассчитанные зависимости нормированного фототока J_{ph}/J_{dark} , параметра пространственного разрешения ΔW_R и времени отклика τ_1 от ширины w_f распределения связанных e/h -пар по размерам для случаев гауссова и прямоугольного распределений, описываемых формулами (8) и (9) соответственно, при $a_0 = 1.3 \text{ нм}$ и $k_f = 10^4 \text{ с}^{-1}$. Для обоих распределений имеет место существенный рост нормированного фототока J_{ph}/J_{dark} при одновременном ухудшении пространственного разрешения при увеличении ширины w_f ; при этом время отклика растёт незначительно, время отклика τ_1 практически одинаковое как и для гауссова, так и для прямоугольного распределений, и изменяется с 2.4 нс до 2.5 нс при увеличении ширины распределения w_f в десять раз с 0.1 нм до 1 нм.

На графиках зависимостей J_{ph}/J_{dark} и ΔW_R от a_0 для четырёх различных функций распределения $f(a)$, представленных на рис. 3, а, можно выделить диапазон значений аргумента a_0 от 1.7 до 1.8 нм, в котором в случае дельта-функции $f(a)$ значения нормированного фототока J_{ph}/J_{dark} оказываются выше, чем для трёх других функций распределения $f(a)$, при этом пространственное разрешение оказывается наилучшим (параметр ΔW_R оказывается ниже для дельта-функции, чем для трёх других функций распределения), а время отклика приблизительно такое же, как и для других распределений. То есть когда функция распределения связанных e/h -пар по размерам $f(a)$ имеет

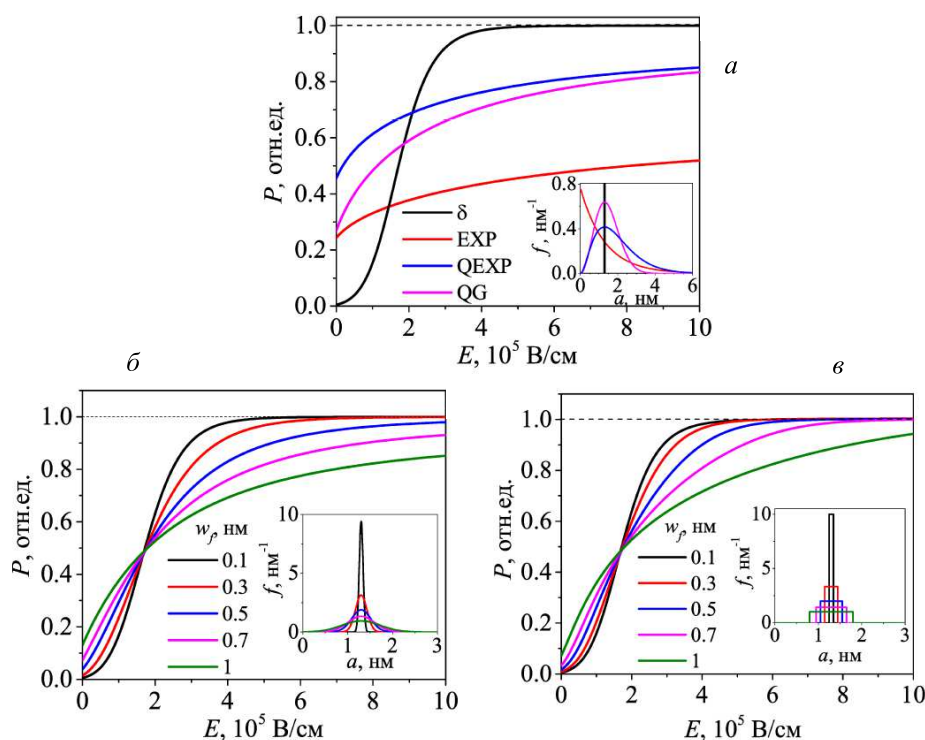


Рис. 2. Зависимости вероятности диссоциации связанных электронно-дырочных пар от напряжённости электрического поля для различных форм функций распределения электронно-дырочных пар по их размерам $f(a)$: экспоненциальное, квадратично-экспоненциальное, квадратично-гауссово, дельта-функция (а), гауссовы (б) и прямоугольные (в) распределения с различными значениями ширины на полувысоте w_f . На вставках показаны соответствующие распределения $f(a)$

