

DOI: <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2024.12.19>

УДК: 621.383

## ОЦЕНКА ПОДВИЖНОСТИ ЗАРЯДОВ В МАТРИЦАХ ИЗЛУЧАЮЩИХ СЛОЕВ ОРГАНИЧЕСКИХ СВЕТОДИОДОВ НА ОСНОВЕ АНТРАЦЕНА С ПОМОЩЬЮ МНОГОМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А.Ю. Сосорев<sup>1</sup>, Н.О. Дубинец<sup>1</sup>,  
С.А. Стахарный<sup>2</sup>, А.В. Нуриев<sup>2</sup>, А.А. Морозов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН,  
117393, Москва, Профсоюзная улица, д. 70

<sup>2</sup>АО «Центральный научно-исследовательский институт «Циклон»,  
107207, Москва, Щелковское шоссе, д. 77

Статья поступила в редакцию 10 декабря 2024 г.

**Аннотация.** Органические светодиоды являются основой современных дисплеев, микродисплеев и других средств визуализации информации. Возможность вариации молекулярной структуры органических полупроводников позволяют улучшить характеристики этих устройств, что особенно актуально для синих светодиодов. Для рационального молекулярного дизайна материалов для органических светодиодов целесообразно предсказывать их свойства с помощью многомасштабного компьютерного моделирования. В настоящей работе этот метод применен для расчета зарядово-транспортных свойств пленок четырех матриц, – основ излучающих слоев светодиодов, – на основе карбазола или антрацена. Определены энергии реорганизации, стандартные отклонения энергий граничных орбиталей и интегралы переноса заряда для этих материалов. Наконец, на основе этих параметров оценены подвижности носителей заряда, различие в которых составило четыре порядка. Определено, что наибольшими подвижностями как электронов, так и дырок обладает матрица на основе

карбазола mCP, а наименьшими – матрица на основе антрацена NaNaP-A. Полученные результаты полезны для оптимизации структуры ОСД на основе исследуемых соединений, а также разработке новых материалов для ОСД.

**Ключевые слова:** OLED, DFT, антраценовые матрицы, подвижность.

**Финансирование:** Минобрнауки РФ (FFSM–2022–0004)

**Автор для переписки:** Сосорев Андрей Юрьевич, [sosorev@ispm.ru](mailto:sosorev@ispm.ru)

## Введение

Органические светодиоды (ОСД, OLED) крайне перспективны, поскольку сочетают высокую яркость и контрастность с относительной простотой производства и возможностью миниатюризации. Благодаря этому, они являются основой современных дисплеев, микродисплеев и других средств визуализации информации, без которых невозможно себе представить развитие цифровых, интеллектуальных производственных технологий и роботизированных систем. Возможность вариации молекулярной структуры (молекулярного дизайна) светоизлучающих органических полупроводников и развитие технологии производства светодиодов позволяют улучшить их характеристики, в частности КПД, цветовую гамму, яркость и стабильность работы устройств. Особенно это актуально для синих ОСД, коммерческие образцы которых до сих пор основаны на люминофорах первого поколения – флуорофорах, в то время как для ОСД других цветов (в частности, зеленых и красных) применяются люминофоры второго (фосфоресцентные материалы) и третьего (TADF-люминофоры) поколений [1]. Для выбора наиболее подходящих для использования в ОСД органических полупроводников среди практически неограниченного множества соединений целесообразно использовать многомасштабное компьютерное моделирование, которое потенциально может позволить предсказывать характеристики устройства исходя из химической структуры компонентов [2-4].

Обычно светоизлучающие слои ОСД состоят из матрицы («host»), в которую внедряется допант («dopant»). Такая структура позволяет избежать концентрационного тушения люминесценции, наблюдаемого для большинства

