

Численное моделирование тока поляризации геминальных пар в неупорядоченных полимерах с ловушками

© Н.А. Королёв, В.Р. Никитенко[†], А.П. Тютнев*

Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“,
115409 Москва, Россия

* Московский государственный институт электроники и математики

Национального исследовательского университета „Высшая школа экономики“,
109028 Москва, Россия

(Получена 18 февраля 2013 г. Принята к печати 21 февраля 2013 г.)

Численным моделированием Монте-Карло получены зависимости тока поляризации геминальных пар от времени в неупорядоченных средах. Рассмотрена модель прыжкового транспорта с экспоненциальным распределением прыжковых центров по энергии. Исследована зависимость кинетики тока поляризации от начального разделения пары, относительной концентрации ловушек, температуры и напряженности приложенного электрического поля. Обсуждаются пределы применимости аналитической теории, основанной на диффузионно-дрейфовом описании движения электрона и дырки геминальной пары в режиме дисперсионного транспорта. Определена область параметров, в которой возможно существование отрицательного тока.

1. Введение

Область применения органических полупроводников и диэлектриков постоянно расширяется — это устройства хранения данных, светодиоды, солнечные элементы, тонкопленочные полевые транзисторы и т.д. Органическим материалам, в частности полимерам, присуще слабое межмолекулярное взаимодействие, вследствие чего происходит локализация носителей заряда на отдельных молекулах. Переходы между локализованными состояниями осуществляются путем туннельных прыжков с участием фононов (прыжковый транспорт) [1]. Носители заряда в таких материалах получают в результате инжекции с электродов, фото- или радиационной генерации. Генерация зарядов проходит через стадию образования пар разноименных зарядов, разделенных расстоянием r_0 (начальное разделение пары), которое может значительно превышать межмолекулярное расстояние. Далее возможны два варианта: электрон встречается с дыркой и пара рекомбинирует (геминальная рекомбинация), или носители разойдутся на расстояние, существенно превышающее радиус Онзагера, $r_c = e^2/4\pi\epsilon\epsilon_0 kT$, где e — заряд электрона, ϵ — диэлектрическая проницаемость, ϵ_0 — электрическая постоянная, k — постоянная Больцмана, T — температура. Поскольку подвижности обычно резко отличаются, один из носителей можно считать неподвижным.

Модель гауссова беспорядка [2] широко применяется для анализа прыжкового транспорта в органических материалах. Вместе с тем нестационарная радиационная электропроводность во многих полимерах успешно описывается моделью Роуза–Фаулера–Вайсберга (РФВ) [3], согласно которой прыжковый перенос происходит по решетке моноэнергетических состояний. Беспорядок проявляется в том, что часть узлов решетки являются ловушками, которые распределены по энергии согласно экспоненциальному закону. Надо заметить, что и в

случае применения модели гауссова беспорядка также часто учитываются ловушки, экспоненциально распределенные по энергии (при этом „транспортные“ состояния распределены по гауссовому закону) [4]. Хотя типичный масштаб энергетического гауссова беспорядка 0.1 эВ [2], материалы со слабым беспорядком описываются гауссовым распределением со среднеквадратичной вариацией 0.05 эВ [5] и даже менее [6]. В случае слабого гауссова беспорядка модели, описанные выше, практически эквивалентны. Считается, что геминальная рекомбинация (ГР) протекает по ланжевеноскому механизму, так что применима модель Онзагера [7].

В случае высокой энергии генерирующего излучения начальное энергетическое распределение носителей заряда далеко от равновесного. Поэтому транспорт большинства носителей до их рекомбинации происходит в сильно неравновесном (дисперсионном) режиме [3,8]. В работах [9–11] кинетика ГР исследовалась на основе решения уравнения Смолуховского (в режиме дисперсионного транспорта) для усредненного пространственно-временного распределения более подвижного „близнеца“. Оно представляет собой диффузионно-дрейфовое уравнение в режиме дисперсионного транспорта в присутствии как внешнего однородного электрического поля, так и кулоновского поля неподвижного „близнеца“. Это так называемое диффузионно-дрейфовое приближение, которое применимо, поскольку перепад электростатической энергии на длине прыжка мал в сравнении с тепловой энергией kT [12]. Однако это условие легко нарушается, если начальное разделение сравнимо с длиной прыжка. Именно этот случай наиболее интересен при анализе разделения пар в органической фотовольтаике [13]. В недавней работе [14] выполнено моделирование вероятности выживания пар и темпа их рекомбинации методом Монте-Карло (МК) и показано, что дискретность среды приводит к значительным отклонениям от результатов диффузионно-дрейфового приближения. Однако не был проведен анализ переходных токов, создаваемых поляризацией близнецовых пар

