

TRANSPORT ELEKTRIČNEGA NABOJA V ORGANSKIH POLPREVODNIKIH, SIMULACIJA PO METODI MONTE CARLO

ELECTRIC-CHARGE TRANSPORT IN ORGANIC SEMICONDUCTORS: A MONTE CARLO SIMULATION

Egon Pavlica, Robert Hudej, Guido Bratina

Politehnika Nova Gorica, Vipavska 13 SI-5001 Nova Gorica, Slovenija
egon.pavlica@p-ng.si

Prejem rokopisa – received: 2002-11-13; sprejem za objavo – accepted for publication: 2003-07-01

Transport nosilcev električnega naboja v organskih polprevodnikih se bistveno razlikuje od transporta v urejenih anorganskih kristalih. Razlog za to je lokalizacija energijskih stanj, ki omogočajo prehode nosilcev naboja med molekulami. Posledično je določanje osnovnih parametrov organskih materialov, kot je npr. gibljivost naboja, bistveno težje, tako eksperimentalno kot teoretsko. Analitične metode, ki jih uporabljamo za opis gibljivosti nosilcev naboja v anorganskih materialih so v organskih neustrezne, saj upoštevajo razširjeno elektronsko energijsko strukturo.

V pričujočem prispevku predstavljamo simulacije transporta nosilcev naboja v tankih plasteh organskih polprevodnikov. Simulacija temelji na metodi Monte Carlo in opisuje transport nosilcev naboja v okviru teorije poskakovanja med stanji, katerih energijska porazdelitev je Gaussova z elementi nereda. Stopnjo nereda merimo s širino Gaussove porazdelitve v eV.

Rezultati simulacije transporta v 3,4,9,10-perilendianhidridu tetrakarbonsilne kisline (PTCDA) kažejo na odvisnost oblike toka fotovzbujenih nosilcev naboja od debeline plasti, temperature in velikosti nereda. Simulirani fotovzbujeni tokovi v tanjših plasteh imajo enako amplitudo kot v debelejših, njihova oblika pa je bolj disperzivna¹. Gibljivost nosilcev naboja strmo pada z večanjem stopnje nereda pri dani temperaturi. Simulacija toka fotovzbujenih nosilcev naboja pozitivnega predznaka se ujema s poskusom časa preleta v strukturi steklo/ITO/PTCDA(600 nm)/In pri sobni temperaturi in zunanji napetosti 8 V.

Ključne besede: neurejeni kristali, simulacije Monte Carlo, organski polprevodniki, transport naboja, poskakovanje, PTCDA, tranzientne meritve, čas preleta, gibljivost

The electric-charge transport in organic semiconductors is essentially different to the transport in ordered inorganic crystals. The reason is in the localization of the energy states, which act as charge-carrier transport channels between molecules. Consequently, the determination of the basic transport parameters in organic materials is inherently more involved than in their inorganic counterparts. The analytical methods that are used to describe charge transport in inorganic materials are unsuitable, since they are based on the extended electronic energy structure.

We report here on the simulation of charge transport in organic semiconductor thin films. The simulation is based on the Monte Carlo method and describes the charge-carrier transport within the framework of carrier hopping between the sites. We employed a Gaussian energy distribution of the hopping sites with disorder elements. The degree of disorder is characterized by the width of the Gaussian distribution and is measured in eV units.

The results of the transport simulation in 3,4,9,10-perylene-dianhydride tetracarboxylic acid (PTCDA) show that the photogenerated charge-carrier current depends on the film thickness, temperature and disorder degree. The simulated photocurrents have the same amplitude in thick films as in the thin films, but the overall shape of the $I(t)$ curve is more dispersive in thin films¹. The charge-carrier mobility decreases with the increasing degree of disorder at a given temperature. The simulation of the photogenerated positive charge carriers current matches with the time-of-flight experiment in a glass/ITO/PTCDA(600 nm)/In heterostructure at room temperature and an applied bias voltage of 8 V.