люминофоров [1]. Для ОСД первого поколения матрица может существенно увеличить эффективность электролюминесценции, если в ней протекает процесс триплет-триплетной аннигиляции (ТГА). При этом процессе, два встретившихся триплетных экситона образуют синглетный экситон [5]. В результате, триплетные экситоны также дают вклад в электролюминесценцию, и для ОСД первого поколения предельная внутренняя квантовая эффективность последней возрастает с 25% до 62.5%. Сравнительно новыми матрицами для синих ОСД, проявляющими эффективную ТГА, являются соединения на основе антрацена преимущественно с фенильными и нафталиновыми заместителями. При этом, они могут быть значительно более стабильными, чем часто используемые матрицы на основе карбазола (типа mCP, mCBP), в первую очередь за счет более низкого триплетного уровня и более узкой транспортной щели – разности энергий высшей заполненной молекулярной орбитали (ВЗМО, НОМО) и низшей свободной молекулярной орбитали (НСМО, LUMO). Поэтому матрицы антраценового типа, в частности, 9,10-Бис(2-нафтил)антрацен (ADN) и 9-(1-нафталинил)-10-(4-(2-нафталинил)фенил)антрацен (NaNP-A), весьма популярны как для лабораторных разработок, так и в коммерчески доступных светодиодах [6-9]. Недавно, была предложена новая матрица антраценового типа 3-(4-(10-(нафталин-2-ил)антрацен-9-ил)фенил)дibenзо[с,g]фенантрен (NABH), позволяющая получить рекордно высокую эффективность ОСД [9].

Для работы органического светодиода необходимо, чтобы в его излучающем слое протекал эффективный транспорт и рекомбинация зарядов, для чего подвижность электронов и дырок должна быть сопоставима и достаточно высока. Знание подвижностей носителей заряда также необходимо для оптимизации структуры устройства – подбора толщины дырочно-транспортных и электронно-транспортных слоев. В связи с этим, для рационального поиска новых матриц для ОСД целесообразно оценивать подвижность зарядов в их пленках. В аморфных и поликристаллических пленках ОП наиболее адекватной моделью транспорта заряда является прыжковая модель, согласно которой носитель заряда совершает некогерентные прыжки между соседними

молекулами (сайтами) [4,10]. Для оценки скорости переноса заряда между двумя сайтами часто используется формула Маркуса [4,11]:

$$k = \frac{2\pi}{\hbar} J^2 \left( \frac{1}{4\pi k_B T} \right)^{1/2} \exp \left( -\frac{(\Delta E - \lambda)^2}{4\lambda k_B T} \right), \quad (1)$$

где  $\hbar$  – постоянная Планка с чертой,  $J$  – интеграл переноса заряда, характеризующий электронное взаимодействие между молекулами,  $\lambda$  – энергия реорганизации, характеризующая локальное электрон-колебательное взаимодействие,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура, а  $\Delta E$  – разность энергий начального и конечного состояний ( $\Delta E = 0$  для идентичных молекул). Подвижность  $\mu_0$  в отсутствие беспорядка оценивается из вычисленных по Ур. (1) значений  $k_i$  для разных направлений транспорта заряда с помощи формулы Эйнштейна-Смолуховского [12]:

$$\mu_0 = \frac{eD}{k_B T} = \frac{e}{6k_B T} \sum_i k_i r_i^2 p_i, \quad (2)$$

где  $e$  – элементарный заряд,  $r_i$  – расстояние между центрами соседних молекул,

а  $p_i = \frac{k_i}{\sum_j k_j}$  – вероятность движения заряда в данном направлении.

При наличии статического беспорядка, неизбежного в случае аморфной или поликристаллической структуры, подвижность зарядов уменьшается, поскольку носитель заряда периодически попадает на сайты с более низкой энергией («мелкие ловушки»), переход с которых на соседние сайты затруднен. В рамках модели, предложенной в работах [4,5,12], беспорядок экспоненциально уменьшает подвижность зарядов, причем степень этого уменьшения определяется дисперсией энергии носителя заряда на различных сайтах,  $\sigma$ :

$$\mu = \mu_0 \exp \left( -\left( \frac{2\sigma}{3kT} \right)^2 \right), \quad (3)$$

где  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура. В качестве энергии заряда на сайте используется энергия ВЗМО для дырок, НСМО для электронов.

