

单层有机器件的电子传输特性的数值模拟

胡 饶海波[†]

(电子科技大学光电信息学院, 成都 610054)

(2008 年 8 月 21 日收到, 2008 年 11 月 19 日收到修改稿)

在漂移扩散模型的基础上建立了单层有机器件的模型, 包括了电荷注入、传输、空间电荷效应和陷阱的影响. 电荷注入考虑了热电子发射电流和隧道电流. 模拟得到的结果和文献中报道的实验测试数据一致. 模拟研究了各个因素对器件 J - V 曲线的影响, 电流和器件长度成反比, 电流随着空穴注入势垒的减小而增加. 电子注入势垒从 1.7 eV 减少到 0.5 eV 时, 电流随着电子注入势垒的减小而减小, 这主要是因为有机材料中电子迁移率太小, 电子注入电流的增加可以忽略, 而电子注入势垒的减小使内建势增加, 在同样的电压下, 场强变小, 空穴注入电流变小, 当电子注入势垒继续减小到 0.1 eV 时, 电流增加. 这是因为有机材料的电子迁移率低, 注入的电子堆积在阴极附近, 使阳极附近的电场增大, 空穴电流变大.

关键词: 有机器件, 传输特性, 数值模拟

PACC: 7360R, 7210B, 7120H

1. 引 言

近年来, 有机半导体器件得到了广泛的研究, 因为其制作工艺简单, 成本低, 可以作为大屏幕显示、照明器件、光伏器件^[1-3]. 人们建立了大量的电子传输模型来解释和拟合器件的特性^[4-11], 这些模型的主体是漂移扩散方程, 并考虑了随场变化的迁移率、空间电荷效应等, 同时也有人关注电荷到有机材料中的注入^[5,9].

但是, 到目前为止, 应用这些模型还是有一些限制, 因为一些传输的关键参数, 例如迁移率, 势垒高度都是通过 J - V 曲线来推断出来的, 而且电流曲线对迁移率和势垒高度都是很敏感的, 所以研究一些参数的变化对电流曲线的影响是很重要的, 本文研究了各种因素的变化对 ITO/PPV/Al 典型器件的 J - V 曲线的影响.

2. 模 型

器件模型已经有很多作者进行了描述^[5,11], 模型描述的为一维的稳态的情况, 主要思想是包含了载流子密度、电位的耦合了泊松方程的电流连续性方程, 这些方程通过离散化处理^[12], 然后通过迭代

的方法进行求解.

在有机半导体材料中, 实验和理论都证明了载流子的迁移率采用以下公式^[13-15]:

$$\mu = \mu_{\text{E0}} \exp(\sqrt{E/E_0}), \quad (1)$$

其中 μ_{E0} 为零场迁移率, 由以下公式决定:

$$\mu_{\text{E0}} = \mu_0 \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right),$$
$$\frac{1}{E_0} = B \left[\frac{1}{kT} - \frac{1}{kT_0} \right], \quad (2)$$

其中 μ_0 为常数, E_0 描述的为迁移率受电场强度影响的多少, Δ , B , T_0 都是材料参数, 与材料的性质有关. 这并不是大部分人认为的 Poole-Frenkel 迁移率模型^[5], 虽然形式相同, 但内容不一样^[1].

对于接触的边界条件, 在模拟中, 在电极处的接触势垒(肖特基势垒 Ψ_b) 有金属的功函数 ϕ_m 和半导体的电子亲和势 χ_c 决定, $\Psi_b = \phi_m - \chi_c$. 表面的电势 Ψ_s 定义如下:

$$\phi_s = \chi_c + \frac{E_g}{2q} + \frac{kT}{2q} \ln \frac{N_{\text{LUMO}}}{N_{\text{HOMO}}} - \phi_m + V_{\text{app}}, \quad (3)$$

其中 E_g 为有机材料的 E_{HOMO} 和 E_{LUMO} 的带隙宽度, q 为电子电量, k 为 Boltzmann 常数, T 为绝对温度, N_{LUMO} , N_{HOMO} 分别为最低未被占据和最高被占据的分子轨道态密度, V_{app} 为外加电压.