вид дельта-функции, при некотором диапазоне значений a_0 (1.7–1.8 нм) достигается наибольшее значение нормированного фототока при наилучшем пространственном разрешении без ухудшения быстродействия фототранзистора. Далее был более подробно исследован случай, когда значение a_0 лежит в таком диапазоне значений, а именно, когда $a_0 = 1.75$ нм. На рис. 3, г приведены зависимости J_{ph}/J_{dark} , ΔW_R и τ_1 от k_f при таком значении a_0 для случая дельта-функции $f(a)$ — все зависимости оказываются гораздо более выраженные, чем при значении $a_0 = 1.3$ нм: в частности при изменении k_f с 2×10^4 с^{-1} до 10^2 с^{-1} нормированный фототок увеличивается на порядок, но при этом на порядок увеличиваются параметры ΔW_R и τ_1 (т.е. существенно ухудшается пространственное и временное разрешения). На вставке рис. 3, г приведены графики зависимости вероятности диссоциации связанных e/h -пар P от напряжённости электрического поля E для данного случая. Зависимость $P(E)$ имеет пороговый характер, который наиболее выражен при значениях k_f , равных или более 10^4 с^{-1} : значение P мало при значениях E , меньших некоторого порогового значения, затем оно резко растет вблизи порогового значения E и далее асимптотически стремится к единице при дальнейшем увеличении E . При снижении k_f пороговое значение E уменьшается, а подпороговое значение P увеличивается. При k_f менее 10^3 с^{-1} вероятность P близка

к единице при любых E , этим объясняется рост нормированного фототока и снижение пространственного разрешения при уменьшении k_f . При значении $k_f = 10^4$ с^{-1} пороговое значение E имеет порядок 10^4 В/см и близко к максимальному значению напряжённости поля в канале (рис. 1, б, красная кривая), что является оптимальным условием достижения высоких значений внешней квантовой эффективности, фототока и пространственного разрешения, и это объясняет описанные выше результаты, полученные для дельта-функции $f(a)$ при $a_0 = 1.75$ нм.

Далее были рассмотрены зависимости $P(E)$ в общем виде, которые могут иметь место в органических полупроводниковых материалах, в которых модель Онзагера–Брауна может быть неприменима. Были рассмотрены три формы $P(E)$, описываемые формулами (10)–(12): константная, ступенчатая (S-образная, пороговая, гиперболический тангенс) и экспоненциальная (выпуклая). На рис. 4, а приведены рассчитанные зависимости J_{ph}/J_{dark} , ΔW_R и τ_1 от параметра E_0 при $P(E)$ выпуклой и ступенчатой формы. Для ступенчатой формы было взято значение параметра $w_p = 5 \times 10^3$ В/см. В случае экспоненциальной формы $P(E)$ при увеличении параметра E_0 , характеризующего в данном случае скорость нарастания $P(E)$, снижается параметр ΔW_R (примерно на порядок при изменении E_0 в 5 раз) и время отклика τ_1 . Таким образом,