Keywords: disorder materials, Monte Carlo simulations, organic semiconductors, hopping, charge transport, PTCDA, transient measurements, time-of-flight, mobility

1 UVOD

Pri uporabi organskih polprevodnikov v elektronskih elementih je pomemben predvsem transport nosilcev naboja, ki je odvisen od gibljivosti nosilcev naboja in energijskih stanj, po katerih nosilci naboja potujejo. Glede na strukturo energijskih stanj delimo transport nosilcev naboja na transport po razširjenih energijskih stanjih in na transport po lokaliziranih stanjih – poskakovanje. Pogoji za nastanek razširjenih energijskih stanj je urejena struktura kristala in zadostno prekrivanje elektronskih stanj gradnikov. V tankih plasteh organskih materialov omenjena pogoja v večini primerov nista izpolnjena, predvsem zaradi neurejene kristalne strukture

2. Napovedi modelov, ki privzemajo močno lokalizacijo energijskih stanj v organskih tankih plasteh, se bolje ujemajo z eksperimentalnimi meritvami³ kot napovedi modelov z uporabo razširjenih elektronskih stanj.

Navadno se za teoretski opis transporta v molekulskih kristalih uporablja računalniške simulacije, ki temeljijo na metodah Monte Carlo^{4,5}. Na področju organskih polprevodnikov se z uporabo metod Monte Carlo preučuje vbrizgavanje nabojev iz elektrod v organske plasti⁶ in transport naboja v enodimenzionalnih sistemih⁷.

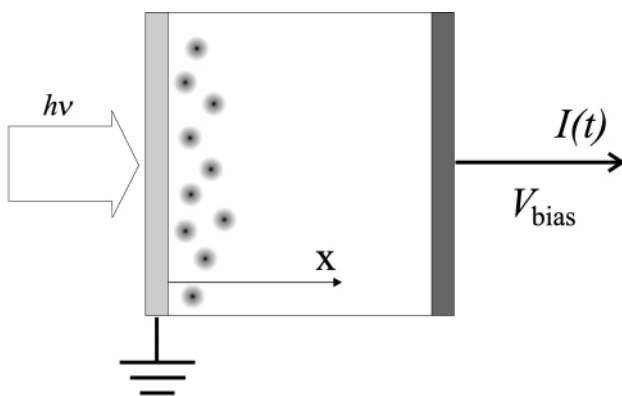
V tem članku predstavljamo simulacijo Monte Carlo, s katero smo opisali transport fotovzbujenih nosilcev naboja v tankoplastnem organskem polprevodniku 3,4,

9,10-perilendianhidrid tetrakarbonsilne kisline (PTCDA). V drugem poglavju je opisan eksperiment časa preleta. V tretjem poglavju je opisan model poskakovanja nosilcev naboja po lokaliziranih stanjih z normalno energijsko porazdelitvijo. V tem poglavju se nahajajo tudi glavni koraki simulacije Monte Carlo. V četrtem poglavju so rezultati simulacij, prilagajanje rezultatov k meritvi in diskusija rezultatov.

2 OPIS EKSPERIMENTA

Eksperimentalno smo transport v organskih molekularnih kristalih opazovali z merjenjem časa preleta nosilcev naboja skozi plast organskega polprevodnika (angl. *time-of-flight experiment*). Shematsko je poskus časa preleta prikazan na **sliki 1**. Vzorce smo naparili v visokovakuumski posodi. 600 nm debele plasti PTCDA smo naparili na steklene podlage, prekrte z vakuumsko naparjeno plastjo ITO. Zbirna kovinska elektroda iz In je bila naparjena takoj po naparevanju organske plasti. Osvetljena ITO-elektroda je bila ozemljena. Nosilce naboja smo vzbudili s kratkim (5 ns) laserskim pulzom valovne dolžine $\lambda = 355$ nm ob prozorni ITO elektrodi. Na zbirno elektrodo smo istočasno priključili zunanjo električno napetost ter izmerili hitre tokovne sunke, ki so se inducirali v elektrodah zaradi transporta vzbujenih nosilcev naboja v organski plasti ⁸.

Na tok, ki ga izmerimo pri taki eksperimentalni postavitvi, močno vpliva urejenost kristalne strukture. V primeru ko se premika paket vzbujenih nosilcev s konstantno hitrostjo, je izmerjeni tok konstanten v času (nedisperzivni transport). Ko nosilci naboja dosežejo nasprotno zbirno elektrodo, tok pade na nič. V anor-



Slika 1: Prikaz poskusa preleta nosilcev naboja. Vzorec je sestavljen iz PTCDA, ki je naparjen med kovinski elektrodi. Prozorna osvetljena elektroda na stekleni podlogi je iz $\text{In}_x\text{SnO}_{1-x}$ in je na potencialu 0V. Z laserskim sunkom vzbudimo nosilce naboja ob osvetljeni elektrodi. Pritisnjena napetost V_{bias} zbere nosilce naboja na zbirni elektrodi. Rezultat merjenja je $I(t)$.

