07

# Аналитическая модель дрейфа и диффузии носителей заряда в органических светодиодах при наличии объемного заряда

#### © В.Р. Никитенко, Н.А. Санникова, М.Н. Стриханов

Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", 115409 Москва, Россия e-mail: natsan@inbox.ru

#### (Поступило в Редакцию 19 июля 2013 г.)

Предложена сравнительно простая аналитическая модель для расчета вольт-амперных характеристик для монополярного режима транспорта заряда в тонких слоях неупорядоченных органических материалов, которая учитывает энергетический беспорядок и эффекты объемного заряда. Определена зависимость минимальной высоты энергетического барьера для инжекции, при которой можно пренебречь эффектами объемного заряда, в зависимости от толщины слоя и ширины гауссова энергетического распределения.

## Введение

В настоящее время элементы органической электроники быстро развиваются и совершенствуются. Это в полной мере относится и к органическим светодиодам (ОСИД). Целью экспериментальных и теоретических исследований, проводимых в настоящее время, является оптимизация эффективности и долговечности ОСИД при достаточно высоком уровне светимости. Элементная база ОСИД, т.е. органические полупроводники и диэлектрики, исключительно разнообразны по своим физико-химическим характеристикам, что дает широкие возможности для оптимизации.

Физические основы работы ОСИД в целом известны. В частности, были разработаны теоретические модели, описывающие прыжковый транспорт носителей заряда (электронов и дырок) и их рекомбинацию [1-3]. Инжекция носителей заряда также является одним из базовых физических процессов, определяющих функционирование ОСИД, поскольку концентрация собственных носителей обычно пренебрежимо мала [1,4,5]. Принципиальное значение для всех этих процессов играет энергетический беспорядок, функция распределения состояний по энергии обычно считается гауссовой функцией [6]. Одним из распространенных подходов к теоретическому исследованию процессов, упомянутых выше, является метод Монте-Карло [7]. Однако данный подход предъявляет высокие требования к вычислительным ресурсам, поскольку задача включает много параметров. Поэтому широко применяются численные решения системы дифференциальных уравнений, включающих уравнения непрерывности для электронов и дырок, а также уравнение Пуассона [8]. Один из способов тестирования подобных решений — сравнение с результатами простой аналитической модели. За последние несколько лет было предложено несколько таких моделей, в которых сделаны попытки самосогласованного описания инжекции и транспорта с учетом объемного заряда носителей: 1) модель Архипова и др. [5]. Данная модель не учитывает диффузию при вычислении тока, поэтому справедлива лишь при достаточно высоких напряжениях:  $V \gg kT/e$ ,

где k — постоянная Больцмана, T — температура, e — элементарный заряд; 2) модель Гененко и др. [9]. Модель учитывает диффузию, но не влияние энергетического беспорядка на инжекцию носителей; 3) модель Malliaras G.G. и Scott J.C. [1] также не учитывает энергетический беспорядок.

Надо заметить, что граничное значение высоты барьера для инжекции носителей, выше которого можно пренебречь эффектами объемного заряда, определялось в различных работах [1,5,9], но исследование зависимости этой величины от толщины слоя и параметра беспорядка рассматриваемого материала  $\sigma/kT$ , где  $\sigma$  — характерная ширина (среднеквадратичная вариация) гауссова распределения, не проводилось.

Целью настоящей работы является применение аналитической модели, которая при определенных условиях самосогласованно учитывает диффузию, объемный заряд и энергетический беспорядок, для расчета вольтамперных характеристик (ВАХ) ОСИД с монополярной инжекцией носителей заряда, а также изучение вопроса о влиянии эффекта объемного заряда на ВАХ в зависимости от приложенного напряжения, высоты барьера для инжекции, толщины слоя и параметра беспорядка. Для этого была использована модель плотности тока прыжковой инжекции [10,11], которая учитывает энергетический беспорядок.

#### Теоретическая модель

При построении ВАХ рассматривался однослойный (с электронной проводимостью для определенности) ОСИД в одномерном случае. За основу взяты уравнение Пуассона и уравнение непрерывности, поскольку было показано, что диффузионно-дрейфовое приближение дает хорошее согласие с результатами как монтекарловского моделирования [7], так и с численным решением уравнения баланса [8,12].