В настоящей работе с помощью многомасштабного моделирования оценены подвижности зарядов в аморфных пленках трех матриц на основе антрацена – AND, NaNaP-A, NABH, – а также mCP – модельного соединения, для которого известны экспериментальные и теоретические подвижности зарядов. Показано, что у всех рассмотренных производных антрацена подвижность как электронов, так и дырок значительно ниже, чем у mCP, в т.ч. за счет большей энергии реорганизации, а также более сильного статического беспорядка – дисперсии энергий ВЗМО и НСМО. Замена нафтила на [5] гелицен в NABH существенно уменьшает энергию реорганизации как для дырок, так и для электронов по сравнению с ADN и NaNaP-A, но практически не изменяет дисперсию энергий ВЗМО и НСМО. В результате, подвижность зарядов обоих типов для NABH оказывается выше, чем для NaNaP-A и ADN, и, что особенно важно, оказывается более близкой для электронов и дырок. Таким образом, NABH показывает наиболее сбалансированную и наиболее высокую подвижность носителей заряда среди рассмотренных антраценовых матриц, что может быть одной из причин наблюдаемой эффективной работы этой матрицы в синих ОСД по сравнению с аналогами.

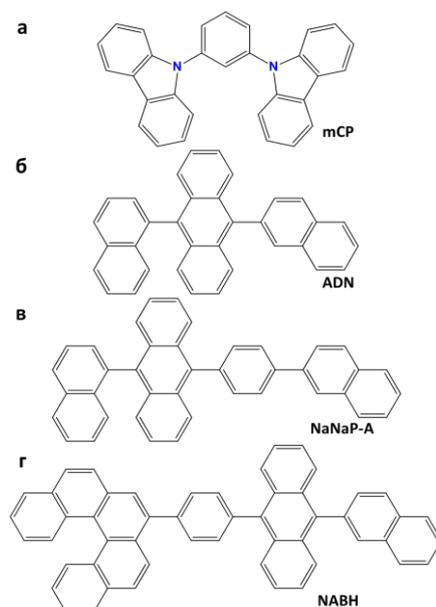


Рис. 1. Молекулярная структура исследуемых соединений.

## **1. Методы и модели.**

### **1.1 Газофазные расчеты**

Для получения теоретических значений энергий и профилей граничных орбиталей, полных энергий молекул в основном и нижних возбужденных синглетном и триплетном состояниях для всех исследуемых молекул использовалась теория функционала плотности (DFT). Были выполнены процедуры оптимизации геометрии в основном состоянии с использованием гибридного функционала B3LYP [13], базисного набора def2-SVP [14], а также дисперсионной поправкой D3BJ [15]. Для расчета энергий реорганизации дополнительно были выполнены процедуры оптимизации геометрий в анионном и катионном основном состояниях. Для уточнения значений энергий, используя полученные равновесные геометрии, были выполнены расчеты в базисном наборе def2-TZVP [16]. Все расчеты выполнялись в программном пакете ORCA [17].

### **1.2 Молекулярно-динамическое моделирование**

Для всех исследуемых соединений были рассчитаны параметры силового поля OPLS-aa [18,19]. Для каждой молекулы была сгенерирована аморфная периодическая кубическая ячейка размером 6\*6\*6 нм. Для каждой ячейки было выполнено молекулярно-динамическое моделирование, состоящее из процедуры минимизации энергии ячейки, NVT релаксации при температуре 900К для создания аморфной структуры, NPT релаксаций в баростате Berendsen при температурах 900К, 600К и при комнатной температуре 300К (Рисунок 2). Моделирование выполнялось в программном пакете Gromacs [20].