[†] E-mail: rhh@uestc.edu.cn

而边界处的载流子密度由注入电流决定,注入电流有三部分组成,热电子发射电流、反向界面复合电流(热电子发射的反向过程)、隧道电流。

在 $x=0$ 处,左边界处,空穴载流子的电流为

$$J_p(0) = J_{th}(0) - J_{ir}(0) + J_m(0), \quad (4)$$

其中 J_{th} 为热电子发射电流, J_{ir} 为界面复合电流, J_m 为隧道电流,

$$J_{th} = AT^2 e^{-E_b/kT}, \quad (5)$$

E_b 为界面能量势垒,考虑到镜像力的影响, E_b 决定于界面处的电场 E 的大小,

$$E_b = \Phi - e\sqrt{\frac{e|E|}{4\pi\epsilon}}, \quad (6)$$

其中 Φ 为无电场下的肖特基势垒,界面复合电流是和界面处的载流子密度成正比的。在 $x=0$ 处,

$$J_{ir} = \nu p, \quad (7)$$

其中 ν 由下面的公式决定:

$$\nu = \frac{AT^2}{N_c}. \quad (8)$$

隧道电流使用 FN(Fowler-Nordheim)隧道电流模型^[9,11],同时考虑到镜像力的影响,

$$J_m = \frac{q^3}{8\pi h E_b} E^2 \exp\left(-\frac{8\pi\sqrt{2qm}E_b^{3/2}}{3hE}\right). \quad (9)$$

当不同位置的电流 $J = J_p + J_n$ 达到一致时,就达到了稳态。稳态时,得到复合电流

$$J_r = J_p(0) - J_p(L).$$

边界条件和迭代方程的处理都是用 MATLAB 编程完成。

3. 结果和讨论

下面对单层机电致发光器件的特性进行模拟,为了对比模型计算结果和实验数据,应用到器件中使用的有机材料为 MEH-PPV(phenylene vinylene),材料参数如表 1 所示。

图 1 为计算的 120 nm 厚的 ITO/PPV/Al 的 $J-V$ 特性曲线和参考文献 9 的测量曲线,图 1 纵坐标为对数坐标,横坐标为线性坐标。电子迁移率 $\mu_{e0} = 0.01\mu_{i0}$,从 Al 到有机材料 PPV 的电子注入的势垒高度为 1.7 eV,而 ITO 的空穴注入势垒为 0.5 eV,因为电子注入的势垒远比空穴势垒注入势垒高得多,有机材料中电流传输主要是由空穴决定的,很好地符合了实验测量数据,这时决定电流的主要因素是注入限制流。

表 1 材料参数

绝对温度 T/K	300
相对介电常数 ϵ_0	3
最高被占据的分子轨道态密度 N_{HOMO}/cm^{-3}	1×10^{21}
最低未被占据的分子轨道态密度 N_{LUMO}/cm^{-3}	1×10^{21}
掺杂浓度 N_A/cm^{-3}	1×10^{14}
空穴零场迁移率 $\mu_{i0}(\text{PPV})/\text{cm}^2(\text{Vs})^{-1}$	1.5×10^{-6}
材料临界电场 $E_0(\text{PPV})/(\text{V}/\text{cm})$	10^5
$E_{LUMO}(\text{PPV})/\text{eV}$	2.5
$E_{HOMO}(\text{PPV})/\text{eV}$	5.2
$\phi_m(\text{ITO})/\text{eV}$	4.7
$\phi_m(\text{Al})/\text{eV}$	4.2
$\phi_m(\text{Au})/\text{eV}$	5.1