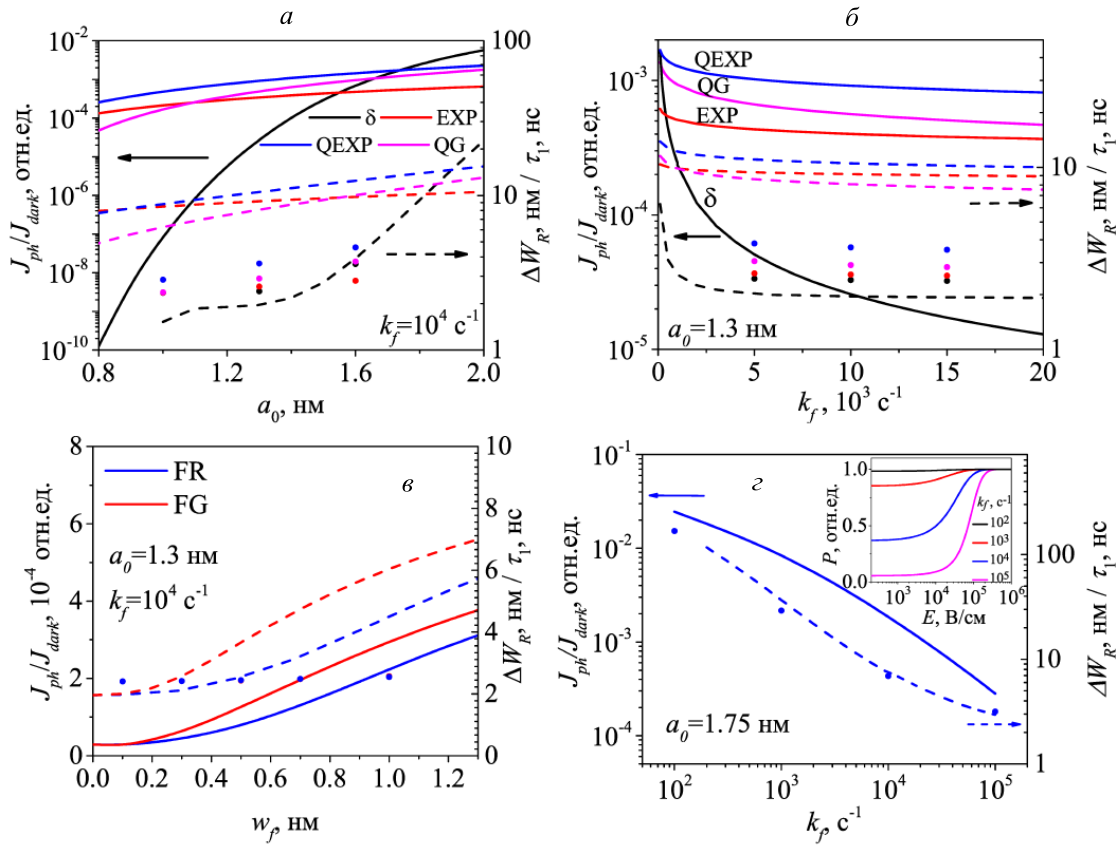


Рис. 3. Зависимости максимального значения нормированного фототока J_{ph}/J_{dark} (сплошные линии, шкала слева), параметра ΔW_R , характеризующего пространственное разрешение (штриховые линии, шкала справа), и времени отклика на включение падающего излучения τ_1 (отдельные точки, шкала справа): (а) от размера a_0 и (б) от скорости рекомбинации связанных e/h -пар k_f для четырёх различных распределений $f(a)$, описываемых формулами (4)–(7); (в) от ширины w_f распределения связанных e/h -пар в случае гауссова (красные линии) и в случае прямоугольного (синие линии) распределений, описываемых формулами (8) и (9) соответственно; (г) от скорости рекомбинации связанных e/h -пар k_f в случае дельта-функции распределения $f(a)$ при $a_0 = 1.75 \text{ нм}$ (на вставке показаны зависимости $P(E)$ для различных значений k_f для данного случая)

пространственное и временное разрешение улучшаются. Однако также с такой же скоростью снижается и нормированный фототок J_{ph}/J_{dark} (также примерно на порядок при изменении E_0 в 5 раз). В случае ступенчатой формы $P(E)$ параметр E_0 характеризует пороговое значение напряженности электрического поля, при котором вероятность P резко изменяется от 0 до 1, и при увеличении данного параметра E_0 нормированный фототок снижается, как и в случае экспоненциальной формы $P(E)$, однако параметр ΔW_R снижается гораздо быстрее при $E_0 < 2.5 \times 10^4 \text{ В/м}$ (данное значение приблизительно соответствует половине высоты максимума напряженности электрического поля в канале фототранзистора, распределение которого показано на рис. 1, б, красная кривая). При $E_0 > 2.5 \times 10^4 \text{ В/см}$ для $P(E)$ ступенчатой формы снижение параметра ΔW_R замедляется, а нормированный фототок снижается быстрее с увеличением E_0 , чем в случае $P(E)$ экспоненциальной формы. Таким образом, в случае $P(E)$ ступенчатой формы, когда пороговое значение E_0 приблизительно равно половине максимума напряженности электрическо-

го поля в фоточувствительной области фототранзистора, может быть достигнуто наилучшее пространственное разрешение без существенного снижения нормированного фототока. Время отклика τ_1 убывает с увеличением E_0 для обеих форм $P(E)$, причём для ступенчатой формы зависимость более резкая, при $E_0 = 2.5 \times 10^4 \text{ В/см}$ время $\tau_1 = 20 \text{ нс}$.

