

شبیه‌سازی دیود نور گسیل آلی (OLED) و بهبود عملکرد آن با اصلاح لایه تزریق الکترون

مرجان باقری^۱، فرزانه عرب‌پور^۲، سید مهدی بنی‌هاشمی^۳

۱ کارشناس ارشد برق الکترونیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران مرکزی

۲ استادیار گروه فرایند، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه تربیت مدرس

۳ استادیار باشگاه پژوهشگران جوان، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران مرکزی، m.banihashemi@iauctb.ac.ir

چکیده

مطالعه و پژوهش در زمینه مواد قابل استفاده در لایه تزریق الکترون، یکی از مهمترین گام‌ها برای دستیابی به راندمان بالا و ولتاژ تحریک پایین در دیودهای نورگسیل آلی (OLED) به شمار می‌رود. در این مقاله، با استفاده از نرم‌افزار اتلس سیلوواکو، رفتار موادی نظیر Al_2O_3 ، TiO_2 و $NaSt$ به عنوان لایه تزریق الکترون (EIL) در یک نمونه OLED پلیمری با ساختار $ITO/PEDOT:PSS/PH-PPV/EIL/Al_2O_3$ می‌توان به دیودی با چگالی جریان بالا، درخشندگی بالا (13550 cd/m^2)، ولتاژ تحریک پایین ($2/37$) و ولتاژ کاری پایین ($4/057$) در مقایسه با دو نمونه دیگر دست یافت. علت این موضوع، بالا بودن میدان الکتریکی (حدود $2/4$ برابر) ناشی از اختلاف تابع کار Al_2O_3 و الکترون خواهی $PH-PPV$ بیشتر نسبت به دو نمونه دیگر است که نقش برجسته‌ای را در کمک به تزریق حامل‌های بار ایفا می‌کند. علاوه بر این باز ترکیب در نمونه با ساختار Al_2O_3 تقریباً در وسط لایه گسیل رخ می‌دهد. ضمناً بالاترین راندمان خروجی برای نمونه TiO_2 بدست آمد که ناشی از افزایش میزان باز ترکیب تابشی نسبت به سایر مکانیزم‌های باز ترکیب در لایه گسیل نور است.

کلیدواژه

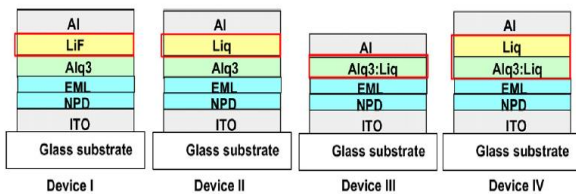
OLED، لایه تزریق الکترون، شبیه‌سازی، راندمان

مقدمه

لایه‌های مختلفی در ساختار OLED انجام سه فرایند مهم: تزریق بار، انتقال بار و گسیل نور را برعهده دارند. از آنجا که اصل کارکرد OLED بر مبنای باز ترکیب زوج الکترون-حفره است که با تشکیل و از بین رفتن حالت‌های برانگیخته در لایه گسیل نور همراه است، راندمان OLED به ضریب تعادل حامل بار (که به صورت نسبت الکترون‌ها به حفره‌ها در ناحیه باز ترکیب تعریف می‌شود)، بستگی دارد [۱]. بنابراین یکی از کارهای دشوار در فرایند طراحی OLED، بهینه‌کردن تعادل حامل بار است. بطور کلی ولتاژ تحریک، راندمان درخشندگی و پایداری طولانی‌مدت OLED به تزریق بار از کاتد و آند بستگی دارد [۲]. سد انرژی در سطح مشترک الکتروود - لایه‌های انتقال بار باید کمینه شود و تزریق حفره از آند و تزریق الکترون از کاتد باید به طور بهینه متعادل

امروزه ساخت وسایل اپتوالکترونیک با استفاده از دیودهای نورگسیل آلی (OLED)، به دلیل دارا بودن ویژگی‌های جذاب و منحصر به فردی نظیر انعطاف‌پذیری، ضخامت بسیار کم، سبکی، مقاوم بودن و کیفیت رنگ بسیار بالا به سرعت در حال گسترش است. در طول سالیان متمادی پیشرفت‌های قابل توجهی در زمینه مواد، روش‌های ساخت و فیزیک OLED در راستای بهبود راندمان، پایداری و طول عمر انجام شده است. با این حال تلاش‌ها برای دستیابی به حداکثر عملکرد مفید از OLED ادامه دارد و محققان در حال بررسی عوامل مختلف تاثیرگذار در این حوزه هستند.

دارای Liq در مقایسه با نمونه دارای LiF، از نظر راندمان توان، طول عمر، دمای تبخیر و کنترل ضخامت، از ویژگی‌های برتری برخوردار است. شایان ذکر است که EIL نازک نمی‌تواند تمام سطح ETL را پوشش داده و ساختار جزیره‌ای را روی سطوح ETL تشکیل دهد. بنابراین انتظار می‌رود در صورتی که تمام سطح ETL با ماده EIL پوشانده شود، لایه تزریق الکترون بهبود یابد. یک روش برای پوشاندن تمام سطح برای برقراری اتصال سطحی خوب، بکارگیری ساختار تزریق الکترون دولایه است. بجای لایه EIL نازک، ساختار EIL دولایه‌ای - یک لایه با EIL و یک لایه با ترکیبی از ETL و EIL - می‌تواند بیشترین سطح ETL را پوشانده و عملکرد نمونه را از نظر درخشندگی و طول عمر بهبود دهد.