Figure 1: Schematic view of the time-of-flight experiment. The sample has a PTCDA layer between the two metal electrodes. The transparent, illuminated ITO electrode was evaporated on a glass substrate and ground. Charge carriers were generated with the laser pulse near the illuminated electrode. The applied bias V_{bias} collected the charge carriers to the opposite electrode. The result of the experiment is the current $I(t)$.

ganskih prevodnikih je zaradi difuznega razširjanja paketa pojemanje toka zvezno. V neurejenih organskih polprevodnikih se oblika izmerjenega toka bistveno razlikuje od idealnega primera, predvsem v počasnem pojemanju toka (disperzivni transport).

Iz meritev $I(t)$ poiščemo čas preleta nosilcev naboja preko merilne plasti (t_{tr}). V urejenih strukturah ima krivulja izmerjenega toka v odvisnosti od časa obliko stopnice. Tok je v ravnem delu konstanten, nato zvezno pade na nič. t_{tr} določimo kot točko, pri kateri pade tok na polovico vrednosti konstantnega dela. Ta čas označimo z $t_{1/2}$. V neurejenih kristalih določimo $t_{\text{tr}} = t_0$ iz preloma krivulje $I(t)$ v dvojni logaritemski skali ¹. V tem prispevku smo določili čas preleta kot povprečni čas potovanja simuliranih nosilcev preko vzorca. Označili smo ga z $\langle t_{\text{tr}} \rangle$.

3 OPIS MODELA

Gibanje nosilcev naboja v organskih molekularnih kristalih obravnavamo kot stohastično poskakovanje nosilcev iz molekule na molekulo. Energijsko stanje nosilcev je določeno z energijo elektronskega stanja na molekuli, v katerem se nahajajo. Na elektronska stanja pomembno vplivajo kemijske nečistoče in strukturni nered. V uporabljenem modelu ⁵ obravnavamo omenjene vplive kot naključne dejavnike, ki spreminjajo energijo elektronskih stanj. V neurejenih kristalih je število dejavnikov veliko, zato po centralnem limitnem teoremu ⁹ privzamemo, da imajo energije elektronskih stanj normalno porazdelitev. Širina energijske porazdelitve je σ in je merilo stopnje nereda. Verjetnost, da nosilec naboja skoči iz molekule i z energijo ϵ_i na molekulo j z energijo ϵ_j , izračunamo po Miller-Abrahamsovi enačbi ^{10,5,11,12,13}:

$$v_{ij} = v_0 \cdot e^{-2\gamma\Delta R_{ij}} \cdot \begin{cases} e^{-\frac{\epsilon_j - \epsilon_i}{kT}}; & \epsilon_j > \epsilon_i \\ 1; & \epsilon_j < \epsilon_i \end{cases} \quad (1)$$

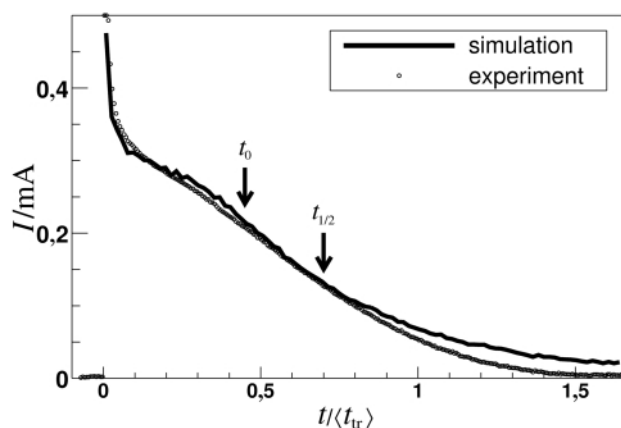
V enačbi 1 je v_0 normalizacijska konstanta, R_{ij} prostorska razdalja med molekulama ter γ parameter prekrivanja elektronskih stanj. Verjetnost skoka iz i -te molekule na j -to molekulo izračunamo po enačbi

$$P_{ij} = \frac{v_{ij}}{\sum_{ij \neq i} v_{ij}} \quad (2)$$

v kateri seštevamo (indeks j) le po molekulah, ki se nahajajo v kocki s stranicami $7 \times 7 \times 7$ stanj okoli molekule i . Nato naključno izberemo molekulo, na katero nosilec naboja skoči. Čas skoka določimo po enačbi:

$$\Delta t = \tau \cdot P_{ij}^{-1} \quad (3)$$

saj poznamo verjetnost, da bo delec skočil iz i -te molekule na j -to molekulo. Pri tem je spremenljivka τ naključno izbrana eksponentno porazdeljena s povprečno vrednostjo 1, tako da je dobljeni čas eksponentno porazdeljena spremenljivka s povprečno vrednostjo