На рис. 4, б приведены рассчитанные зависимости J_{ph}/J_{dark} , ΔW_R и τ_1 от параметра P_0 для зависимостей $P(E)$ ступенчатой и экспоненциальной форм, а также для константного значения P . Нормированный фототок, параметр ΔW_R и время отклика увеличиваются при увеличении P_0 и сходятся к общим для трёх форм значениям при $P_0 = 1$, поскольку в данном случае исчезает различие между тремя формами $P(E)$. Наибольшие значения нормированного фототока получаются в случае экспоненциальной формы $P(E)$. Наилучшее пространственное разрешение (наименьшее значение ΔW_R) достигается в случае $P(E)$ ступенчатой формы при $P_0 < 0.5$, причём значения нормированного фототока существенно не снижаются и близки к значениям для экспоненциальной формы $P(E)$; однако

для ступенчатой формы имеет место наибольшее время отклика. Наименьшее время отклика достигается в случае $P = P_0 = \text{const}$ при небольших значениях P_0 , но пространственное разрешение и значения нормированного фототока в этом случае наилучшие. Таким образом, при небольших значениях P_0 экспоненциальная форма $P(E)$ обеспечивает наибольшие значения нормированного фототока при среднем пространственном разрешении и быстродействии; при ступенчатой форме достигаются высокие значения пространственного разрешения и нормированного фототока, быстродействие невелико; в случае константного значения P нормированный фототок и пространственное разрешение невелики, причём нормированный фототок быстро снижается при уменьшении P_0 , но при этом быстродействие лучше, чем в случае полевой зависимости $P(E)$ той или иной формы.

Также для ступенчатой зависимости было исследовано влияние параметра w_f на J_{ph}/J_{dark} , ΔW_R и τ_1 и было показано, что при увеличении данного параметра нормированный фототок, параметр ΔW_R и время отклика снижаются в одинаковой степени.

В настоящей работе также было исследовано влияние формы распределения $f(a)$ и зависимости $P(E)$ на время отклика τ_2 на включение падающего излучения и на время отклика τ_v на изменение напряжения на затворе ΔV_G . Время отклика τ_2 при изменении формы функции распределения $f(a)$ и зависимости $P(E)$ ведёт себя качественно практически так же, как и время отклика τ_1 , а время отклика τ_v очень слабо зависит от формы функции распределения $f(a)$ и зависимости $P(E)$ и остается в пределах 2.3–2.5 мкс при $\Delta V_G = 0.45$ В и 4.3–4.7 мкс при $\Delta V_G = 0.01$ В.

Форма распределения $f(a)$ и зависимости $P(E)$ может влиять на распределение электрического поля в канале транзистора, в частности на высоту пика в фоточувствительной области. На рис. 5, а, б приведены зависимости напряжённости электрического поля E в канале транзистора от координаты x для различных форм распределения $f(a)$ и для различных форм полевой зависимости $P(E)$, рассмотренных в настоящей работе. Для экспоненциального, квадратично-экспоненциального и квадратично-гауссова распределения $f(a)$ зависимости $E(x)$ получены при значениях параметров $a_0 = 1.3$ нм и $k_f = 10^4$ с⁻¹, а для дельта-функции, помимо этих значений, также ещё и при $a_0 = 1.75$ нм. В случае ступенчатой и экспоненциальной форм полевой зависимости $P(E)$ распределения электрического поля в канале получены при значениях параметров $E_0 = 2.5 \times 10^4$ В/см, $w_P = 5 \times 10^3$ В/см и $P_0 = 0$, а в случае константной вероятности $P = P_0 = \text{const}$ данные распределения напряжённости поля получены для трех различных значений P_0 : 0.1, 0.5 и 0.9. Из полученных распределений поля в канале видно, что значение максимальной напряжённости электрического поля зависит от формы распределения $f(a)$ и зависимости $P(E)$