Электрическое поле в органических полупроводниках в одномерном случае описывается следующей системой



**Рис. 1.** Схема, на которой показаны:  $x_m$  — расстояние от электрода (катода) до вершины потенциального барьера,  $\Delta$  — высота барьера,  $\Delta H$  — энергия, на которую понижается высота барьера,  $E_F$  — квазиуровень Ферми, К — катод, А — анод.

уравнений (для электронов):

$$F'_x(x) = -\frac{en(x)}{\varepsilon\varepsilon_0},\tag{1}$$

$$-e\mu F_x(x)n(x) + eDn'(x) = J, \qquad (2)$$

где n(x) — плотность носителей (электронов),  $F_x(x)$  — проекция напряженности электрического поля на ось X (рис. 1), e — элементарный заряд,  $\varepsilon$  — относительная диэлектрическая проницаемость,  $\mu$  — подвижность, D — коэффициент диффузии электронов, J — плотность тока.

Для вычисления тока применяется выражение для инжекционного тока (3), полученное в работах [10]:

$$J = \text{const} = J_{ini},\tag{3}$$

где  $J_{inj}$  определяется уравнением (П2) в Приложении. Смысл данного выражения в том, что инжекционный ток определяется скоростью первых прыжков носителей, умноженной на вероятность того, что носитель избежит поверхностной рекомбинации. Носитель совершает диффузионно-дрейфовое движение посредством прыжков между локализованными состояниями (рис. 1), распределенными по энергии, согласно гауссову закону, преодолевая энергетический барьер  $\Delta$ , который понижен (в среднем) на величину  $\Delta H = \sqrt{e^3 F_0 / 4\pi\varepsilon\varepsilon_0}$  (см. Приложение). Для вычисления тока инжекции применялось два подхода: 1) в первом не учитывалась конечность толщины органического слоя, 2) во втором случае конечность учитывалась.

В качестве первого граничного условия используется следующее выражение:

$$F_x(0) = -F_0,$$
 (4)

где *F*<sub>0</sub> — модуль напряженности электрического поля на электроде.

В качестве второго граничного условия применяется следующее выражение:

$$n(0) = -\frac{\varepsilon\varepsilon_0}{e} F'_x(0) = n_0, \qquad (5)$$

где  $n_0$  — плотность частиц (электронов), которая предполагает квазиравновесную заселенность локализованных состояний [5,7]:

$$n_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dEg(E) \left[ 1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) \right]^{-1}, \qquad (6)$$

где T — температура, k — постоянная Больцмана,  $F_x(0)$  — проекция напряженности поля на ось X (см. уравнения (7а) или (8)), g(E) — энергетическая плотность локализованных состояний, которая задана гауссовской функцией (ПЗ), квазиуровень Ферми  $E_F$ , который равен уровню Ферми инжектирующего электрода, определяется из уравнения (П4).

Существует проблема: как совместить описание инжекции с помощью локального (микроскопического) потенциала (П1), включающего кулоновское взаимодействие отдельного электрона со своим зеркальным зарядом, и описание переноса заряда в объеме слоя с использованием усредненного поля, которое определяется уравнением Пуассона (1). В настоящей работе принято, что характерный масштаб  $x_m = \sqrt{e/16\pi\varepsilon\varepsilon_0F_0}$  (расстояние до точки, в которой локальное поле обращается в нуль) мал в сравнении с толщиной слоя  $L, x_m \ll L$ . В первом приближении можно считать, что носитель, достигший координаты x<sub>m</sub>, уже инжектирован. Поэтому граничное условие (6) в действительности ставится в точке  $x_m \rightarrow 0$ , которая принята за начало отсчета координаты в уравнениях (1)-(9). Кроме того, применимость уравнений (3), (П2) требует, чтобы энергетический барьер  $\Delta$  был достаточно высок для того, чтобы выполнялось условие  $x_m \ll n_0^{-1/3}$ , тогда взаимодействие с другими инжектированными зарядами пренебрежимо мало относительно взаимодействия с зеркальным зарядом. В работе [9] установлен критерий  $x_m < 0.2n_0^$ что для комнатной температуры и рассматриваемых напряжений требует  $\Delta > 0.3$  eV.

