

## Simulação da dinâmica de cargas em diodos orgânicos emissores de luz contendo poço de potencial

Gustavo T. Valente<sup>1</sup>, Francisco E. G. Guimalhães<sup>2</sup>.

1. Estudante de doutorado da Universidade de São Paulo – USP, São Carlos/SP; \*gtv@ifsc.usp.br

2. Pesquisador do Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, IFSC-USP, São Carlos/SP

Palavras Chave: *Eletrônica Orgânica, Monte Carlo, OLEDs.*

### Introdução

A busca por fontes de energia mais eficiente, mais limpa e de baixo custo, é crescente à nível mundial, um exemplo, é a tecnologia de fontes luminosas à base de diodos emissores de luz que apresentam maior durabilidade, economia e menor impacto ambiental do que as lâmpadas incandescentes convencionais. Neste cenário, a eletrônica orgânica flexível, baseada em polímeros semicondutores e moléculas pequenas, apresenta-se como uma alternativa inovadora na produção eficiente de luz através dos diodos orgânicos emissores de luz (OLEDs).

Atualmente, OLEDs contendo uma camada molecular emissiva e ultrafina (5-20 nm) na forma de poço de potencial exibem propriedades elétricas promissoras para aumentar a eficiência na geração de luz [1]. Nesses dispositivos, o poço de potencial confina as cargas numa estreita região favorecendo a recombinação do par elétron-buraco e a produção de luz. Porém, os mecanismos de transporte de carga nesses OLEDs ainda não são bem conhecidos. Nesse estudo, utilizou-se simulação computacional via o método de Monte Carlo para investigar a dinâmica de buracos (cargas positivas) em OLEDs contendo uma camada na forma de poço de potencial.

### Resultados e Discussão

O polímero transportador de buracos foi tratado segundo o modelo de desordem gaussiana utilizando valor médio da distribuição gaussiana em -5,5 eV e largura de 56 meV para simular o polifluoreno (PFO) comumente utilizado como camada transportadora de carga em OLEDs. Considerou-se o sistema como uma rede em duas dimensões (rede 2D) composta por 100x100 sítios e a taxa de transferência de carga utilizada foi do tipo de Miller-Abrahams [2].

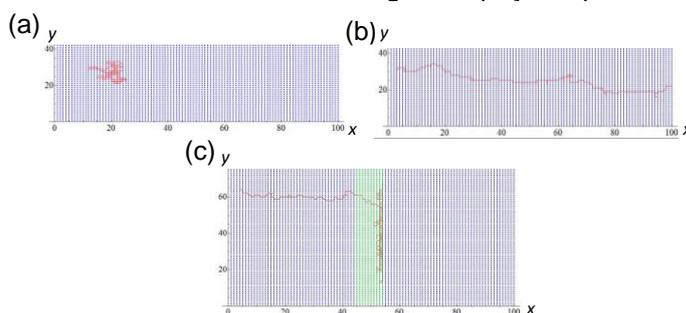
A figura 1 (a) apresenta uma região da rede 2D (pontos em azul) sem poço de potencial contendo a trajetória de um buraco (linha vermelha) sem a presença do campo elétrico. Como observado nessa figura, o buraco realiza uma caminhada aleatória (não há qualquer trajetória preferencial) em torno do seu ponto de origem com probabilidades de saltos entre sítios controlados unicamente pela desordem energética do sistema. Além disso, espera-se que a carga realize 100.000 saltos para um tempo total de término da simulação de  $10^{-7}$  s considerando uma taxa de salto da ordem de  $10^{12}$  s<sup>-1</sup>. No entanto, a simulação mostra que a carga visita um número médio de sítios igual a 1.250 durante os  $10^{-7}$  s (assumidos na simulação) uma vez que há um tempo médio de espera em cada sítio de cerca de  $8 \times 10^{-11}$  s.

Já a influência do campo elétrico no processo migratório do buraco é visualizada na figura 1 (b). Neste caso, aplicou-se um alto campo elétrico, 1 MV/cm, na direção x (sentido de x positivo), e nota-se que agora o buraco é transportado eficientemente na direção do campo

elétrico. Mobilidade elétrica para buracos da ordem de  $10^{-4}$  cm<sup>2</sup>/V.s foram obtidas com o método Monte Carlo e estão de acordo com valores experimentais reportados na literatura para polímeros semicondutores conjugados, entre  $10^{-4}$  e  $10^{-3}$  cm<sup>2</sup>/V.s [3-4]. Além disso, como esperado, o efeito de Poole-Frenkel foi observado no intervalo de 0,1 a 1,0 MV/cm.

O efeito do poço de potencial no confinamento das cargas está apresentado na figura 1(c) que mostra uma região da rede 2D contendo uma camada de poço de potencial com espessura de 10 sítios localizados no centro da rede (pontos em verde na figura). Assumiu-se um valor energético de -4,4 eV para os sítios no poço de potencial. O buraco caminha no sentido de x positivo e após encontrar a camada de poço de potencial fica confinado nessa região. Obteve-se uma taxa de preenchimento do poço de  $10^9$  buracos/s.

**Figura 1.** Trajetória de um buraco: (a) na ausência de campo elétrico, (b) campo elétrico de 1 MV/cm e (c) campo elétrico de 1 MV/cm com uma região de poço de potencial.



### Conclusões

Sem a presença do poço de potencial os resultados da simulação de transporte de carga utilizando o método de Monte Carlo foram capazes de reproduzir valores de mobilidade elétrica para o buraco em polímeros semicondutores conjugados bem como o efeito de Poole-Frenkel. Esses resultados validam a implementação do método de Monte Carlo nesse estudo, garantido a confiabilidade para o estudo do sistema contendo uma camada atuando como poço de potencial. Com a presença do poço de potencial, observou-se o confinamento das cargas nesse região e obteve-se uma taxa de preenchimento da região de poço de potencial.

### Agradecimentos

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo pelo apoio financeiro concedido ao projeto.

[1] HECK, V.C. Dissertação (Mestrado em Ciência e Engenharia de Materiais) – Escola de Engenharia de São Carlos, Instituto de Química de São Carlos e Instituto de Física de São Carlos, 2015.

[2] MILLER, A.; ABRAHAMS, E. *Physical Review*, 120, 745, 1960.

[3] KWON, Y.S et al. *Energy Environmental Science*, 7, 1454, 2014

[4] CAMPBELL, A.J. et al. *Applied Physics Letters*, 79, 2133, 2001.