[†] E-mail: vladronik@yandex.ru

во внешнем поле. Между тем результаты, полученные в диффузионно-дрейфовом приближении как аналитическими методами [9–11,15], так и численным решением уравнения Смолуховского [16,17], показывают, что при определенных условиях кинетика близнецовой (геминальной) электропроводности нетривиальна: на некотором временном интервале ток может быть отрицательным, т. е. направленным против внешнего поля.

В данной работе численным моделированием МК, следуя [14], исследованы зависимости тока поляризации геминальных пар от времени. Модель РФВ используется в данной работе, как и в предшествующей [14], чтобы можно было провести сравнение с результатами дрейфово-диффузионного приближения [9–11]. В отличие от приближенного аналитического подхода данные результаты не ограничены областью слабых полей [9,11] или низких температур [10]. Показано, что появление отрицательных токов возможно и при нарушении диффузионно-дрейфового приближения, и уточнена область параметров, где существует данный эффект.

2. Метод вычислений

В начальный момент времени на расстоянии r_0 от неподвижной дырки в результате фото- либо радиационной генерации появляется электрон. Его начальное положение задается случайным образом, обеспечивая однородное угловое распределение на сфере радиуса r_0 (учитывая дискретность решетки). Дальнейшее движение электрона — это прыжки по узлам кубической решетки. Часть узлов являются ловушками, энергия которых E распределена согласно экспоненциальному закону: $g(E) = (N_t/E_0) \exp(-E/E_0)$, где N_t — плотность ловушек, E_0 — глубина распределения. Остальные узлы („проводящие состояния“) имеют одинаковую энергию (нулевую, без учета электростатической энергии). Расчеты прекращаются после того, как носители или рекомбинируют, или расходятся на расстояние более $3-4r_c$, когда вероятность геминальной рекомбинации пренебрежимо мала [14]. Алгоритм моделирования методом Монте-Карло транспорта носителей подробно описан в статьях [12,14]. В каждом испытании заново генерируются случайные энергии ловушек, согласно экспоненциальному распределению.

Для расчета тока поляризации во внешнем электрическом поле, приложенном вдоль оси x , вначале вычисляется проекция дипольного момента геминальной пары (ГП) на эту ось, усредненная по всем испытаниям. В каждый малый промежуток времени она определяется путем перемножения числа электронов, имеющих (в разных испытаниях) определенную координату x_i на x_i , и суммирования по всем номерам i . Координата x отсчитывается от „близнеца“. Прыжки электрона в плоскости x_i вклада в изменение дипольного момента не дают. Ток поляризации определяется численным дифференцированием (как отношение изменения дипольного момента за малый промежуток времени к величине этого промежутка).

Испытания повторяются от $5 \cdot 10^4$ до $2 \cdot 10^5$ раз в зависимости от параметров. Это количество достаточно для того, чтобы добиться приемлемого уровня флуктуаций тока после численного дифференцирования. Из-за флуктуаций кривые тока не получаются гладкими, что требует дальнейшего сглаживания, которое выполнено средствами графопостроительной программы „Origin“.

3. Результаты вычислений

Вычисления проведены для следующих значений параметров модельного полимера: $\epsilon = 2.0$ — диэлектрическая проницаемость; $\nu_0 = 10^{13} \text{ c}^{-1}$ — частотный множитель; $a_0 = 0.6 \text{ нм}$ — постоянная решетки; $r_0 = 3.13 \text{ нм}$ — начальное разделение близнецовой пары; $c = 0.01, 0.09$ — относительные концентрации ловушек; $E_0 = 0.07 \text{ эВ}$.

