

온도 변화에 따른 유기물 내에서의 전자 이동도

유주형, 유주태, 김태환

한양대학교 전자통신컴퓨터공학과

유기물을 기반으로 하는 유기발광소자(OLED), 유기메모리(OBD) 및 유기 태양전지(organic solar cell) 등과 같은 차세대 전자 소자는 기존의 무기물 기반의 소자에 비해 가격이 싸고 제작방법이 간단하며 휘어지게 만들 수 있다는 장점을 갖기 때문에 많은 관심을 받고 있다. 유기물질을 기반으로 한 전자 소자의 효율을 향상시키기 위해서는 유기물 자체의 물리적인 특성을 고찰하는 연구가 중요하다. 특히, 유기물 내에서의 전하 전송 메커니즘을 이해하기 위해 유기물의 이동도에 대한 연구가 중요하나, 아직까지 유기물질을 기반으로 한 전자 소자의 전하 이동도에 대한 이론적인 연구가 거의 없다. 본 연구에서는 온도 변화에 따른 유기물 내에서의 전자 이동도를 몬테카를로 방법을 이용하여 계산하였다. 시뮬레이션을 위한 기본 구조로 소자의 길이는 50~500 사이트로 하였으며, 이웃한 사이트간 거리는 3Å로 결정하였다. 유기물 내에 존재하는 트랩의 분포는 가우시안 분포로 가정하였다. 유기물 내에서의 전자 이동도를 추출하기 위해 이웃한 트랩간의 천이 확률을 Miller and Abrahams 식을 이용하여 계산하고[1], 트랩간의 천이시간을 컴퓨터에서 발생시킨 난수를 통해 얻어 이들을 통계적으로 처리하여 유기물 내에서의 전자 이동도를 계산하였다. 시뮬레이션 결과, 전자 이동도는 전계가 증가함에 따라 일정하게 증가하다가 일정 전계에서 포화된 후, 다시 감소하는 현상을 갖는다. 초기의 전계 영역에서는 전계의 증가에 따라 유기물 내 트랩간의 천이 확률이 증가하기 때문에 전자 이동도가 증가한다. 하지만, 일정 전계 이상의 큰 전계 영역에서는 전자의 이동 속도는 거의 변하지 않는 상태에서 전계는 계속 증가하기 때문에 상대적으로 전자 이동도는 줄어들게 된다. 다양한 길이를 갖는 벌크 상태의 유기소자에 대한 전자 이동도를 시뮬레이션 하였을 때, 소자의 크기와 상관없이 전자 이동도는 거의 일정 하였다. 이는 순수한 벌크 상태의 유기소자는 유기물 자체에서의 전자 움직임에 의해 전자 이동도가 결정되기 때문이다. 온도가 높아짐에 따라 유기물 내의 전자 이동도는 증가하였다. 이는 온도가 증가할수록 열적 여기에 의한 트랩간의 천이 확률이 증가하기 때문이다. 하지만, 트랩의 분산도가 30 meV로 작을 경우, 일정 온도 이상에서의 전자 이동도는 포화되어 일정한 값으로 유지한다. 유기물 내에 존재하는 트랩 분포에 따라 온도의 변화에 따른 전자 이동도 특성이 달라짐을 알 수 있다. 이러한 결과는 유기물질을 기반으로 한 전자소자에서의 전하 전송 메커니즘을 이해하고 소자의 제작 및 특성 향상에 도움이 된다고 생각한다.

This work was supported by the National Research Foundation of Korea (NRF) grant funded by the Korea government (MEST) (No. 2011-0018877).

[1] A. Miller and E. Abrahams, Phys. Rev. 120, 745 (1960).

Keywords: 유기물, 전자 이동도, 전하 전송 메카니즘