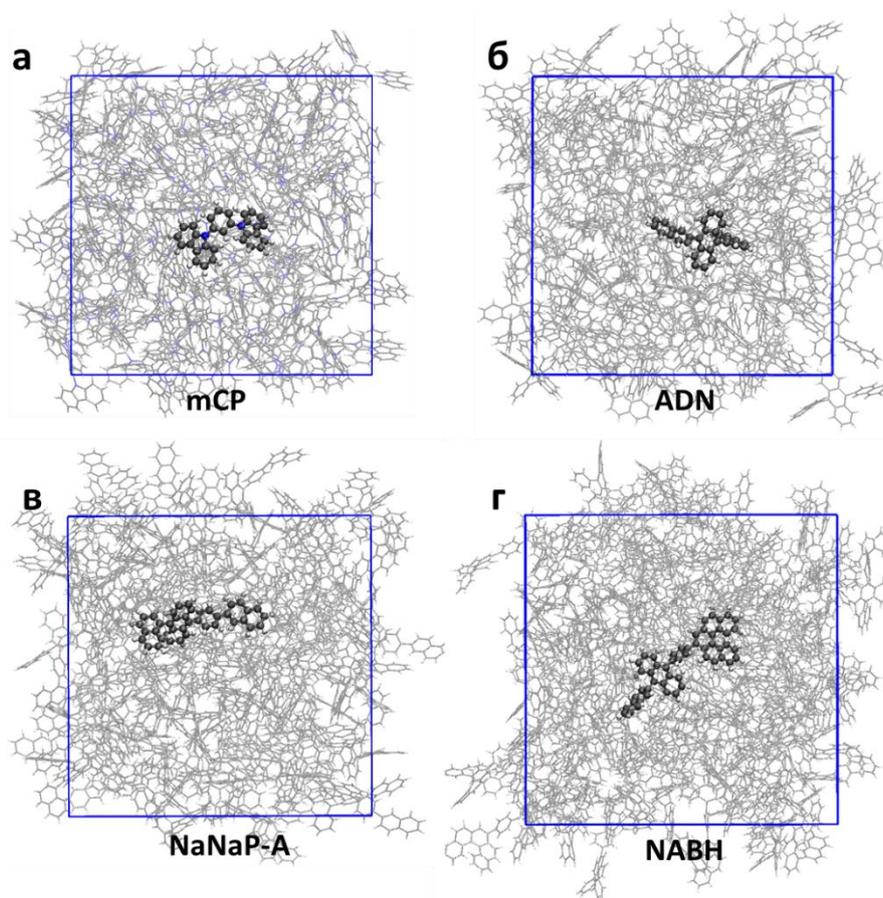


Рис. 2. Равновесные аморфные кубические ячейки матриц:  
а) mCP, б) ADN, в) NaNaP-A и г) NABH.

## 2. Оценка подвижности зарядов

Подвижность электронов и дырок была вычислена с помощью формулы (2). Использовалась вышеописанная структура аморфной пленки, для которых были рассчитаны интегралы переноса заряда проекционным методом (DIPRO) [21,22] на основе вычислений DFT. Расчеты энергий ВЗМО и НСМО и интегралов переноса проводились в приближении DFT B3LYP/3-21G. Использование малого базисного набора 3-21G обусловлено балансом между точностью и скоростью вычислений, который необходимо соблюдать вследствие большого числа пар молекул в ячейке (~200). Для интегралов переноса различие с более широким базисным набором (например, 6-31G\*\*) невелико (см. [23], что было проверено на одной из исследуемых систем. Энергия реорганизации была рассчитана как  $\lambda = (E_{IN} - E_{II}) + (E_{NI} - E_{NN})$ , где  $E_{IN}$  – энергия иона (катиона/аниона) в геометрии нейтрального состояния,  $E_{II}$  – энергия иона

в равновесной геометрии,  $E_{NI}$  – энергия нейтрального состояния в геометрии иона,  $E_{NN}$  – энергия нейтрального состояния в равновесной геометрии [12].

Итоговое выражение для подвижности зарядов, полученное из (1) и (2), имеет вид:

$$\mu = \frac{J_i^2 r_i^2}{6\hbar} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda kT}} \exp\left(-\frac{\lambda}{4kT} - \left(\frac{2\sigma}{3kT}\right)^2\right) \quad (3)$$

где  $J_i$  – интеграл переноса между  $i$ -й парой молекул,  $r_i$  – расстояние между этими молекулами,  $\lambda$  – энергия реорганизации при переносе носителя заряда. Усреднение производилось по всем парам молекул в ячейке моделирования.

### 3. Результаты

Полученные профили граничных орбиталей представлены на Рисунке 3. Для mCP НОМО распространено на всю молекулу, а LUMO – на всю молекулу за исключением фенилена (Рисунок 3а). Для всех антраценовых матриц ВЗМО и НСМО полностью локализованы на антраcene (Рисунок 3б-г). Значения энергий граничных орбиталей представлены на Рис. 4.