Slika 2: Primerjava med eksperimentalnim in simuliranim tokom fotovzbujenih nosilcev naboja. Organski material je 600 nm debela plast PTCDA, vakuumsko neparjena na stekleni podlogi s 50 nm debelo plastjo $\text{In}_x\text{Sn}_{1-x}\text{O}_2$. Zbirna indijeva elektroda je debela 1 μm . Meritev toka fotovzbujenih nosilcev naboja je bila izvedena v atmosferi pri temperaturi 300 K z zunanjo pritisnjeno napetostjo -8 V na zbirni elektrodi. Izmerjena krivulja (pike) je bolj gladka, kot je simulacija, kajti število nosilcev, ki jih vzbudimo pri eksperimentu, je približno 10^7 , pri simulaciji pa le 10000.

Figure 2: Comparison between the experimental (dots) and the simulated (line) photogenerated current $I(t)$. The PTCDA (600 nm) was evaporated on ITO (50 nm) and glass substrate. The collection In electrode (1 μm) was held at a potential of -8 V. The measurement was conducted in an air atmosphere at 300 K. The experimental curve is smoother than the simulation, because it represents the average of $\approx 10^7$ photogenerated carriers in contrast to 10^4 carriers used in the simulation.

$1/P_{ij}$. Enote časa izberemo tako, da se simulirana krivulja toka (**slika 2**) prilega eksperimentu.

Potovanje simuliranega nosilca naboja spremljamo skozi plast od mesta nastanka do zbirne elektrode. S tem dobimo pozicijo nosilca naboja v odvisnosti od časa. Hitrost nosilcev naboja ocenimo do amplitude natančno s povprečenjem pozicije vseh simuliranih nosilcev naboja. Tok nosilcev naboja $I(t)$ je sorazmeren s hitrostjo nosilcev naboja ⁸.

Za opis PTCDA smo uporabili model lokaliziranih elektronskih stanj ¹⁴. Elektronska stanja smo uredili v tridimenzionalno mrežo, ki je imela v preseku 100×100 lokaliziranih stanj. Z vpeljavo periodičnih robnih pogojev smo simulirali razsežnost tankoplastnih kristalov, ki je v prečnih smereh mnogokrat večja kot v smeri pravokotno na podlago. V smeri pravokotno na podlago je bila velikost mreže končna. Anizotropijo strukture tankoplastnih kristalov PTCDA, ki rastejo v plasteh ¹⁵, smo simulirali z različnimi mrežnimi razdaljami med sosednjimi mesti v različnih smereh. Osnovna celica kristalne strukture je monoklinska z bazo ¹⁵. Plasti so vzporedne z ravnino podlage. Tankoplastni kristali PTCDA so polikristalni ^{16,17}. Domene so poljubno orientirane okoli osi, ki je pravokotna na podlago, zato imajo polikristalne plasti cilindrično simetrijo. V modelu smo za opis kristalne strukture uporabili tetragonalno mrežo. Krajša os je potekala v smeri toka nosilcev naboja, kar je pravokotno na podlago in plasti. Razdaljo med molekulami v smeri krajše osi smo postavili na 0,32

nm, medtem ko smo za razdaljo med molekulami v prečnih smereh uporabili 0,85 nm.

V modelu smo predpostavili, da je koeficient absorpcije laserske svetlobe α konstanten. Jakost svetlobe eksponentno pada z globino v plasti PTCDA. Tako se verjetnost za vzbujanje nosilcev naboja eksponentno manjša z globino. Pri tem smo privzeli, da nastane nosilec naboja pri prehodu vzbujenih molekul v osnovno stanje na istem mestu, kjer se je molekula vzbudila in absorbirala foton. Zanimarili smo transport ekscitonov.