Расчеты тока поляризации проводились для различных значений внешнего поля F и температуры T , от которой зависят величина радиуса Онзагера r_c и значение дисперсионного параметра (параметра беспорядка) $\alpha = kT/E_0$. На графиках приведены значения плотности тока в предположении, что генерируется 1 пара на м^3 . Время нормировано на величину характерного времени прыжка, $t_r = \nu_0^{-1} \exp(2\gamma a_0)$, где $\gamma = 5/a_0$ — обратный радиус локализации волновой функции электрона.

На рис. 1 показана зависимость тока поляризации от времени для различных значений r_0/r_c (изменяется от температуры). При этом напряженность внешнего поля

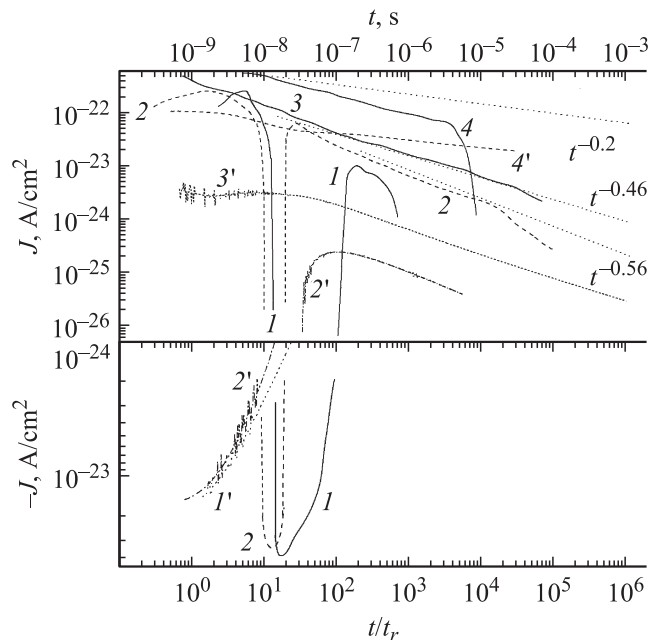


Рис. 1. Зависимости тока поляризации от времени для различных значений r_0/r_c : 0.08 (1, 1'), 0.14 (2, 2'), 0.17 (3), 0.25 (4). 1', 2' — аналитические кривые. Значение относительной концентрации ловушек, $c = 0.09$. Отношение напряженности приложенного однородного поля к кулоновскому полю на расстоянии r_0 , $F/F_0 = 0.01$.

достаточно мала, $eFr_c/kT \ll 1$, как предполагалось и в работах [9,11]. В качественном согласии с результатами диффузионно-дрейфового приближения кинетика тока оказывается знакопеременной при достаточно низких температурах (кривые 1,2). С увеличением температуры уменьшаются диапазон времени отрицательного тока и (в меньшей степени) его абсолютная величина. При больших временах ток снова становится положительным, убывая по степенному закону $t^{\alpha-1}$ (см. штрихпунктирные прямые). При высоких температурах (кривые 3 и 4) ток всегда положителен, а его величина растет с повышением температуры.

На рис. 2 приведены графики поляризационного тока для двух значений относительной концентрации ловушек 0.01 и 0.09. На кривых 1 и 2 есть участки отрицательного тока, которые с увеличением концентрации ловушек смещаются вправо и становятся шире по шкале времени. Абсолютные значения тока слабо зависят от концентрации, убывая с ростом концентрации, что обусловлено захватом носителей на ловушки. Данные результаты можно сравнить с аналитическими кривыми 1' и 2', вычисленными согласно методу работы [11], поскольку выполняется условие слабого поля. Значения тока, полученные методом МК, на несколько порядков превышают аналитические результаты, при этом различие возрастает с уменьшением концентрации ловушек. Однако можно сказать о хорошем совпадении времен окончания отрицательного тока (см. также кривые 1 и 2 на рис. 1). Для кривых 3 и 4 условие слабого поля, $eFr_c/kT \ll 1$, не выполняется и отрицательного тока уже нет.