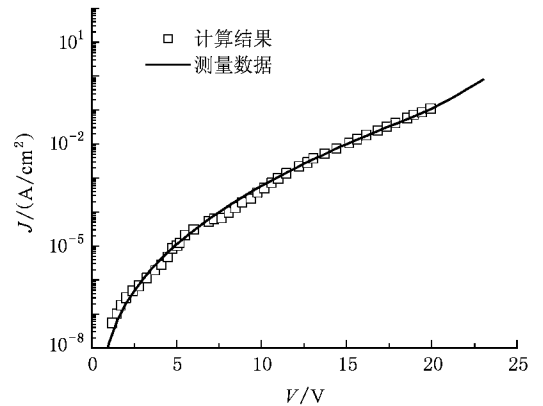


图 1 ITO/MEH-PPV/Al 的 $J-V$ 特性曲线计算结果和实验测量数据的对比,坐标为线性-对数坐标

器件 $J-V$ 曲线受到多种因素的影响,而一个因素会产生多种效应,为了直接考察参数对器件 $J-V$ 曲线的影响,每次只考虑一种参数的变化,假设 PPV 有机材料中是没有陷阱的。

图 2 显示的是器件长度的变化对器件 $J-V$ 曲线的影响,器件长度从 100—120 nm 变化,从图上可以看出,器件长度增加,器件的电流减小。因为空穴的注入势垒是 0.5 eV,所以电流应该为注入限制电流,而在注入限制流下,热电子发射电流是主要的电流机理,热电子发射电流是随电场变化的,所以当器件长度增加时,而给定的电压下,电场变小,热电子发射电流变小。另外一个原因是迁移率随着电场变小而变小,还有一个原因是受镜像力的作用引起的势垒降低也是和电场大小成正比的,所以电场降低,势垒减小的少,电流也随之减小,所以所有的原因都是因为器件长度的变化起因电场变化而引起的。

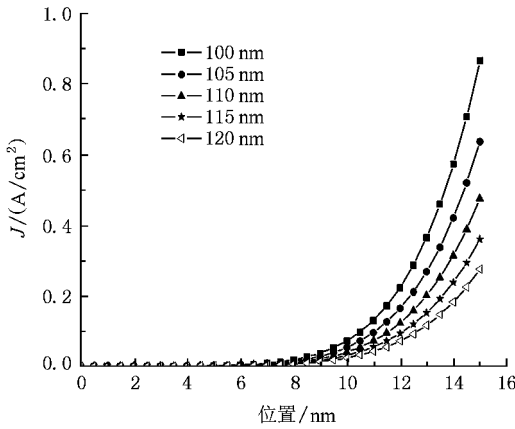


图2 器件长度对器件 $J-V$ 曲线的影响,器件长度从 100—120 nm变化,坐标为线性坐标

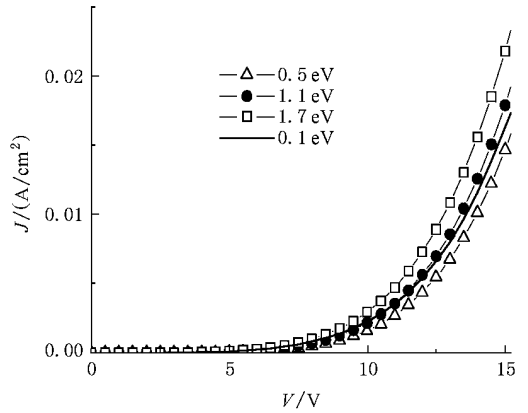


图4 阴极电子注入势垒的大小对器件 $J-V$ 曲线的影响

图3为 $J-V$ 曲线随着空穴注入势垒 ϕ_{bp} 的变化而变化的曲线图,随着势垒高度的降低,电流密度迅速增大,因为模拟计算中电子注入势垒很高,有机材料中的电子很少,空穴电流占主导地位.势垒高度的变化是通过ITO功函数的变化实现的,PPV的参数不变.势垒高度的减小意味着ITO功函数的增加,使内建势增大,所以在一定的电压下,有效的电场 $E_{eff} = (V_{app} - V_{bi})/L$ 会减小,这样会使和电场相关的参数如迁移率、镜像力势垒高度降低、热电子发射变小,但是因为势垒高度降低使电流密度增加得更大,从而随着势垒高度的降低,电流密度越大.当势垒高度降到 0.3 eV 以下时,电流密度为无陷阱的空间电荷限制流(SCLC)接触也变成了欧姆接触.