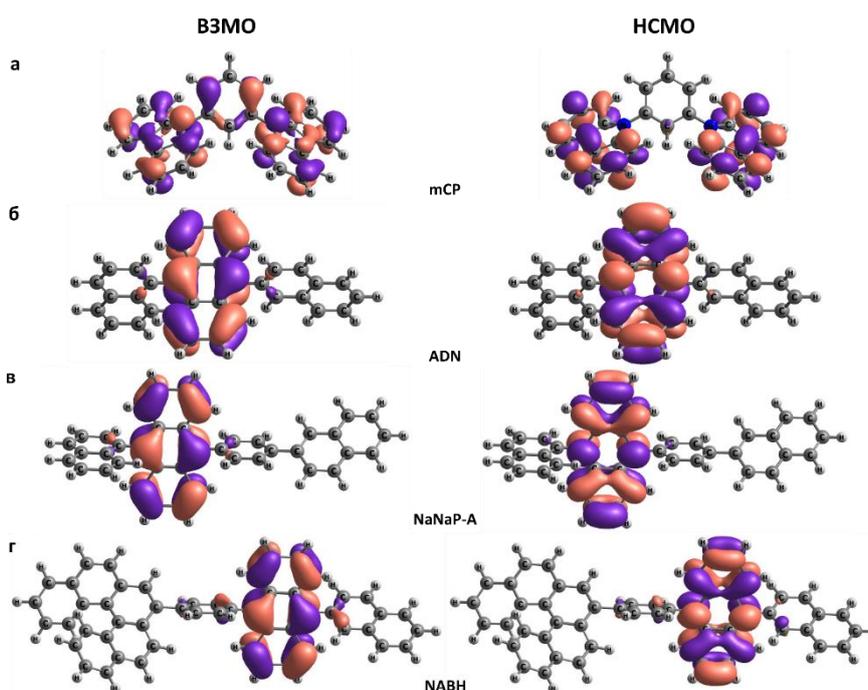


Рис. 3. Профили граничных орбиталей матриц:  
а) mCP, б) ADN, в) NaNaP-A и г) NABH.

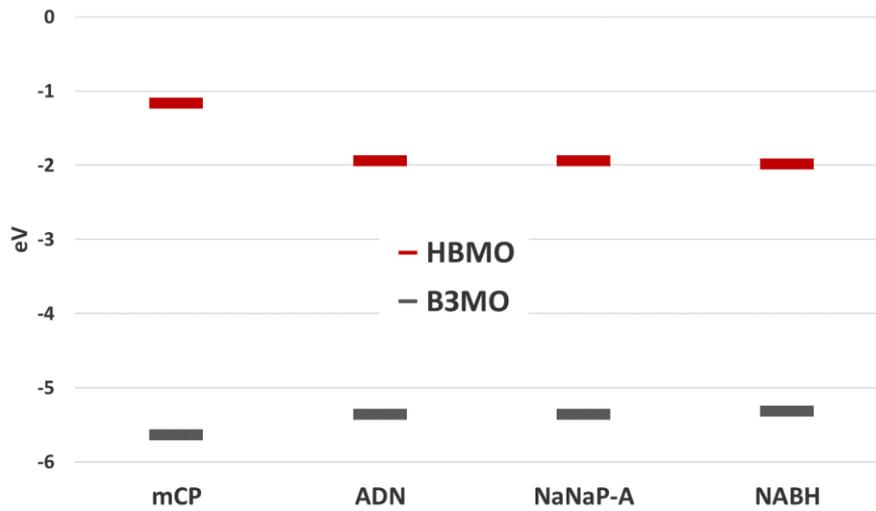


Рис. 4. Значения энергий граничных орбиталей матриц mCP, ADN, NaNaP-A и NABH.