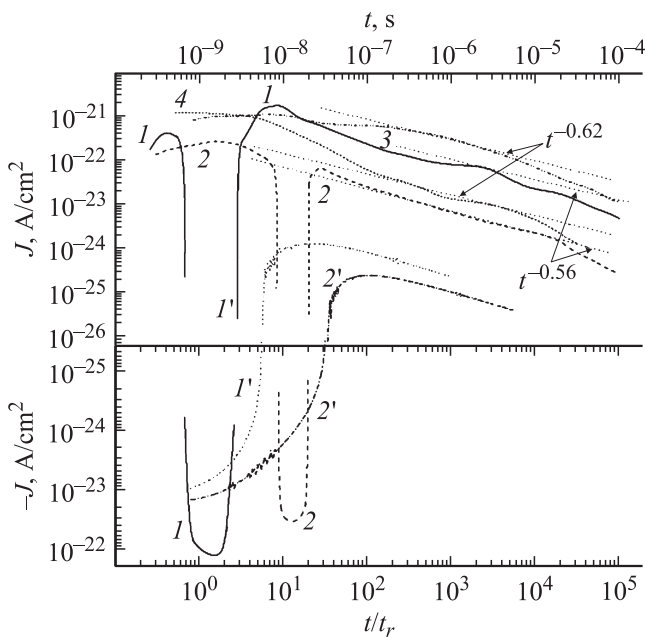


Рис. 2. Зависимости тока поляризации для двух значений c : 0.01 и 0.09. (1, 1') — $c = 0.01$, $F/F_0 = 0.01$, $r_0/r_c = 0.14$; (2, 2') — $c = 0.09$, $F/F_0 = 0.01$, $r_0/r_c = 0.14$; (3) — $c = 0.01$, $F/F_0 = 0.04$, $r_0/r_c = 0.12$; (4) — $c = 0.09$, $F/F_0 = 0.04$, $r_0/r_c = 0.12$; (1', 2') — аналитические кривые.

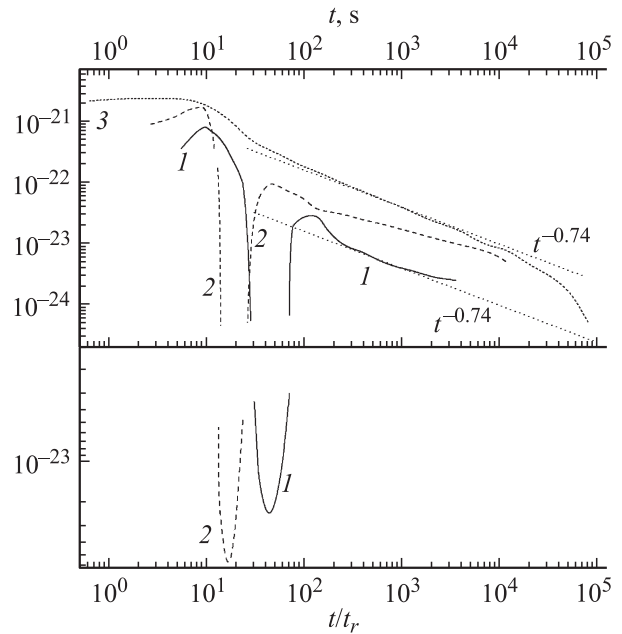


Рис. 3. Зависимости тока поляризации для $c = 0.01$, $\alpha = 0.256$ ($r_0/r_c = 0.08$) и для различных значений напряженности внешнего однородного поля. 1 — $F/F_0 = 0.01$, 2 — $F/F_0 = 0.05$, 3 — $F/F_0 = 0.09$.

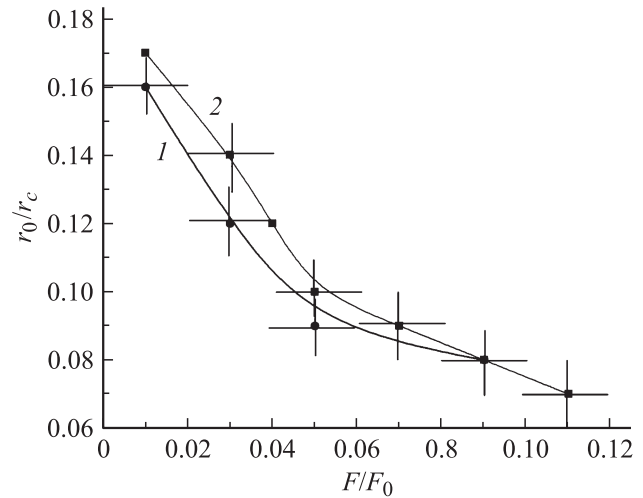


Рис. 4. Области отрицательного тока для $c = 0.01$ и 0.09. 1 — $c = 0.01$; 2 — $c = 0.09$.