4 REZULTATI IN DISKUSIJA

Rezultati simulacije poskakovanja nosilcev naboja v neurejenih snoveh se kjub svoji enostavnosti ujemajo z izmerjenimi fotovzbujenimi tokovi v tankih plasteh organskega polprevodnika PTCDA. Splošna oblika simuliranih krivulij se ujema z obliko izmerjenih krivulij. Kot primer je na **sliki 2** prikazana primerjava med izmerjenim fotovzbujenim tokom (pike) in računalniško simulacijo pri temperaturi 300 K (črta). Plast PTCDA je bila debela 600 nm. Izmerjena krivulja $I(t)$, skladno s prej objavljenimi rezultati ¹⁸, ustreza zbiranju pozitivnih nosilcev naboja na elektrodi z negativno napetostjo. Pri računanju smo privzeli, da so molekulske plasti med seboj razmaknjene za 0,32 nm ¹⁵.

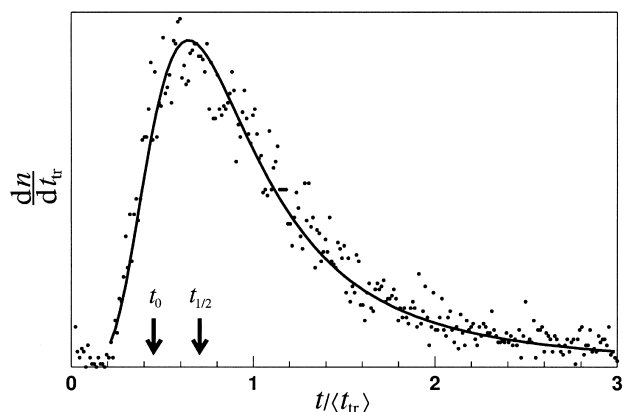
Simulirana oblika toka fotovzbujenih nosilcev naboja upošteva začetno eksponentno porazdelitev fotovzbujenih nosilcev glede na oddaljenost od osvetljene elektrode. Absorpcijski koeficient smo izmerili s spektrofotometrom HP-8453 na podobno pripravljenem vzorcu brez zbiralne elektrode s 150 nm debelo plastjo PTCDA: $\alpha = (28 \pm 5) \cdot 10^6 \text{ m}$ pri $\lambda = 355 \text{ nm}$.

Porazdelitev energijskih stanj, po katerih poteka simuliran transport nosilcev naboja, je normalna s širino $\sigma = (52 \pm 5) \text{ meV}$ pri temperaturi 300 K. To vrednost smo poiskali s prilagajanjem oblike simuliranega toka (črta) k izmerjenemu toku fotovzbujenih nosilcev naboja (pike na sliki). Pri prilagajanju smo spreminjali amplitudo toka, čas prehoda in stopnjo nerada σ .

Pri določevanju časa prehoda nosilcev naboja skozi vzorec (t_{tr}) smo izbrali povprečno vrednost časa prehoda vseh simuliranih nosilcev naboja ($\langle t_{tr} \rangle$). Na **sliki 2** je časovna skala prikazana kot razmerje časa in $\langle t_{tr} \rangle$.

Eksperimentalni čas prehoda fotovzbujenih nosilcev naboja je na **sliki 2** določen iz ujemanja izmerjenega toka in simuliranega toka. Čas prehoda je $(31 \pm 1,5) \mu\text{s}$. Na sliki sta prikazani tudi časa prehoda, ki ju določimo z uporabo eksperimentalnih metod $t_{1/2} = (21,7 \pm 1,3) \mu\text{s}$ in $t_0 = (13,6 \pm 3,2) \mu\text{s}$. Časa prehoda $t_{1/2}$ in t_0 se razlikujeta od povprečnega časa prehoda za več kot 30 %. Porazdelitvena funkcija simuliranih t_{tr} s **sliki 2**, je prikazana na **sliki 3**. Za primerjavo sta prikazani tudi vrednosti $t_{1/2}$ in t_0 . Vrh porazdelitvene funkcije se bolje ujema z vrednostjo $t_{1/2}$ kot z $\langle t_{tr} \rangle$.

Giblјivost nosilcev naboja smo izpeljali iz povprečnega časa prehoda, čeprav je maksimum poraz-



Slika 3: Porazdelitvena funkcija časa prehoda simulacije. Vrednost $\langle t_{tr} \rangle$ je $(31 \pm 1,5)$ μ s. Eksperimentalno določena časa prehoda sta $t_{1/2} = 0,7 \pm 0,04$ in $t_0 = 0,45 \pm 0,1$ v brezdimenzijski skali slike.