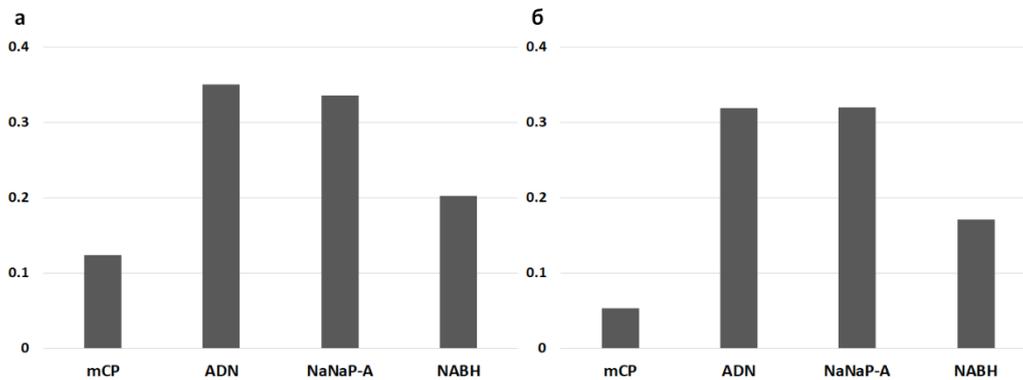


Рис. 5. Рассчитанные энергии реорганизации матриц mCP, ADN, NaNaP-A и NABH для электронов (а) и дырок (б).

Таблица 1. Значения ЭР ( $\lambda$ ), стандартных отклонений энергий носителя заряда ( $\sigma_E$ ), стандартного отклонения величины  $J^2 r^2$ , а также подвижности носителей заряда ( $\mu$ ) для электронов и дырок.

Соединение	Тип носителей	$\lambda$ , мэВ	$\sigma_E$ , мэВ	$\sqrt{\langle J^2 r^2 \rangle}$ , мэВ·Å	$\mu$ , см <sup>2</sup> В <sup>-1</sup> с <sup>-1</sup>
mCP	электроны	123	56	5.6	$2.7 \cdot 10^{-5}$
	дырки	53	39	5.5	$1.2 \cdot 10^{-4}$
ADN	электроны	350	72	3.8	$4.1 \cdot 10^{-7}$
	дырки	319	61	3.7	$8.9 \cdot 10^{-7}$
NaNaP-A	электроны	336	78	1.6	$6.2 \cdot 10^{-8}$
	дырки	320	63	1.9	$2.1 \cdot 10^{-7}$
NABH	электроны	202	71	3.6	$2.3 \cdot 10^{-6}$
	дырки	171	68	3.9	$4.1 \cdot 10^{-6}$

Рассчитанные значения энергий реорганизации (ЭР) для молекул исследуемых матриц представлены на Рис. 5. Значение ЭР для mCP существенно ниже, чем для производных антрацена. Это можно объяснить существенно большим размером  $\pi$ -сопряженной системы (длиной делокализации электрона) в молекуле mCP – и ВЗМО, и НСМО распространены практически на всю молекулу (см. Рис. 3 а,б), – в то время как в исследуемых антраценовых производных  $\pi$ -сопряженная система включает лишь антраценовое ядро (см. Рис. 3в-з). Примечательно, что замена нафталила на [5] гелицен в NABH существенно (более чем в полтора раза) уменьшает ЭР по сравнению с ADN и NaNaP-A.

В таблице 1 приведены значения стандартных отклонений энергий носителя заряда ( $\sigma_E$ ), среднего значения величины  $\langle J^2 \tau^2 \rangle$ , а также подвижности носителей заряда для электронов и дырок. Значения  $\sigma_E$  для антраценовых производных сопоставимы (как для электронов, так и для дырок), в то время как для mCP они существенно ниже. Значения  $\langle J^2 \tau^2 \rangle$  выше всего для mCP и ниже всего для NaNaP-A. Таким образом, в mCP все три фактора, определяющие подвижность зарядов согласно формуле (3), способствуют более высокой подвижности, чем в исследуемых производных антрацена. Соответственно, значение подвижностей как электронов, так и дырок в пленке mCP более чем на порядок выше, чем в последних. Значение дырочной подвижности для mCP прекрасно сходится с ранее полученными расчетным ( $2 \cdot 10^{-4} \text{ см}^2 \text{В}^{-1} \text{с}^{-1}$ ) [4] и экспериментальным ( $5 \cdot 10^{-4} \text{ см}^2 \text{В}^{-1} \text{с}^{-1}$ ) [24] значениями. Среди производных антрацена наибольшей подвижностью носителей заряда обладает NABH, наименьшей – NaNaP-A. Во всех исследованных матрицах электронная подвижность получилась в 2-3 раза меньше, чем дырочная, что можно объяснить большей ЭР для электронов. Наиболее сбалансированной является подвижность в NABH, что вместе с большими значениями  $\mu$  может быть причиной эффективной работы ОСД на основе этой матрицы [25].