Зависимость тока поляризации для $c = 0.01$ и 0.09 для нескольких значений внешнего поля показана на рис. 3. С ростом поля отрицательный ток начинается раньше и имеет более короткий временной промежуток, при этом абсолютное значение отрицательного тока растет, пока поле не станет настолько сильным, чтобы исключить этот ток (кривая 3).

Наличие временного участка отрицательного тока и его исчезновение при повышении температуры и (или) усилении внешнего поля объяснялось качественно в предшествующих работах [9–11,15]. Область параметров

Квантовый выход носителей при различном начальном разделении r_0

$a_0, \text{нм}$	$r_0, \text{нм}$	r_0/r_c	$T, \text{К}$	α	β	β_1	$\Omega_\infty,$ модель Онзагера	$\Omega_\infty,$ метод МК
0.6	3	0.14	373	0.448	1.43	1.33	$7.93 \cdot 10^{-4}$	$7.95 \cdot 10^{-4}$
0.6	3	0.17	453	0.544	1.18	1.27	$2.79 \cdot 10^{-3}$	$2.79 \cdot 10^{-3}$
0.6	3	0.25	666	0.8	0.80	0.90	0.01830	0.01354
1	6.25	0.25	333	0.4	0.32	1.70	0.018	0.028
0.4	12.5	0.5	333	0.4	0.13	8.48	0.13	0.17

(температуры и напряженности поля), при которой существует отрицательный ток, ограничена достаточно низкими значениями данных параметров (а также начального разделения пары). Параметрическую область наличия отрицательного тока для $c = 0.01$ и 0.09 отображают графики на рис. 4. Кривые построены посредством усреднения результатов, полученных в разных сериях испытаний. Горизонтальными и вертикальными чертами отмечены погрешности. Можно отметить слабую зависимость от концентрации ловушек. В работе [9] показано, что отрицательный ток существует в предельном случае слабого внешнего поля при $r_0/r_c < 0.16$, что и подтвердило численное моделирование. Вероятно, что с увеличением внешнего поля и уменьшением температуры область отрицательного тока исчезнет полностью, как предсказывают результаты аналитической модели.

4. Обсуждение результатов

Кривые 1'–4' на рис. 1 основаны на аналитическом решении уравнения Смолуховского [11] в дисперсионном режиме переноса при слабом однородном поле ($eFr_c/kT \ll 1$). Чтобы сравнить эти решения с результатами МК-моделирования, необходимо обеспечить соответствие параметра в модели МЗ — $\mu_0\tau_0$, где μ_0 и τ_0 — соответственно подвижность и время жизни носителя в проводящем состоянии, и длины прыжка a_0 в МК-модели: $\mu_0\tau_0 = (e/kT)a_0^2\langle n \rangle$, где $\langle n \rangle$ — среднее число прыжков до захвата носителя на ловушку. Число $\langle n \rangle$ определяется МК-моделированием [14]. При наличии отрицательного тока его максимальные отрицательные величины, определенные аналитически и методом МК-моделирования, оказываются одного порядка величины. Времена окончания участка отрицательного тока также близки. В остальном данные МК-моделирования значительно расходятся с аналитическими результатами. Так, максимальный отрицательный ток достигается позже приблизительно на 2 порядка (кривые 1 и 1', 2 и 2', см. также рис. 2), в согласии с данными работы [14] о том, что аналитическая модель занижает время начала ГР.