и почти не влияет на форму зависимости $E(x)$, кроме случая ступенчатой формы $P(E)$. Наибольшие значения максимума E наблюдаются для дельта-функции при $a_0 = 1.3$ нм, а также константной вероятности $P = 0.1$, наименьшие значения — для ступенчатой формы $P(E)$ и для дельта-функции $f(a)$ при $a_0 = 1.75$ нм. Вообще в первом приближении имеется зависимость максимального значения E от значения вероятности P : чем больше вероятность P , тем меньше максимальное значение E , в этом можно убедиться, посмотрев на зависимости $P(E)$, приведенные рис. 2, а и на вставках на рис. 3, г и рис. 4, а, и взяв значения P в диапазоне E примерно от 2×10^4 до 5×10^4 В/см, что соответствует максимальным значениям напряженности поля в канале фототранзистора. Такая зависимость объясняется тем, что при меньшей вероятности P скорость рекомбинации носителей заряда увеличивается, т.к. она пропорциональна $1-P$ согласно уравнению (1), и это приводит к обеднению свободными носителями области рекомбинации, из-за чего в данной области увеличивается электрическое сопротивление и соответственно падение напряжения, а также снижается эффект экранировки поля свободными носителями. Влияние формы распределения $f(a)$ и зависимости $P(E)$ на распределение напряжённости поля в канале фототранзистора обуславливает нелинейный характер зависимости фототока и пространственного разрешения от различных параметров, характеризующих форму $f(a)$ и зависимости $P(E)$.

На рис. 5, в, г приведены зависимости нормированного фототока от напряжения на затворе V_G при освещении активного слоя излучением с неоднородным распределением интенсивности падающего излучения $I(x)$ по координате x , а именно прямоугольным распределением с центром при $x = 500$ нм и шириной 100 нм и гауссовым распределением также с центром при $x = 500$ нм и шириной на половине высоты 200 нм. Данные распределения показаны на тех же графиках тонкими черными линиями. Кроме того, на данных графиках шкала напряжений V_G преобразована таким образом, что каждому значению V_G на верхней шкале соответствует значение x на нижней шкале в соответствии с зависимостью $x_{max}(V_G)$, показанной на вставке на рис. 1, б. При таком преобразовании шкалы зависимости $J_{ph}/J_{dark}(V_G)$ воспроизводят профили интенсивности падающего излучения $I(x)$, причём наилучшее соответствие получается в случае ступенчатой формы $P(E)$, а также в случае дельта-функции распределения $f(a)$ при которой зависимость $P(E)$ имеет близкую к ступенчатой форму.

Также нужно отметить, что форма функции распределения $f(a)$ и характер зависимости $P(E)$ практически не влияют на зависимости координаты максимума напряжённости электрического поля x_m от V_G . Для того, чтобы это показать, были рассчитаны зависимости $x_m(V_G)$ для различных функций $f(a)$ и $P(E)$. Полученные зависимости $x_m(V_G)$ соотнесены с зависимостью $x_m(V_G)$ при

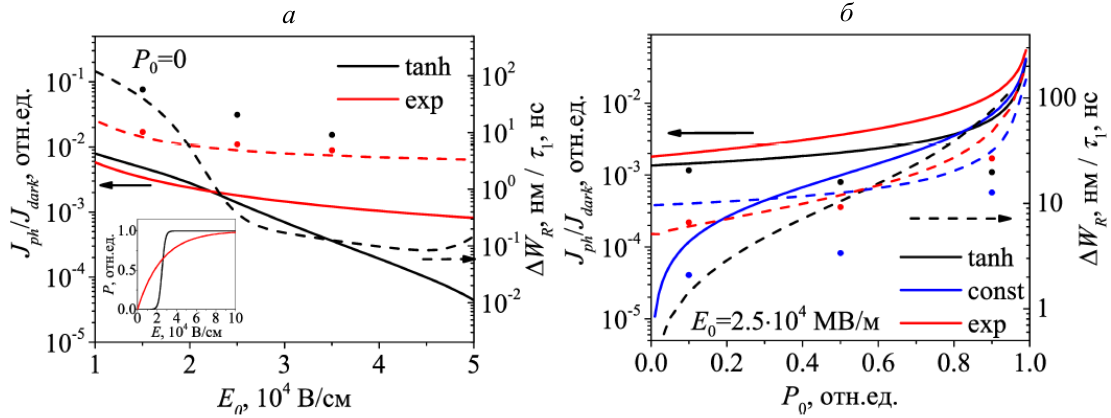


Рис. 4. Зависимости нормированного фототока J_{ph}/J_{dark} (сплошные линии, шкала слева), параметра ΔW_R , характеризующего пространственное разрешение (штриховые линии, шкала справа), и времени отклика на включение падающего излучения τ_1 (точки, шкала справа) от параметра E_0 (а) и от значения P_0 (б) в случае $P(E) = \text{const}$, а также ступенчатой и экспоненциальной формы $P(E)$. Данные зависимости $P(E)$ при $E_0 = 2.5 \times 10^4$ В/см и $P_0 = 0$ приведены на вставке на панели (а)