Аналитическое решение системы (1), (2) выглядит следующим образом [9,13]:

$$F_x(x) = -\frac{2j}{m} \frac{C_2 A i'(C_1 + jx) + B i'(C_1 + jx)}{C_2 A i(C_1 + jx) + B i(C_1 + jx)}, \quad (7a)$$

$$j = L \left(\frac{J\mu}{2\varepsilon\varepsilon_0 D^2}\right)^{1/3}, \quad m = \frac{\mu F_0 L}{D}, \quad x = \frac{X}{L}, \tag{76}$$

где Ai, Bi — функции Эйри, L — толщина транспортного слоя, X — размерная координата,  $F_0$  — напряженность поля на контакте (по модулю),  $C_1, C_2$  — константы, j, m, x — безразмерные величины.

Расчеты проводились для двух случаев: I — для конечной среды, при этом надо найти обе константы  $C_1$  и  $C_2$ ; II — для полубесконечной среды, при

этом константа  $C_2$  была выбрана равной нулю, так как плотность носителей зарядов асимптотически стремится к нулю [13]. В случае II решение уравнений (1), (2) упрощается следующим образом:

$$F_x(x) = -\frac{2j}{m} \frac{Ai'(C_1 + jx)}{Ai(C_1 + jx)}.$$
 (8)

В подходе I вначале численно решается система из двух уравнений (4), (5) с участием уравнения (7а), в результате чего находятся константы  $C_1$  и  $C_2$ . В подходе II из уравнений (4) и (8) при x = 0 следует уравнение для константы  $C_1$ , которое решается также численно. Далее находится напряжение путем интегрирования поля  $F_x(x)$ , приведенного в уравнении (7а) или (8) в случае подходов I или II соответственно по толщине транспортного слоя L:

$$V = \int_{0}^{L} F_x(x) dx.$$
(9)

В отличие от работ [10,17], где предполагался низкий уровень инжекции, электрическое поле неоднородно, поэтому в уравнении (П2) под  $F_0$  необходимо понимать напряженность поля вблизи инжектирующего электрода. По заданному значению  $F_0$ , согласно уравнениям (3) и (П2), вычисляется ток J, и далее из уравнений (7а) или (8) вычисляем поле  $F_x(x)$  и из уравнения (9) — напряжение.

Также необходимо определить  $F_m$  — минимальное поле, при котором выполняется условие  $x_m \ll L$ . Для определенности требуем  $x_m < 0.1L$ . Для толщины L = 100 nm получено  $F_m \ge 10^6$  V/m, для L = 300 nm —  $F_m \ge 10^4$  V/m, для L = 1000 nm —  $F_m \ge 300$  V/m.

# Результаты вычислений и их обсуждение

В ходе расчетов ВАХ рассматривалось 4 подхода, чтобы определить условия, при которых конечность толщины слоя не влияет на результаты: І.1 — при расчете тока инжекции слой считается полубесконечным, а решение системы уравнений непрерывности и Пуассона производится для слоя конечной толщины L (7a); II. 1 — при расчете тока инжекции слой также считается полубесконечным, и решение системы уравнений непрерывности и Пуассона проводится для полубесконечной среды (8); I.2 — при расчете тока инжекции используется подход с учетом конечной толщины, система уравнений непрерывности и Пуассона решается для конечной среды (7а); II. 2 — в токе инжекции используется подход с учетом конечной толщины, система уравнений решается для полубесконечной среды (8). Ширина гауссова распределения  $\sigma$  была выбрана равной 0.075 eV. Расчеты проводились для температуры T = 300 К.

На рис. 2 приведены ВАХ для четырех подходов для  $\Delta = 0.5$  eV. Для толстого образца L = 1000 nm данные



**Рис. 2.** ВАХ при  $\Delta = 0.5$  eV. Полностью закрашенные символы соответствуют подходу I.1, сплошные линии соответствуют подходу I.2. Незакрашенные символы соответствуют подходу II.1; штрих-пунктирные линии соответствуют подходу II.2. Квадраты соответствуют толщине L = 100 nm, круги — L = 300 nm, треугольники — L = 1000 nm.