Figure 3: Time-of-flight distribution function (simulation). $\langle t_{tr} \rangle = (31 \pm 1.5)$ μ s. The time-of-flight readouts are $t_{1/2} = 0.7 \pm 0.04$ and $t_0 = 0.45 \pm 0.1$ arbitrary units.

delitve na **sliki 3** pri $t_{1/2}$. Kajti za izračun efektivne gibljivosti nosilcev naboja, ki karakterizira lastnosti materiala, potrebujemo povprečni čas vseh nosilcev

naboja ki prispevajo k toku nosilcev naboja. Gibljivost izračunamo po enačbi:

$$\mu = \frac{L^2}{V_{bias} \cdot \langle t_{tr} \rangle} \quad (4)$$

v kateri je L debelina plasti, V_{bias} zbiralna električna napetost in $\langle t_{tr} \rangle$ povprečni čas prehoda nosilcev naboja. Gibljivost nosilcev naboja v izmerjenemu vzorcu (**slika 2**) je $(1,45 \pm 0,07) \cdot 10^{-5}$ cm^2/Vs in se ujema z meritvami gibljivosti nosilcev naboja v močno neurejenih kristalih PTCDA¹⁵. Npr. gibljivost elektronov v kristalu silicija pri temperaturi 300K je $1500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ¹⁹.

S spreminjanjem debeline kristala v simulaciji se spreminja časovna odvisnost toka fotovzbujenih nosilcev naboja. Na **sliki 4** je predstavljen zbir simulacij toka fotovzbujenih nosilcev naboja v neurejenem kristalu s širino energijskih stanj $\sigma = 0,03$ eV pri temperaturi 300 K. Posamezne krivulje ustrezajo simulacijam v plasteh s teoretskimi debelinami od 32 nm (spodnja krivulja) do 1.44 μ m (zgornja krivulja). Razmerje šum/signal se je manjšalo, ko smo večali debelino plasti. Zato smo pri tanjših plasteh povečali število ponovitev. Oblika toka pri tanjših plasteh je očitno disperzivna in ne vsebuje

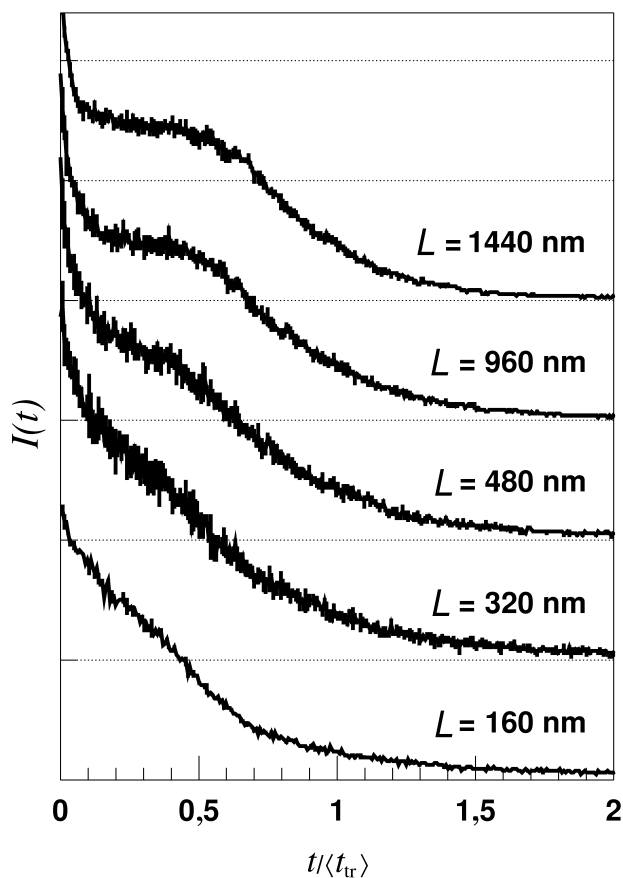


Figure 4: Simulacija poskusa časa preleta nosilcev naboja. Prikazan je tok $I(t)$ pri različnih debelinah plasti organskega polprevodnika

Figure 4: Simulation of photogenerated current $I(t)$ as a function of PTCDA thickness L .