Временной интервал отрицательного тока, таким образом, оказывается много меньше, чем предсказывает аналитическая модель. Этот временной интервал отвечает времени наиболее интенсивной ГР. При высоких

температурах интенсивная ГР, согласно аналитической модели [9], дает быстрый спад положительного тока между двумя асимптотическими законами $t^{\alpha-1}$, которые отвечают движению зарядов до рекомбинации и после разделения пар в дисперсионном режиме. Поскольку с ростом температуры характерные времена ГР резко уменьшаются, на рис. 1 наблюдается, по-видимому, только конечный асимптотический режим (кривые 3 и 4). В случае кривой 3 этот режим действительно хорошо описывается зависимостью $t^{\alpha-1}$ при $\alpha = 0.54$, что отвечает $r_0/r_c = 0.17$. Для кривой 4 $\alpha = 0.8$, при этом транспорт плохо описывается приближением сильноравновесного транспорта [18,19]. Более точное описание дает несколько более быстрый закон убывания, в согласии с рис. 1 [18]. Резкое убывание тока при больших временах связано с выходом основной массы носителей за пределы сферы моделирования (радиусом $4r_c$).

Для тех же параметров построены графики вероятности выживания носителей от времени (рис. 5), на которых видно, что вероятность выживания приближается к предельному значению (вероятность разделения, или квантовый выход) на много порядков по времени

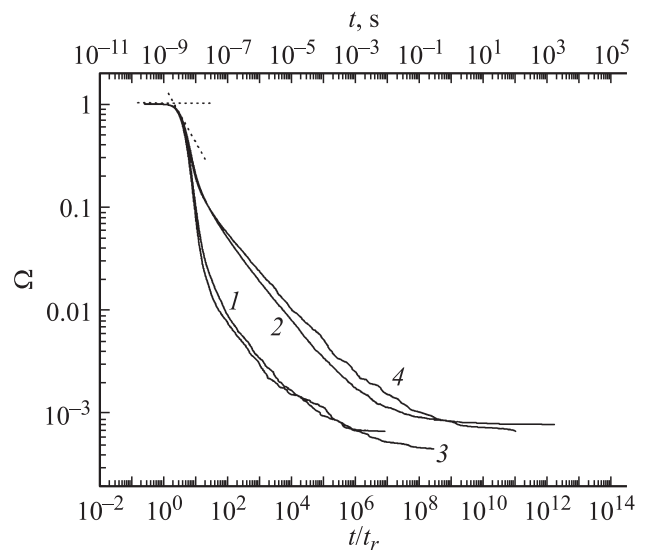


Рис. 5. Зависимости вероятности выживания от времени. 1 — $c = 0.01$, $F/F_0 = 0.01$, $r_0/r_c = 0.14$; 2 — $c = 0.09$, $F/F_0 = 0.01$, $r_0/r_c = 0.14$; 3 — $c = 0.01$, $F/F_0 = 0.04$, $r_0/r_c = 0.12$; 4 — $c = 0.09$, $F/F_0 = 0.04$, $r_0/r_c = 0.12$.

позже, чем заканчивается время отрицательного тока. С другой стороны, МК-вычисления данной работы в предельном случае слабого поля показали удивительно хорошее совпадение квантового выхода с результатом модели Онзагера [6–8], $\Omega_\infty = \Omega_{ons} = \exp(-r_c/r_0)$. В работе [9] было показано, что аналитические результаты по вероятности выживания $\Omega(t)$ можно применять при $\beta < \beta_1$:

$$\beta_1 = \frac{1}{3} \frac{r_0}{a_0} (4\pi\xi c)^{\frac{1}{1-a}}, \quad \xi \approx 1.$$

Здесь параметр $\beta = [U(r_0) - U(r_0 - a_0)]/kT \approx r_c a_0 / r_0^2$ — это изменение кулоновской энергии взаимодействия „близнецов“ в единицах тепловой энергии kT . Данные таблицы показывают удивительно хорошее согласие с теорией Онзагера при малом значении начального разделения, хотя условие $\beta < \beta_1$ почти нарушено. По-видимому, причина в том, что рост вероятности разделения вследствие повышенной роли диффузии в дискретной среде компенсируется при малой длине начального разделения $r_0 = 3$ нм тем обстоятельством, что носители быстро рекомбинируют и не попадают на глубокие ловушки, понижая вероятность разделения в данный момент. Поэтому вероятно допустить, что в области больших времен аналитические и МК-кривые тока на рис. 2 совпадут, хотя различие между кривыми 1 и 1', 2 и 2' убывает медленно.