одинаковы для всех подходов. В случае более тонких слоев (100 и 300 nm) при слабых напряженностях электрического поля в подходе, соответствующему полубесконечному слою в токе инжекции для конечной среды, наблюдаются отклонения. Однако в случае расхождений нарушаются условия применимости ( $x_m \ll L$ ), поэтому на последующих рисунках результаты расчета, согласно подходам І.1 и І.2 (где решение системы уравнений непрерывности и Пуассона производится для конечной среды), не нанесены.

На рис. 3 и 4 представлены данные для барьеров  $\Delta = 0.4$  и 0.6 eV соответственно. Для сравнения ВАХ также нанесены ВАХ для случая тока, ограниченного барьером (ТОБ) (поле однородно и равно  $F_0$ , напряжение при этом равно  $V = F_0L$ ), а также ВАХ, рассчитанные по формуле Мотта–Герни [14] для случая тока, ограниченного объемным зарядом (ТООЗ):

$$J_{MG} = \frac{9}{8} \varepsilon \varepsilon_0 \mu \, \frac{(V - V_{bi})^2}{L^3},\tag{10}$$

где  $\varepsilon$  — относительная диэлектрическая проницаемость,  $\mu$  — подвижность, V — напряжение,  $V_{bi}$  — встроенное напряжение,  $V > V_{bi}$ . Для L = 1000 nm BAX при отсутствии объемного заряда не нанесена, чтобы не загромождать рисунок.

При достаточно низких значениях барьера ( $\Delta = 0.4-0.5 \, eV$ ) наблюдается отклонение BAX от кривых, не учитывающих влияние объемного заряда. Можно сделать вывод, что происходит увеличение влияния объемного заряда с толщиной слоя. Для высоты барьера  $\Delta = 0.6 \, eV$  в обоих подходах при разных толщинах графики практически полностью совпадают с BAX, не учитывающими объемный заряд, исключая область высоких напряжений, где ток ограничен объемным зарядом.

 $10^{8}$ 

 $10^{7}$ 

 $10^{6}$ 

 $10^{5}$ 

 $10^{4}$ 

 $10^{3}$ 

 $10^{2}$ 

 $10^{1}$ 

 $10^{0}$ 

 $10^{-1}$ 

 $10^{-2}$ 

 $10^{-2}$ 

 $J_{inj}, \mathrm{A/m^2}$ 

**Рис. 3.** ВАХ при  $\Delta = 0.5$  eV. Закрашенные и незакрашенные символы соответствуют подходам с полубесконечным слоем и с учетом и без учета конечной толщины в токе инжекции соответственно. Квадраты, круги и треугольники показывают случаи толщин, соответствующие толщинам L = 100, 300 и 1000 nm соответственно. Кривые линии без символов отвечают напряжению  $V = F_0 L$ , прямые линии отвечают случаю ТООЗ, см. (10), непрерывные линии соответствуют толщине L = 100 nm, штриховые — L = 300 nm и штрихпунктирные — L = 1000 nm.

 $10^{0}$ 

 $V - V_{hi}$ , V

-1

 $10^{-1}$ 

L = 100 nm

 $10^{1}$ 

 $10^{2}$ 

 $\dot{L} = 300 \text{ nm}$ 

1000 nm

 $10^{3}$ 



Рис. 4. ВАХ при  $\Delta = 0.6$  eV. Обозначения те же, что и на рис. 3.

Надо заметить, что ограничение объемным зарядом существенно и при малых напряжениях, где закон Мотта-Герни также дает меньшие значения тока в сравнении с выражением (П2) для тока, ограниченного барьером. Действительно, расчетные значения тока лежат между результатами (10) и (П2). Отклонение от закона (10), по-видимому, связано с тем обстоятельством, что уравнение (10) не учитывает диффузию, которая существенна при низких напряжениях. Из рис. 3,4 можно заключить, что наименьшая высота барьера, при которой эффектами объемного заряда можно пренебречь, растет при увеличении толщины слоя.

