

Моделирование анизотропных пленок органических полупроводников методом
молекулярной динамики

А.А. Петров^{1,2}, А.В. Одинокоев¹

¹Центр фотохимии РАН

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Органические светодиоды, обладающие привлекательными потребительскими качествами, находят широкое применение, основное из которых на данный момент — создание высококачественных дисплеев, а также экономичных и экологически чистых осветительных приборов. В данный момент большое число исследований направлено на достижение высоких показателей электрических и оптических характеристик устройств на основе органических светодиодов [1].

Долгое время предполагалось, что аморфные пленки низкомолекулярных органических полупроводников, полученных методом вакуумного осаждения, имеют случайную ориентацию молекул. Однако, как показали исследования [2], ориентацией молекул в пленке можно управлять, и чаще всего, такие пленки имеют анизотропную структуру: молекулы имеют преимущественно горизонтальную ориентацию, которая, кроме того, достигается на подложке любого вида. Ориентация молекул в пленке существенным образом изменяет её электрические и оптические характеристики. Так, например, методом спектроскопической эллипсометрии переменного угла было экспериментально определено, что подвижность электронов и дырок в пленках с горизонтальной ориентацией молекул выше, а оптическое излучение с поверхности пленки происходит значительно эффективнее в силу того, что оно испускается в направлении перпендикулярном длинной оси органической молекулы.

Для исследования свойств аморфных органических пленок предлагается метод виртуального осаждения из вакуума. Это технология компьютерного моделирования, основанная на методе молекулярной динамики. Основная идея предложенного метода заключается в том, что молекулы добавляются в систему по одной со стороны границы растущего слоя. На нулевой итерации задается модельная подложка, соответствующая твердой поверхности. В каждой последующей итерации в систему добавляется одна молекула, равновесное положение которой затем определяется в результате короткого молекулярно-динамического расчета. После N -итераций получается модель слоя, молекулы которого имеют предпочтительно горизонтальную ориентацию. Такая технология позволяет

моделировать слои толщиной до нескольких десятков нанометров даже на обычном персональном компьютере.

По полученным ансамблям конфигураций можно рассчитывать усредненные характеристики материала. Так, средняя ориентация молекул в пленке оценивалась с помощью параметра порядка по формуле:

$$S = \frac{\langle \cos^2 \theta \rangle - 1}{2}, \quad (1)$$

где θ — угол между длинной осью молекулы и нормалью к поверхности подложки. В случае, когда молекулы расположены в основном горизонтально, параметр порядка принимает значения от -0.5 до 0 . В работе были получены пленки, состоящие из молекул типичных дырочных проводников на основе производных карбазола. Был определен параметр порядка и средняя плотность, а также исследована зависимость полученных результатов от скорости осаждения.

Описанный метод виртуального осаждения из вакуума реализован в виде системы скриптов на языке Python. В качестве вызываемой процедуры для молекулярно-динамических расчетов используется программный пакет GROMACS. Полученные результаты говорят о том, что предложенный метод может стать хорошим инструментом на пути дальнейшего исследования и улучшения характеристик органических функциональных материалов и устройств на их основе.

Литература

1. *Jou J.-H.* [et al.] Approaches for fabricating high efficiency organic light emitting diodes // *Journal of Materials Chemistry C.* — 2015. — V. 3. — N. 13. — P. 2974–3002.
2. *Yokoyama D.* Molecular orientation in small-molecule organic light-emitting diodes // *Journal of Materials Chemistry.* — 2011. — V. 21. — N. 48 — P. 19187–19202.