Увеличение продолжительности отрицательного тока, а также смещение начала отрицательного тока в сторону больших времен с увеличением относительной концентрации ловушек (рис. 2, кривые 1, 2) связано с захватом носителей на ловушки, в том числе глубокие, которых становится больше, что приводит к большим временам освобождения и замедляет процесс рекомбинации. С увеличением внешнего поля (кривые 3, 4) уменьшается время дрейфового сближения носителей, что ускоряет их рекомбинацию и приводит к росту положительного тока в сравнении с кривыми 1 и 2. Увеличение концентрации ловушек уменьшает ток на всем рассмотренном промежутке времени (кривые 4 и 3).

5. Заключение

Моделирование методом Монте-Карло подтвердило возможность существования отрицательного тока, связанного с нестационарной поляризацией близнецовых пар. МК-моделирование показало, что время начала интенсивной ГР увеличивается на несколько порядков в сравнении с результатами аналитической модели, основанной на диффузионно-дрейфовом приближении. Это приводит к более позднему достижению максимального отрицательного тока и меньшей длительности его существования по сравнению с аналитическим результатом (рис. 1, 2). Это обстоятельство, связанное с дискретностью среды, проявляется также в кинетике убывания вероятности выживания и темпа рекомбинации [14]. Подтвержден результат аналитической мо-

дели, согласно которому в предельном случае слабого внешнего поля отрицательный ток существует при значениях $r_0/r_c < 0.16$. МК-моделирование позволило установить границы области существования отрицательного тока в случае, если внешнее поле нельзя считать слабым (рис. 4). Надо заметить, что вполне вероятный разброс величин начального разделения пары r_0 приводит к „замазыванию“ отрицательной проводимости [20]. Однако и в этом случае кинетика ГР существенно влияет на фотопроводимость, поскольку ток можно представить качественно как произведение тока свободных носителей и вероятности выживания, которая уменьшается в широких пределах от 1 до $\Omega_\infty \ll 1$.

Исследование механизма потерь носителей заряда, в частности соотношения потерь на геминальную и негеминальную рекомбинацию, необходимо для повышения эффективности фотовольтаических элементов на основе органических материалов [21]. Для различных материалов и донорно-акцепторных систем делаются выводы о преобладании как геминального, так и негеминального механизма, при этом широко используются нестационарные методы измерений, например нестационарная электропроводность [22,23], электронный парамагнитный резонанс [24], нестационарное фотоиндуцированное поглощение [25]. В последней работе характерные времена ГР при комнатной температуре определены в диапазоне 20–100 наносекунд. Этот масштаб времен вполне допускает измерения нестационарной электропроводности [22] и соответствует временам наиболее интенсивной рекомбинации для параметров, использованных в данной работе (см. рис. 1–3). Вместе с тем сравнение данных рис. 1 и 5 показывает, что и при много больших временах при наличии ловушек процесс ГР еще далеко не завершен и, соответственно, кинетика ГР еще влияет на фотопроводимость. Недостаточно обоснованное предположение о том, что током поляризации геминальных пар можно пренебречь, привело авторов работы [22] к заключению, что геминальный механизм не вносит существенного вклада в потери носителей заряда. Между тем экспериментальные данные этой работы вполне согласуются с противоположным утверждением, если считать, что в момент времени, который принят за начальный, интенсивная ГР только начинается, и ток поляризации пар вносит основной вклад в фотопроводимость. Этот пример показывает значимость анализа тока поляризации геминальных пар. Авторы надеются, что данная работа стимулирует интерес исследователей к данной проблеме и будет полезна при анализе экспериментальных результатов.

Работа выполнена при поддержке ФЦП „Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологической политики России на 2007-2013 гг.“ (госконтракт 16.523.11.3004).