Как видно из рис. 3, 4, ВАХ для случаев ТООЗ и ТОБ пересекаются в двух местах, так что на различных интервалах изменения напряжения ток контролируется или барьером, или объемным зарядом. При увеличении толщины слоя ВАХ для случая тока, ограниченного объемным зарядом, становится ниже по отношению к ВАХ для случая ТОБ, поэтому можно найти значения толщины для данной высоты барьера, при которых будет только одно пересечение ВАХ. Это граничное (максимальное) значение барьера при данной толщине слоя (и подвижности электронов), при котором ток контролируется объемным зарядом для всех напряжений. Ниже представлен график (рис. 5), на котором нанесены зависимости граничной высоты барьера от толщины для трех значений ширины распределения  $\sigma = 0.05, 0.075, 0.1 \, {\rm eV}$ (величина  $\sigma$  определяет ток инжекции через барьер, согласно (П2), и значения подвижности (которая входит в уравнение (10)), см. ниже уравнение (11) при температуре T = 300 К. На вставке в качестве примера представлены ВАХ для случаев ТООЗ и ТОБ при граничном значении барьера  $\Delta = 0.4\,\mathrm{eV}$  и  $\sigma = 0.075\,\mathrm{eV}$ . Как видно из рисунка, граничное значение высоты барьера возрастает с ростом толщины слоя приблизительно по логарифмическому закону в согласии с результатом работы [13], полученному в предельном случае  $\sigma \rightarrow 0$ . При слабом беспорядке ( $\sigma = 2kT$ ) при  $L = 100 \, {\rm nm}$  получено значение граничной высоты 0.33 eV, что согласуется с ранее полученными результатами 0.25 [13] и 0.35 eV [1]. Однако граничная высота барьера при данной толщине существенно растет с ростом беспорядка, хотя характер зависимости существенно не изменяется.



**Рис. 5.** Зависимость высоты барьера  $\Delta$  от толщины слоя *L* для  $\sigma = 0.05, 0.075, 0.1$  eV. На вставке: ВАХ для случаев ТООЗ и ТОБ при  $\Delta = 0.4$  eV и  $\sigma = 0.075$  eV.

Журнал технической физики, 2014, том 84, вып. 9



**Рис. 6.** Сравнение ВАХ, полученных из экспериментальных данных (символы) [14], с расчетными (кривые) для толщины L = 100 nm и  $\Delta = 0.4$  eV при температурах: T = 295, 272, 255, 233, 215 K.

Результаты вычислений сравнивались с экспериментальными данными [15] для нескольких температур при толщине образца L = 100 nm (рис. 6) и высоте барьера  $\Delta = 0.4$  eV. Для расчета подвижности использовалась формула модели гауссова беспорядка [6], при этом в аргумент экспоненты добавлено слагаемое, линейное по параметру беспорядка  $\sigma/kT$ , чтобы учесть эффекты заполнения глубоких состояний, которые существенны при значительной плотности инжектированных носителей [16]:

$$\mu(T, F_0) = \mu_0 \exp\left[-(4/9)\left(\frac{\sigma}{kT}\right)^2 + C\left(\frac{\sigma}{kT}\right) + D\left(\left(\frac{\sigma}{kT}\right)^2 - B^2\right)\sqrt{F_0}\right], \quad (11)$$

где  $\mu_0$  — предельное значение подвижности при высоких температурах и слабых полях,  $\mu_0 = 10^{-6} \, \text{m}^2 / (\text{V} \cdot \text{s});$ В, С и D — константы, определяемые путем подгонки к экспериментальным данным. Константы B = 1.5и  $D = 2.9 \cdot 10^6 \, (\text{m/V})^{1/2}$  такие же, как в работе [6]. Подгонка под экспериментальные данные дала значение C = 0.8, которое близко к значению 0.56, полученному в работе [16] (см. табл. 2 в этой работе), исходя из численного решения уравнения баланса. В отличие от [15] ширина распределения была найдена равной  $\sigma = 0.075 \,\text{eV}$  (вместо 0.14 и 0.1 eV, полученных в указанной работе с применением расширенных моделей коррелированного и некоррелированного беспорядков соответственно), общая плотность локализованных состояний была выбрана такой же, как и в [15] (для модели некоррелированного гауссова беспорядка):  $N_t = 0.2 \cdot 10^{27} \,\mathrm{m}^{-3}$ . Из рисунка видно, что при высоких температурах наблюдается хорошее согласие модели с экспериментом (T = 295, 272, 255 K). При низких температурах ( $T = 233, 215 \, \text{K}$ ) расчетные данные были