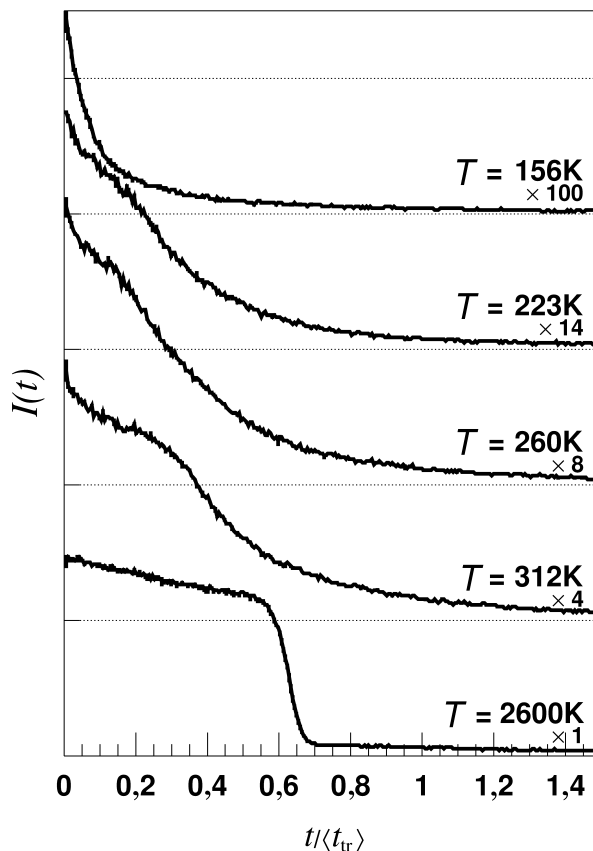


Figure 5: Simulacija poskusa časa preleta nosilcev naboja. Prikazan je tok $I(t)$ pri različnih temperaturah simulacije. Pod oznakami temperature je prikazan faktor povečanja $I(t)$.

Figure 5: Simulation of photogenerated current $I(t)$ as a function of temperature. The scaling factor of the current is shown below the temperature labels.

platoja. Šele pri plasteh nad 320 nm začne transport prehajati v nedisperzivno obliko. Pri debelejših plasteh (npr. 1,44 μm) je plato prisoten. Kljub platoju je oblika toka različna od tiste v urejenih, anorganskih polprevodniških kristalih, v katerih počasi pojemajočega repa ne ugotovimo. Prehajanje iz nedisperzivnega v disperzivni način transporta je posledica spreminjanja debeline kristala. Nosilci naboja začnejo svoje potovanje na stanjih z naključno izbrano energijo. Poskakovanje poteka v smeri nižje energije. Po dovolj dolgem času nosilci naboja dosežejo rob energijske porazdelitve in dosežejo dinamično ravnovesje⁵. Z manjšanjem debeline plasti se krajša čas prehoda nosilcev in nosilci naboja izstopijo iz plasti, preden dosežejo dinamično ravnovesje. Zato ima tok fotovzbujenih nosilcev naboja v tanjših plasteh značilno obliko disperzivnega transporta. Poleg tega izračunana gibljivost velja za nosilce, ki se ne nahajajo v dinamičnem ravnovesju, torej je gibljivost odvisna od debeline vzorca¹. V debelejših plasteh nosilci naboja dosežejo dinamično ravnovesje in je izmerjena gibljivost nosilcev naboja neodvisna od debeline plasti⁵.

Zanimiv je učinek temperature na tok, ki se da tudi eksperimentalno preveriti. Iz enačbe je razvidno, da parameter temperature in stopnja nereda nastopata v razmerju σ/T . Na **sliki 5** so prikazani simulirani tokovi fotovzbujenih nosilcev naboja pri različnih temperaturah. Širino energijskega porazdelitve smo postavili na $\sigma = 52$ meV, skladno z vrednostjo v PTCDA, ki smo jo ocenili iz prejšnjega prilagajanja eksperimentu. Debelina kristala je bila 3000 plasti (960 nm), kajti pri tako debelem vzorcu je transport pri sobni temperaturi že v nedisperzivnem območju, ko nosilci naboja dosežejo dinamično ravnovesje. S slike je razvidno, da prehaja transport z nižanjem temperature v disperzivno obliko. Kot primer nedisperzivnega transporta je prikazana simulacija pri temperaturi 2600 K (spodnja krivulja), ki pri PTCDA ni izvedljiva zaradi termične razgradnje organskih molekul pri tako visoki temperaturi. Razlago za vpliv temperature na obliko toka fotovzbujenih nosilcev naboja najdemo v modelu samem. Energijo, ki jo potrebujejo nosilci, da skočijo iz molekule na molekulo, črpajo iz toplotnega rezervoarja. Višja kot je temperatura, večja je toplotna energija nosilcev. S tem je poskakovanje nosilcev naboja hitrejše in tako nosilci hitreje dosežejo dinamično ravnovesje. Če imajo nosilci naboja na zalogi premalo energije, je postopek relaksacije daljši od časa prehoda skozi kristal, kar privede do nedisperzivne oblike toka.