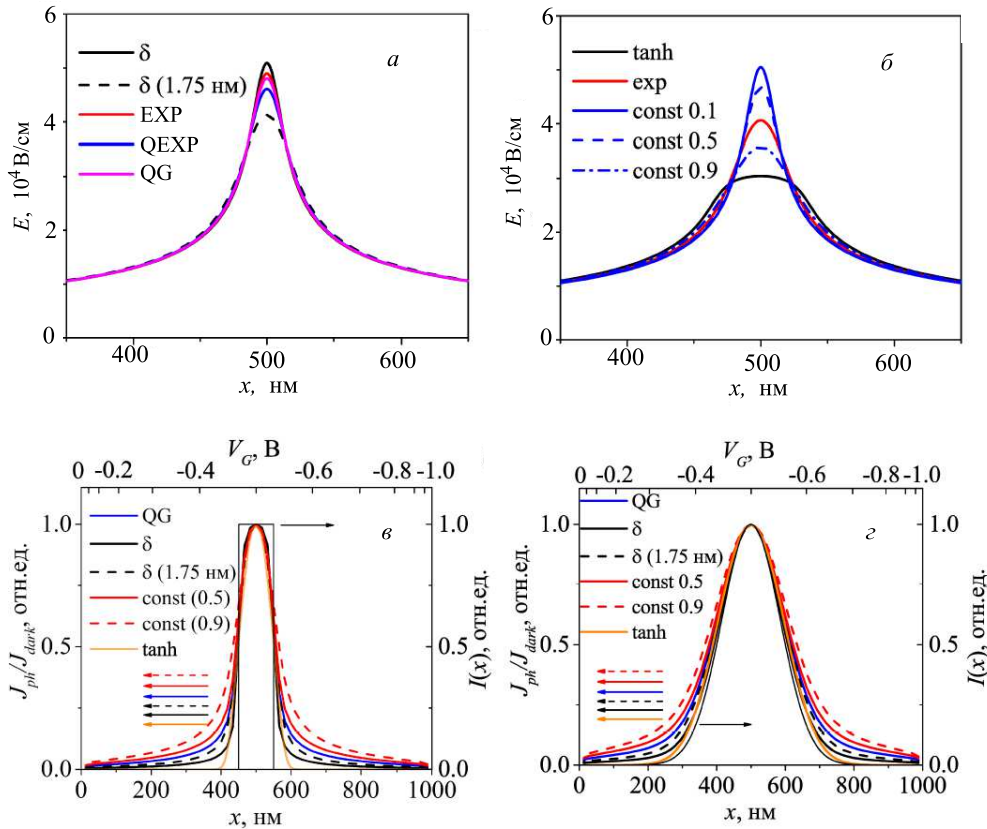


Рис. 5. Распределение напряжённости электрического поля при $V_G = 0.5$ В для различных функций распределения $f(a)$ (а) и различных форм зависимостей $P(E)$ (б). Зависимости нормированного фототока J_{ph}/J_{dark} от напряжения V_G (шкала сверху) при освещении активного слоя электромагнитным излучением с прямоугольным (в) либо гауссовым (г) пространственным распределениями по x для различных функций распределения $f(a)$ и зависимостей $P(E)$

квадратично-гауссовом распределении $f(a)$, которое использовалось в предыдущих работах автора (см. [13] и статью в этом журнале № 4. С. 47 (2020)). Все зависимости имеют монотонный и однозначный характер и почти не отличаются от исходной за-

висимости при квадратично-гауссовом распределении $f(a)$, показанной на вставке на рис. 1, б. Наибольшее отличие составляет всего 11 нм и наблюдается для $P(E)$ ступенчатого вида в форме гиперболического тангенса, также заметные отличия на-

блюдаются для константной вероятности $P = 0.9$, $P(E)$ экспоненциальной формы и дельта-функции $f(a)$ при увеличенном значении $a_0 = 1.75$ нм. Для остальных исследованных форм $P(E)$ и $f(a)$ различия в значениях x_{max} составляют менее 1 нм.