阴极材料的功函数实现,有机材料参数不变.空穴注入势垒不变为 0.5 eV.随着势垒高度的降低,电流密度并没有像空穴势垒的降低而电流密度迅速增加,相反电流密度减小,这主要是因为阴极材料的功函数减少,内建势垒增大,所以在一定的电压下,电场变小,这样阳极注入电流就会变小,而因为电子的迁移率太小,使得势垒降低带来的电流密度的增加可以忽略,总体电流变小,而电子注入到有机材料中引起空间电荷效应,使阳极电场增大,但是从 1.7 eV 降到 0.5 eV,从图5可以看出,电场强度还是变小,这是内建势的增加引起电场变小起主要作用,所以电流变小.而空穴势垒再变小,降到 0.1 eV 时,可以从图4上看到,电流密度没有像之前变小,而是变大,这是因为随着电子注入势垒的减小,电子大量的注入到有机材料中,而有机材料中电子迁移率很低,电子大量的堆积在阴极附近的有机材料中,阴极附近的电场变小,而阳极附近的电场变大,而且电场比因为内建势垒增大引起的电场减小增加得多,从图

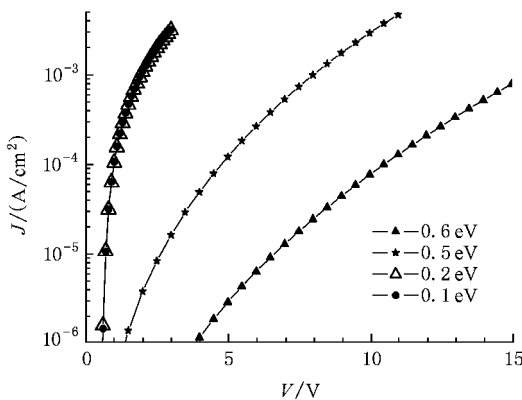


图3 阳极空穴注入势垒大小对器件 $J-V$ 曲线的影响

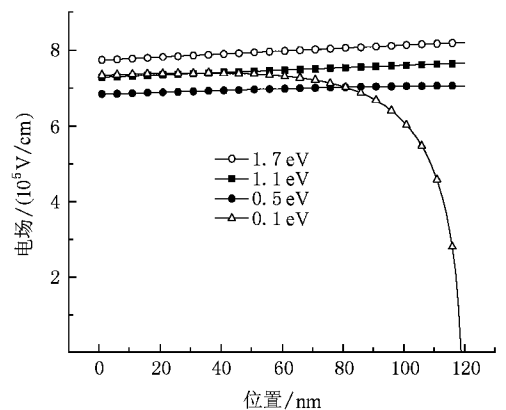


图5 10 V 电压下不同阴极注入势垒下的场强分布

因为PPV中的电子迁移率低,所以电子注入的势垒通常是被忽略的,图4显示的为 $J-V$ 曲线随着电子注入的势垒高度变化而变化.电子势垒高度 ϕ_{bn} 从 1.7 eV 变化到 0.5 eV,势垒高度的变化通过改变

5 可以看出, 阴极注入势垒为 0.1 eV 时, 在阳极附近的电场强度大于阴极注入势垒为 0.5 eV 和 1.1 eV 的电场强度, 所以在 10 V 电压下电流密度也大。