Список литературы

- [1] M. Pope, H.E. Swenberg. *Electronic processes in organic crystals and polymers* (Oxford Univ. Press, Oxford, 1999).
- [2] H. Bassler. *Phys. Status Solidi B*, **107**, 9 (1981).
- [3] А.П. Тютнев, В.С. Саенко, Е.Д. Пожидаев, Н.С. Костиков. *Диэлектрические свойства полимеров в полях ионизирующих излучений* (М., Наука, 2005).
- [4] E. Knapp, R. Häusermann, H.U. Schwarzenbach, B. Ruhstaller. *J. Appl. Phys.*, **108**, 054 504 (2010).
- [5] D. Hertel, H. Bässler, U. Scherf, H.-H. Hörhold. *J. Chem. Phys.*, **110**, 9214 (1999).
- [6] I.I. Fishchuk, D. Hertel, H. Bässler, A.K. Kadashchuk. *Phys. Rev. B*, **65**, 125 201 (2002).
- [7] L. Onsager. *Phys. Rev.*, **54**, 554 (1938).
- [8] В.И. Архипов, А.И. Руденко, А.М. Андриеш, М.С. Иову, С.Д. Шутов. *Нестационарные инжекционные токи в неупорядоченных твердых телах* (Кишинев, Штиинца, 1983).
- [9] В.И. Архипов, В.Р. Никитенко, А.И. Руденко. *ФТП*, **21** (6), 1125 (1987).
- [10] В.И. Архипов, В.Р. Никитенко, А.И. Руденко. *ФТП*, **21** (9), 1625 (1987).
- [11] В.Р. Никитенко, А.П. Тютнев, В.С. Саенко, Е.Д. Пожидаев. *Хим. физика*, **20**, 98 (2001).
- [12] V. Ries, G. Schönherr, H. Bässler. *Phil. Mag. B*, **48**, 87 (1983).
- [13] C. Deibel, T. Ströbel, V. Dyakonov. *Phys. Rev. Lett.*, **103**, 036 402 (2009).
- [14] Н.А. Королёв, В.Р. Никитенко, А.П. Тютнев. *ФТП*, **44**, 943 (2010).
- [15] Г.Ф. Новиков, Б.С. Яковлев. *Химия высоких энергий*, **19**, 282 (1985).
- [16] L.V. Lukin. *Chem. Phys.*, **360**, 32 (2009).
- [17] Р.Ш. Ихсанов, А.П. Тютнев, В.С. Саенко, Е.Д. Пожидаев. *Хим. физика*, **27** (4), 73 (2008).
- [18] В.Р. Никитенко, А.П. Тютнев, В.С. Саенко, Е.Д. Пожидаев. *Хим. физика*, **23**, 66 (2004).
- [19] Р.Т. Сибатов, В.В. Учайкин. *УФН*, **179** (10), 1079 (2009).
- [20] А.П. Тютнев, В.И. Архипов, В.Р. Никитенко, Д.Н. Садовничий. *Химия высоких энергий*, **29**, 351 (1995).
- [21] C. Deibel, T. Ströbel, V. Dyakonov. *Adv. Mater.*, **22**, 4097 (2010).
- [22] R.A. Street, S. Cowan, A.J. Heeger. *Phys. Rev. B*, **82**, 121 301(R) (2010).
- [23] M. Mingebach, S. Walter, V. Dyakonov, C. Deibel. *Appl. Phys. Lett.*, **100**, 193 302 (2012).
- [24] J. Behrends, A. Sperlich, A. Schnegg. et al. *Phys. Rev. B*, **85**, 125 206 (2012).
- [25] S.K. Pal, T. Kesti, M. Maiti, F. Zhang et al. *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 12 440 (2010).

Редактор Т.А. Полянская

Numerical modeling of polarization current of geminate pairs in disordered polymers with traps

N.A. Korolev, V.R. Nikitenko, A.P. Tyutnev*

National Research Nuclear University (MEPhI),
115409 Moscow, Russia

* Moscow State Institute of Electronics
and Mathematics of National Research University
„Higher School of Economics“,
109028 Moscow, Russia

Abstract Time dependencies of current, which is caused by non-stationary polarization of geminate pairs in disordered polymers by external electric field, are modeled by means of Monte-Carlo method. The model of hopping transport, which is controlled by exponential energy distribution of traps, is considered. Kinetics of polarization current has been analyzed, parametric in an initial separation of geminate pairs, relative concentration of traps, temperature, and external field strength. The region of parameters, where the negative current is possible, has been determined. Validity of an analytic model, which is based on the drift-diffusion description of electron and hole transport in dispersive transport regime, is considered.