Таким образом, оптимальным для создания фототранзистора с высоким пространственным разрешением будет использование органического полупроводникового материала, в котором полевая зависимость вероятности диссоциации связанных e/h -пар $P(E)$ будет иметь вид, близкий к ступенчатому. Зависимость $P(E)$ для любого органического полупроводникового материала может быть довольно легко определена экспериментальным путём через измерение зависимости фототока от напряжения для тонкого слоя исследуемого материала, расположенного между двумя электродами [19, 20, 24]. Так, для некоторых донорно-акцепторных сопряжённых олигомеров [19] и смесей сопряжённого полимера полифениленвинилена с фуллереновым акцептором [20] в эксперименте наблюдались растущие зависимости фототока от напряжённости электрического поля, при этом значения вероятности диссоциации были далеки от единицы. В недавней работе для смесей перспективного сопряжённого полимера с нефуллереновыми акцепторами наблюдались близкие к ступенчатой зависимости вероятности диссоциации e/h -пар [24], использованные в данной работе материалы перспективны для создания эффективных фототранзисторов с выраженным пространственно-локализованным фотоэффектом. Согласно результатам моделирования в настоящей работе перспективными являются упорядоченные органические материалы, например монокристаллы сопряжённых олигомеров и низкомолекулярных веществ, поскольку в них может иметь место узкое распределение e/h -пар по размерам $f(a)$, которое обеспечит ступенчатый характер зависимости $P(E)$. При этом положение ступени на зависимости $P(E)$ можно варьировать с целью достижения оптимального значения, изменяя вероятность рекомбинации связанных e/h -пар k_f , что в эксперименте, в свою очередь, может быть достигнуто за счёт введения либо удаления примесей или дефектов в органи-

ческом полупроводнике, а также за счёт изменения массового соотношения компонентов в случае донорно-акцепторных смесей.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследовано влияние формы распределения связанных e/h -пар по размеру $f(a)$ и полевой зависимости вероятности диссоциации связанных e/h -пар $P(E)$ на нормированный фототок J_{ph}/J_{dark} , пространственное разрешение и быстродействие амбиполярных органических фототранзисторов. Было рассмотрено 6 различных распределений $f(a)$, для которых были рассчитаны полевые зависимости $P(E)$ в рамках модели Онзагера–Брауна, а также были дополнительно рассмотрены три формы полевой зависимости $P(E)$ вне рамок данной модели: константная, ступенчатая и экспоненциальная. Показано, что для распределения $f(a)$ в форме дельта-функции может быть получено наибольшее значение нормированного фототока при высоком пространственном разрешении без ухудшения быстродействия. Также на примере двух распределений $f(a)$ — гауссова и прямоугольного — показано, что снижение ширины распределения приводит к увеличению пространственного разрешения. Из трёх рассмотренных форм зависимости $P(E)$ ступенчатая форма зависимости оказывается оптимальной для получения высокого пространственного разрешения и нормированного фототока. Экспоненциальная форма полевой зависимости может обеспечить высокие значения фототока при умеренных пространственном разрешении и быстродействии. Константная вероятность P при малых значениях может обеспечить высокое быстродействие, однако при этом фототок и пространственное разрешение будут малы. Полученные в данной работе результаты могут способствовать разработке новых органических полупроводниковых материалов для новых оптоэлектронных устройств.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-79-10122, <https://rscf.ru/project/22-79-10122>.