4. 结 论

本文研究了单层结构有机电致发光器件特性的模型, 包括电荷注入、传输、热电子发射、FN 隧道、空间电荷效应, 而不像研究模型需要分为接触限制和注入限制。

得到的模拟结果和实验测试结果一致。模拟时, 只需要改变少数几个参数如迁移率的相关参数, 就得到和实验测试一致的结果。

影响 OLED 器件 $J-V$ 曲线是由多种因素决定的, 改变一个参数会产生多种结果, 有些是使电流变

大, 有些是使电流变小, 本文研究了器件长度、空穴注入势垒、电子注入势垒参数对器件 $J-V$ 曲线的影响。其中电子注入势垒的降低并没有像我们想象的那样会使电流变大, 相反地, 电子势垒从 1.7 eV 降到 0.5 eV, 电流变小, 这是因为电子注入势垒的降低使内建势增大, 在相同的电压下, 电场变小, 从而空穴注入电流变小, 而因为电子迁移率太小, 电子注入势垒的降低引起的电子注入电流的增加可以忽略, 所以总体上电流变小了。而当电子注入势垒继续降低时, 降到 0.1 eV, 因为大量电子注入到有机材料中, 空间电荷效应明显, 引起阳极电场增大, 空穴注入增加, 电流变大。而这些因素对 $J-V$ 曲线的影响通过分析是不能准确得到的, 只有通过数值计算的方法才能解决。

-
- [1] Brütting W, Berleb S, Mückl A 2001 *Org. Electronics*. **2** 1
- [2] Christian Gärtner, Christian Karmutsch, Uli Lemmer *et al* 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 023107
- [3] Wu X M, Hua Y L, Yin S G, Zhang G H, Hui J L, Zhang L J, Wang Y 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1150 (in Chinese) [吴晓明、华玉林、印寿根、张国辉、惠娟利、张丽娟、王 宇 2008 物理学报 **57** 1150]
- [4] Hu Y, Rao H B 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5928 (in Chinese) [胡、饶海波、李君飞 2008 物理学报 **57** 5928]
- [5] Davids P S, Campbell I H, Smith D L 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 6319
- [6] Campbell I H, Davids P S, Smith D L *et al* 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 1863
- [7] Crone B K, Davids P S, Cambell I H *et al* 2000 *J. Appl. Phys.* **87** 1974
- [8] Scott J C, Karg S, Carter S A 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 1454
- [9] Parker I D 1994 *J. Appl. Phys.* **75** 1656
- [10] Chih-Chien Lee, Mei-Ying Chang, Yeung-Dong Jong *et al* 2004 *Jap. J. Appl. Phys.* **43** 7560
- [11] Nguyen N D, Schmeits M 2006 *Phys. Stat. Sol. (a)* **8** 1901
- [12] Scharfetter D L, Gummel H K 1969 *IEEE Transactions on Electron Devices* **16** 64
- [13] Blom P W M, de Jong M J M, van Munster M G 1997 *Phys. Rev. B* **55** R656
- [14] Lupton J M, Samuel I D W 1999 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **32** 2973
- [15] Malliaras G G, Salem J R, Brock P J, Scott J C 1998 *Phys. Rev. B* **58** R13411

Numerical simulation of electrical transport characteristics of single layer organic devices

Hu Yue Rao Hai-Bo[†]

(School of Optoelectronic Information , University of Electronic Science and Technology of China , Chengdu 610054 , China)

(Received 21 August 2008 ; revised manuscript received 19 November 2008)

Abstract

A numerical model of organic devices , which includes charge injection , transport , space charge effect and trap influence , was discussed in this paper. Both thermionic emission over the barrier and tunneling through the barrier are considered in charge injection into the bulk. The result is in good agreement with the experimental data. Several parameters have been simulated to study the change of J - V characteristics. The current decreases with the increases of the length of device. The current density becomes higher when the hole injecting barrier is smaller. However , when the electronic injecting barrier decreases from 1.7 eV to 0.5 eV , the current density becomes smaller. This is because the electronic mobility is too small , and the electronic injecting current is negligible compared with the hole current. When the electronic injecting barrier is smaller , the built-in potential becomes bigger , under the same applied voltage , the field diminishes , and the hole current becomes smaller. When the barrier is reduced to 0.1 eV , the current density increases. This is because the electronic mobility is too small , and electrons accumulate near the cathode , the electric field around the anode increases and the current increases.

Keywords : organic devices , transport characteristics , simulation

PACC : 7360R , 7210B , 7120H

[†] E-mail : rhb@uestc.edu.cn