Opozarjamo, da pričujoča simulacija ne upošteva procesov, do katerih pride pri interakciji foton-molekula in pri relaksaciji vzbujenih molekulskih stanj. Podrob-

nejša obravnava tovrstne problematike je opisana npr. v viru²⁰.

5 SKLEP

V tem delu smo prikazali ujemanje splošne oblike eksperimentalnih in simuliranih krivulj toka fotovzbujenih nosilcev naboja v organskih molekulskih polprevodniških tankoplastnih kristalih PTCDA. Torej so metode Monte Carlo uporabne pri modeliranju transporta nosilcev naboja v PTCDA. Nizka gibljivost, ki jo določimo iz meritev s simulacijami in je značilna za neurejene sisteme, upravičuje uporabo modela lokaliziranih elektronskih stanj. Simulacije Monte Carlo so ustrezno orodje tako za napoved kot tudi za analizo rezultatov poskusa časa preleta. S simulacijami hkrati razberemo gibljivost nosilcev naboja ter razširjenost energijskih stanj, po katerih poteka transport nosilcev naboja.

6 LITERATURA

- ¹ G. Pfister in H. Scher. *Adv.Phys.* 27 (1978), 747
- ² N. F. Mott in E. A. Davis. *Electronic processes in non-crystalline materials*, 2. izd. Clarendon Press, Oxford, 1979
- ³ E. A. Silinsh. *Organic Molecular Crystals, Their Electronic States*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1980
- ⁴ E. A. Silinsh in V. Čápek. *Organic Molecular Crystals, Interaction, Localization and Transport Phenomena*. AIP Press, New York, 1994
- ⁵ H. Bässler. *Phys.Stat.Sol.B* 175 (1993), 15
- ⁶ S. Barth, P. Muller, H. Riel, P. F. Seidler, W. Riess, H. Vestweber, U. Wolf, in H. Bassler. *Synthetic Metals* 111-112 (2000), 327
- ⁷ I. P. Zvyagin, S. D. Baranovskii, K. Kohary, H. Cordes, in P. Thomas. *Phys.Stat.Sol.B* 230 (2002), 227
- ⁸ S. Ramo. *Proceedings of the I.R.E.* 27 (1939), 584
- ⁹ D. C. Montgomery in G. C. Runger. *Applied statistics and probability for engineers*, 2. izd. John Wiley and Sons, New York, 1999
- ¹⁰ A. Miller in E. Abrahams. *Phys.Rev.* 120 (1960), 745
- ¹¹ S. Hammes-Schiffer in J. C. Tully. *J.Chem.Phys.* 101 (1994), 4657
- ¹² H. J. C. Berendsen in J. Mavri. *J.Phys.Chem.* 97 (1993), 13464
- ¹³ M. A. Lill in V. Helms. *J.Chem.Phys.* 114 (2001), 1125
- ¹⁴ M. Grünewald, B. Pohlmann, B. Movaghar, in D. Würtz. *Philos. Mag.B* 49 (1984), 341
- ¹⁵ S. R. Forrest. *Chem.Rev.* 97 (1997), 1793
- ¹⁶ S. R. Forrest in Y. Zhang. *Phys.Rev.B* 49 (1994), 11297
- ¹⁷ S. R. Forrest, P. E. Burrows, E. I. Haskal, in F. F. So. *Phys.Rev.B* 49 (1994), 11309
- ¹⁸ J. R. Ostrick, A. Dodabalapur, L. Torsi, A. J. Lovinger, E. W. Kwock, T. M. Miller, M. Galvin, M. Berggren, in H. E. Katz. *J.Appl.Phys.* 81 (1997), 6804
- ¹⁹ S. M. Sze. *Physics of semiconductor devices*, 2. izd. John Wiley and Sons, 1981
- ²⁰ N. Došlić, J. Stare, in J. Mavri. *Chem.Phys.* 269 (2001), 59