получены ниже экспериментальных. Совпадение с экспериментальными данными неплохое, если учесть, что зависимость подвижности от координаты, которая возникает, согласно уравнению (11), не учитывается данной моделью. Результаты сравнения еще раз показывают, в какой степени от заданной полевой и температурной зависимостей подвижности зависят остальные параметры материала, определенные из моделирования ВАХ.

#### Заключение

Для расчета ВАХ разработана аналитическая модель, основанная на системе уравнений непрерывности и Пуассона, которая учитывает диффузию, объемный заряд и энергетический беспорядок. В данном подходе была использована модель плотности тока прыжковой инжекции [11]. Данная модель не содержит предположения о квазиравновесном значении плотности носителей на противоположном электроде, которое легко может нарушаться в органических материалах [9], так как большинство носителей заряда инжектированы и приходят с другого электрода.

Показано, что минимальная высота барьера, при которой эффектами объемного заряда можно пренебречь, зависит от толщины слоя и значительно растет при ее увеличении приблизительно по логарифмическому закону, при этом значительно возрастая с ростом энергетического беспорядка.

В результате сравнения экспериментальных и расчетных данных было получено хорошее согласие с экспериментом при высоких температурах. Модель можно использовать для тестирования более сложных численных моделей.

Работа ΦЦП выполнена при поддержке "Исследования разработки по приоритетным И направлениям развития научно-технологической политики России 2007-2013 гг.", госконтракты № 16.523.11.3004, № 14.513.11.0091.

### Приложение

Прыжковая модель [10,11,17] рассматривает зарядовую инжекцию через границу металл/полимер как процесс из двух шагов. Во-первых, носители прыгают с квазиуровня Ферми металлического контакта на локализованные состояния, которые находятся достаточно близко к границе. Каждый инжектированный носитель создает зеркальный заряд противоположного знака на контакте. Для носителя заряда, локализованного близко к границе, потенциальная энергия U(x) является суперпозицией энергии, создаваемой внешним полем на контакте,  $F_0 = F(0)$  (это поле приближенно считается однородным), и кулоновской энергии зеркального заряда

$$U(x) = \Delta - \frac{e^2}{16\pi\varepsilon\varepsilon_0 x} - eF_0 x, \qquad (\Pi 1)$$

где  $\Delta$  — высота барьера в нулевом поле. При наличии внешнего поля и взаимодействия с зеркальным зарядом, этот барьер понижен на величину  $\Delta H = \Delta - U(x_m)$ (рис. 1). Вследствие прыжковой диффузии и дрейфа носителей происходит или их нейтрализация на контакте, или преодоление потенциального барьера U(x)и проникновение вглубь слоя. Вероятность последнего события можно описать одномерной версией теории Онзагера [18]. Частота прыжков с уровня Ферми инжектирующего электрода, который принят за начало отсчета энергии, на состояние с энергией Е, находящееся на расстоянии x<sub>0</sub> от электрода, вычисляется согласно модели Миллера–Абрахамса,  $\nu = \nu_0 \exp(-2\gamma x_0) Bol(E)$ , где  $Bol(E) = \exp[-(E + |E|)/2kT], \nu_0$  — частота попыток прыжка, у — обратный радиус локализации. Усреднение частоты первых прыжков, умноженной на вероятность проникнуть вглубь слоя, по значениям длины начального прыжка x<sub>0</sub> и энергии состояния, занятого носителем после первого прыжка Е, приводит к выражению (П2) для плотности тока прыжковой инжекции:

$$J_{inj} = ev_0 \frac{\int\limits_{a}^{+\infty} dx_0 \exp(-2\gamma x_0) \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dEBol(E)g[E-U(x_0)] \times \\ \times \int\limits_{a}^{x_0} dx \exp\left[-\frac{e}{kT} \left(F_0 x + \frac{e}{16\pi\epsilon\epsilon_0 x}\right)\right] \\ \int\limits_{a}^{+\infty} dx \exp\left[-\frac{e}{kT} \left(F_0 x + \frac{e}{16\pi\epsilon\epsilon_0 x}\right)\right]$$
(II2)