- [1] Facchetti A. // *Chem. Mater.* **23**, 733. (2011).
- [2] Murphy A.R., Fr chet J.M.J. // *Chem. Rev.* **107**, 1066. (2007).
- [3] Hummelen J.C., Knight B.W., LePeq F. et al. // *J. Org. Chem.* **60**, 532. (1995).
- [4] Bo X.-Z., Lee C.Y., Strano M.S. et al. // *Appl. Phys. Lett.* **86**, 182102. (2005).
- [5] Burroughes J.H., Bradley D.D.C., Brown A.R. et al. // *Nature* **347**, 539. (1990).
- [6] Horowitz G. // *Adv. Mater.* **10**, 365. (1998).
- [7] Yu G., Gao J., Hummelen J.C. et al. // *Science*. **270**, 1789. (1995).
- [8] Mannanov A.L., Balakirev D.O., Papkovskaya E.D. et al. // *Molecules*. **28**, 368. (2023).
- [9] Baeg K.-J., Binda M., Natali D. et al. // *Adv. Mater.* **25**, 4267. (2013).
- [10] Tuktarov A.R., Salikhov R.B., Khuzin A.A. et al. // *RSC Adv.* **9**, 7505. (2019).
- [11] Алёшин А.Н., Щербачков И.П., Федичкин Ф.С. // *ФТТ* **54**, 1586. (2012).
- [12] Nam S., Han H., Seo J. et al. // *Adv. Electron. Mater.* **2**, 1600264. (2016).
- [13] Труханов В.А. // *Письма в ЖЭТФ*. **109**, № 12, 815. (2019). (Trukhanov V.A. // *JETP Letters*. **109**, N 12, 776. (2019)).
- [14] Rand B.P., Xue J., Lange M., Forrest S.R. // *IEEE*

- Photon. Tech. Lett. **15**, N 9. 1279. (2003).
- [15] Kabra D., Singh T.B., Narayan K.S. // *Appl. Phys. Lett.* **85**. 5073. (2004).
- [16] Onsager L. // *Phys. Rev.* **54**. 554. (1938).
- [17] Braun C.L. // *J. Chem. Phys.* **80**. 4157. (1984).
- [18] Koster L.J.A., Smits E.C.P., Mihailetschi V.D., Blom P.W.M. // *Phys. Rev. B.* **72**. 085205. (2005).
- [19] Mannanov A.L., Savchenko P.S., Luponosov Yu.N. et al. // *Org. Electron.* **78**. 105588. (2020).
- [20] Mihailetschi V.D., Koster L.J.A., Hummelen J.C., Blom P.W.M. // *Phys. Rev. Lett.* **93**. 216601. (2004).
- [21] Mozumbder A. // *J. Chem. Phys.* **60**. 4305. (1974).
- [22] Sethi D.S., Choi H.T., Braun C.L. // *Chem. Phys. Lett.* **74**. 223. (1980).
- [23] Goliber T.E., Perlstein J.H. // *J. Chem. Phys.* **80**. 4162. (1984).
- [24] Saladina M., Marquüs P.S, Markina A. et al. // *Adv. Funct. Mater.* **31**. 2007479. (2021).

Influence of the Bound Electron-Hole Pairs Dissociation Probability Field Dependence Form on the Photocurrent and Spatial Resolution of Organic Field Phototransistors

V.A. Trukhanov

*Department of General Physics and Molecular Electronics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University,
Moscow 119991, Russia
E-mail: vtrukhanov@mail.ru*

In this work, numerical simulations are used to study ambipolar organic field-effect phototransistors, in which a spatially localized photoelectric effect can take place. This effect consists in the fact that there is a small spatially localized photosensitive region in the transistor channel, the position of which can be controlled by changing the gate voltage. The purpose of this work is to analyze the relationship between the form of the field dependence of the bound electron-hole pairs (e/h pairs) dissociation probability and characteristics of the studied ambipolar phototransistors such as normalized photocurrent, spatial resolution, and response time. It is shown that the optimal form of the field dependence of e/h pairs dissociation probability is stepwise-like form, which can provide a high spatial resolution at high values of the normalized photocurrent without degrading the response time of the phototransistor. This shape can be achieved when the organic semiconductor has an extremely narrow distribution of e/h pairs by size, described by the delta function. Also, on the example of several distributions of various shapes, it is shown that a decrease in the width of the distribution leads to an increase in the spatial resolution. Approaches to the selection and modification of organic semiconductor materials that would provide the most pronounced spatially localized photoelectric effect in ambipolar field-effect transistors are discussed.

PACS: 42.79.Pw.

Keywords: organic electronics, organic semiconductors, physics of semiconductors, organic field-effect transistor, phototransistor, spatial resolution, response time, ambipolar charge transport.

Received 29 April 2023.

English version: *Moscow University Physics Bulletin.* 2023. **78**, No. 6. Pp. 817–827.

Сведения об авторе

Труханов Василий Андреевич — канд. физ.-мат. наук, науч. сотрудник; тел.: (495) 939-22-28, e-mail: vtrukhanov@mail.ru.