## Заключение

В настоящей работе проведено многомасштабное моделирование подвижности носителей заряда в пленках четырех матриц излучающего слоя органических светодиодов – mCP и трех антраценовых производных: ADN, NaNaP-A и NABH. Для этого, проведено моделирование упаковки молекул в пленке методом молекулярной механики, рассчитаны стандартные отклонения энергий граничных орбиталей для различных молекул, интегралы переноса и энергии реорганизации. Обнаружено, что для mCP по сравнению с антраценовыми матрицами ниже энергия реорганизации, меньше стандартное отклонение энергий граничных орбиталей и больше среднее произведение интегралов переноса на расстояние между центрами молекул. Все три фактора способствуют увеличению подвижности зарядов, вследствие чего подвижность как электронов, так и дырок выше в mCP, чем в антраценовых производных. Среди последних, наибольшей и наиболее сбалансированной подвижностью обладает NABH, что может быть причиной исключительно эффективной работы светодиодов на основе этой матрицы. Ожидается, что полученные результаты будут способствовать оптимизации структуры органических светодиодов и направленному дизайну органических полупроводников для них.

**Финансирование:** Минобрнауки РФ (FFSM–2022–0004).

**Благодарность:** Расчеты выполнены с использованием мощностей Межведомственного Суперкомпьютерного Центра НИЦ “Курчатовский Институт” и Высокопроизводительного Вычислительного Центра НИЯУ МИФИ.

## Литература

1. Tankelevičiūtė E., Samuel I. D. W., Zysman-Colman E. The Blue Problem: OLED Stability and Degradation Mechanisms // The Journal of Physical Chemistry Letters. – 2024. – Т. 15, № 4. – С. 1034-1047.

2. Li H., Qiu Y., Duan L. Multi-scale calculation of the electric properties of organic-based devices from the molecular structure // *Organic Electronics*. – 2016. – Т. 33. – С. 164-171.
3. Suzuki F., Kubo S., Fukushima T., Kaji H. Effects of Structural and Energetic Disorders on Charge Transports in Crystal and Amorphous Organic Layers // *Scientific Reports*. – 2018. – Т. 8, № 1. – С. 5203.
4. Mondal A., Paterson L., Cho J., Lin K.-H., van der Zee B., Wetzelaer G.-J. A. H., Stankevych A., Vakhnin A., Kim J.-J., Kadashchuk A., Blom P. W. M., May F., Andrienko D. Molecular library of OLED host materials–Evaluating the multiscale simulation workflow // *Chemical Physics Reviews*. – 2021. – Т. 2, № 3.
5. Köhler A., Bässler H. Triplet states in organic semiconductors // *Materials Science and Engineering: R: Reports*. – 2009. – Т. 66, № 4. – С. 71-109.
6. Cho S. M., Youn K. M., Yang H. I., Lee S. H., Naveen K. R., Karthik D., Jeong H., Kwon J. H. Anthracene-dibenzofuran based electron transport type hosts for long lifetime multiple resonance pure blue OLEDs // *Organic Electronics*. – 2022. – Т. 105. – С. 106501.
7. Nguyen T. B., Nakanotani H., Adachi C. An Overlooked Charge-Transfer Interaction in the Interfacial Triplet–Triplet Upconversion Process in Blue Organic Light-Emitting Diodes // *Advanced Optical Materials*. – 2022. – Т. 10, № 18. – С. 2200704.
8. Cai W., Li W., Song X., Zheng X., Guo H., Lin C., Yang D., Ma D., Ng M., Tang M.-C. Host Engineering of Deep-Blue-Fluorescent Organic Light-Emitting Diodes with High Operational Stability and Narrowband Emission // *Advanced Science*. – 2024. – Т. 11, № 43. – С. 2407278.
9. Kuang C., Li S., Murtaza I., Meng Z., Li H., Zhang X., Wu C., Tong K.-N., Shang Y., He Y., Zhu Y., Wei G., Meng H. Enhanced Horizontal Dipole Orientation by Novel Penta-Helicene Anthracene-Based Host for Efficient Blue Fluorescent OLEDs // *Small*. – 2024. – Т. 20, № 24. – С. 2311114.
10. *Electronic processes in organic semiconductors: An introduction.* / Köhler A., Bässler H.: John Wiley & Sons, 2015.