где a — расстояние от электрода до ближайшего прыжкового состояния, энергетическая плотность состояний g(E) считается гауссовской функцией,

$$g(E) = \frac{N_t}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{E^2}{2\sigma^2}\right),\tag{II3}$$

где  $\sigma$  — среднеквадратичная вариация,  $N_t$  — пространственная плотность локализованных состояний. Уравнение (П2) отвечает подходу 1 (бесконечная среда). В случае подхода 2 бесконечность в верхних пределах интеграла в знаменателе и интеграла по  $x_0$  в числителе заменяется на *L*. Поскольку квазиуровень Ферми  $E_F$  в уравнении (6) равен уровню Ферми инжектирующего электрода, и максимум гауссовской функции (П3) принят за начало отсчета энергии в интеграле (6),  $E_F$  в точке  $x_m$  определяется следующим образом:

$$E_F = \Delta H - \Delta = -U(x_m) = \sqrt{\frac{e^3 F_0}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0}} - \Delta, \qquad (\Pi 4)$$

(рис. 1).

### Список литературы

- Scott J.C., Malliaras G.G. // Chem. Phys. Lett. 1999. Vol. 299. P. 115–119.
- [2] Crone B.K., Davids P.S., Campbell I.H., Smith D.L. // J. Appl. Phys. 2000. Vol. 87. P. 1974–1982.

- [3] Blom P.W.M., Jong M.J.M., Vleggaar J.J.M. // Appl. Phys. Lett. 1996. Vol. 68. P. 3308–3310.
- Burin A.L., Ratner M.A. // J. Chem. Phys. 2000. Vol. 113.
   P. 3941–3944.
- [5] Arkhipov V.I., von Seggern H., Emelianova E.V. // Appl. Phys. Lett. 2003. Vol. 83, P. 5074–5076.
- [6] Bässler H. // Phys. Stat. Sol. B. 1993. Vol. 175. P. 15-56.
- [7] Van der Holst J.J.M., van Oost F.W.A., Caehoorn R., Bobbert P.A. // Phys. Rev. B. 2011. Vol. 83. P. 085 206– 085 206-13.
- [8] Knapp E., Häusermann R., Schwarzenbach H.U., Ruhstaller B. // J. Appl. Phys. 2010. Vol. 108. P. 054 504–054 504-8.
- [9] Genenko Yu.A., Yampolskii S.V., Melzer C., Stegmaier K., von Seggern H. // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 81. P. 125 310– 125 310-15.
- [10] Arkhipov V.I., Wolf U., Bassler H. // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 59. P. 7514–7520.
- [11] Arkhipov V.I., Emelianova E.V., Tak Y.-H., Bassler H. // J. Appl. Phys. 1998. Vol. 84. P. 848–856.
- [12] Ruhstaller B, Knapp E., Perucco B., Reinke N., Rezzonico D., Müller F. Advanced Numerical Simulation of Organic Light-emitting Devices, Optoelectronic Devices and Properties / Ed. by O. Sergiyenko. InTech, 2011. 660 p.
- [13] Neumann F., Genenko Y.A., Melzer C., Yampolskii S.V., Seggern H. // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 75. P. 205 322–205 322– 10.
- [14] Lampert M.A., Mark P. Current Injection in Solids. NY: Academic, 1970.
- [15] Mensfoort S.L.M., Shabro V., Vries R.J., Janssen R.A.J., Coehoorn R. // J. Appl. Phys. 2010, Vol. 107. P. 113710– 113710-8.
- [16] Coehoorn R., Pasveer W.F., Bobbert P.A., Michels M.A.J. // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 72. P. 155 206–155 206-20.
- [17] Wolf U, Arkhipov V.I., Bässler H. // Phys. Rev. B. 1999.
   Vol. 59. P. 7507–7513.
- [18] Lochner K., Reimer B., Bassler H. // Phys. Stat. Sol. B. 1976. Vol. 76. N 2, P. 533–540.