11. Marcus R. A., Sutin N. Electron transfers in chemistry and biology // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Reviews on Bioenergetics.* – 1985. – Т. 811, № 3. – С. 265-322.
12. Coropceanu V., Cornil J., da Silva Filho D. A., Olivier Y., Silbey R., Brédas J.-L. Charge Transport in Organic Semiconductors // *Chemical Reviews.* – 2007. – Т. 107, № 4. – С. 926-952.
13. Stephens P. J., Devlin F. J., Chabalowski C. F., Frisch M. J. Ab Initio Calculation of Vibrational Absorption and Circular Dichroism Spectra Using Density Functional Force Fields // *The Journal of Physical Chemistry.* – 1994. – Т. 98, № 45. – С. 11623-11627.
14. Schäfer A., Horn H., Ahlrichs R. Fully optimized contracted Gaussian basis sets for atoms Li to Kr // *The Journal of Chemical Physics.* – 1992. – Т. 97, № 4. – С. 2571-2577.
15. Grimme S., Ehrlich S., Goerigk L. Effect of the damping function in dispersion corrected density functional theory // *Journal of Computational Chemistry.* – 2011. – Т. 32, № 7. – С. 1456-1465.
16. Weigend F., Ahlrichs R. Balanced basis sets of split valence, triple zeta valence and quadruple zeta valence quality for H to Rn: Design and assessment of accuracy // *Physical Chemistry Chemical Physics.* – 2005. – Т. 7, № 18. – С. 3297-3305.
17. Neese F. Software update: The ORCA program system–Version 5.0 // *WIREs Computational Molecular Science.* – 2022. – Т. 12, № 5. – С. e1606.
18. Jorgensen W. L., Maxwell D. S., Tirado-Rives J. Development and testing of the OPLS all-atom force field on conformational energetics and properties of organic liquids // *Journal of the American Chemical Society.* – 1996. – Т. 118, № 45.
19. Jorgensen W. L., Tirado-Rives J. The OPLS Potential Functions for Proteins. Energy Minimizations for Crystals of Cyclic Peptides and Crambin // *Journal of the American Chemical Society.* – 1988. – Т. 110, № 6.

20. Abraham M. J., Murtola T., Schulz R., Páll S., Smith J. C., Hess B., Lindahl E. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers // *SoftwareX*. – 2015. – Т. 1-2. – С. 19-25.
21. Kirkpatrick J. An approximate method for calculating transfer integrals based on the ZINDO Hamiltonian // *International Journal of Quantum Chemistry*. – 2008. – Т. 108, № 1. – С. 51-56.
22. Kobayashi H., Kobayashi N., Hosoi S., Koshitani N., Murakami D., Shirasawa R., Kudo Y., Hobara D., Tokita Y., Itabashi M. Hopping and band mobilities of pentacene, rubrene, and 2,7-dioctyl[1]benzothieno[3,2-b][1]benzothiophene (C8-BTBT) from first principle calculations // *The Journal of Chemical Physics*. – 2013. – Т. 139, № 1.
23. Landi A., Troisi A. Rapid Evaluation of Dynamic Electronic Disorder in Molecular Semiconductors // *The Journal of Physical Chemistry C*. – 2018. – Т. 122, № 32. – С. 18336-18345.
24. Wu M.-F., Yeh S.-J., Chen C.-T., Murayama H., Tsuboi T., Li W.-S., Chao I., Liu S.-W., Wang J.-K. The Quest for High-Performance Host Materials for Electrophosphorescent Blue Dopants // *Advanced Functional Materials*. – 2007. – Т. 17, № 12. – С. 1887-1895.
25. Kim J.-M., Lee C.-H., Kim J.-J. Mobility balance in the light-emitting layer governs the polaron accumulation and operational stability of organic light-emitting diodes // *Applied Physics Letters*. – 2017. – Т. 111, № 20.

**Для цитирования:**

Сосорев А.Ю., Дубинец Н.О., Стахарный С.А., Нуриев А.В., Морозов А.А. Оценка подвижности зарядов в матрицах излучающих слоев органических светодиодов на основе антрацена с помощью многомасштабного моделирования. // *Журнал радиоэлектроники*. – 2024. – №. 12. <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2024.12.19>