شکل ۱. ساختار ۴ نمونه OLED با لایه‌های تزریق الکترون مختلف [۲]

در این مقاله می‌خواهیم لایه تزریق الکترون را به عنوان یکی از مهمترین و شاخص‌ترین لایه‌های موجود در ساختار OLED مورد مطالعه و بررسی قرار دهیم. بدین منظور ابتدا مطالعات جامعی بر روی ساختار OLED، مکانیزم عمل، عوامل موثر بر راندمان و معادلات ریاضی حاکم بر نمونه انجام شده است. سپس با بررسی دقیق‌تر و جامع‌تر لایه تزریق الکترون، موادی که از عملکرد قابل قبولی برخوردار می‌باشند، شناسایی و در ساختار یک OLED پلیمری بکار گرفته شدند. در ادامه با انجام شبیه‌سازی در نرم‌افزار اتلس سیلوآکو، تاثیر این مواد در ساختار نمونه ارزیابی گردیده و نتایج حاصل شده بیان گردیده است. شایان ذکر است که در طول انجام شبیه‌سازی، نوع مواد بکار رفته در آند، کاتد، لایه تزریق حفره و لایه گسیل نور، ثابت در نظر گرفته شده است.

مطالعات نظری

اجزای تشکیل‌دهنده OLED

طرح چینش کلی OLED در شکل ۲ نشان داده شده است [۱۲]. در این شکل، ساختار OLED متشکل از کاتد / لایه انتقال الکترون / لایه گسیل نور / لایه انتقال حفره / آند می‌باشد. مطابق

گردد تا بتوان به ولتاژ تحریک پایین و راندمان درخشندگی بالا دست یافت.

به منظور بهبود تزریق الکترون از کاتد به لایه انتقال الکترون، مطالعات زیادی در خصوص ساختار تزریق الکترون انجام شده است [۳-۸]. جهت دستیابی به تزریق الکترون موثر در پایینترین اربیتال مولکولی اشغال نشده (LUMO)، فلزات با تابع کار پایین مانند Li, Ca, Ba, Mg به عنوان مواد کاتدی جهت پایین آوردن سد انرژی بین کاتد و لایه انتقال الکترون (ETL) مورد نیاز است [۱]. با این حال این فلزات دارای بیشترین آسیب‌پذیری در برابر اکسیژن و رطوبت بوده و با مواد آلی واکنش شیمیایی می‌دهند. فلزاتی نظیر آلومینیوم و نقره به دلیل واکنش‌پذیری پایین برای این کار مناسب هستند، اما راندمان الکترو لومینسانس ضعیفی را ارائه می‌دهند. تحقیق برای مواد کاتدی پایدارتر با خواص تزریق الکترون خوب، به کاتدهای دولایه‌ای منجر می‌شود که در آن، یک لایه عایق بافر بسیار نازک (مانند LiF, CsF, Al₂O₃, MgF₂ یا MgO)، بین این فلزات و ماده آلی قرار داده شده است. ضمناً گزارش شده است که بین فلزات Mg, Ag, Li, Ca و Al، تنها آلومینیوم می‌تواند به عنوان کاتد موثر برای بهبود عملکرد OLED مورد استفاده قرار گیرد [۹]. امروزه کاتد دولایه‌ای LiF/Al متداول است [۱۰-۱۱]. NaSt نیز به تنهایی در OLEDهای مولکول کوچک (SMOLED) مبتنی بر Aluminum-tris(8-hydroxyquinolin) (Alq₃) یا مشتقات نفتالیمید تحت بررسی قرار گرفته است [۱]. مقایسه مستقیم بین SMOLEDهایی که با NaSt یا LiF به عنوان لایه بافر کاتدی ساخته شده‌اند، نشان داد که بکارگیری NaSt دارای همان درخشندگی با پایداری گرمایی بالاتر می‌باشد. برای OLEDهای پلیمری مبتنی بر PH-PPV نیز کاربرد لایه بافر به بهبود عملکرد قابل توجهی (درخشندگی بالای ۱۵۰۰۰ cd/m²) منتهی می‌شود. ضمناً فرآوری ساده، سازگاری با محیط زیست (غیرسمی بودن) و عدم نیاز به شرایط محیطی سخت‌گیرانه و پیچیده، از جمله دلایلی است که کاتد دولایه‌ای LiF/Al را به عنوان جایگزینی مناسب برای کاتد LiF/Al معرفی می‌نماید. وارد کردن یک لایه تزریق الکترون (EIL) نازک بین ETL و کاتد با استفاده از ترکیباتی نظیر CaF₂, CsF و NaF و اکسیدهای فلزی آلكالین نظیر Li₂O, K₂O و Cs₂O (به عنوان لایه میان‌لایه‌ای نازک بین Alq₃ و Al) باعث بهبود تزریق الکترون شده‌اند [۲]. استفاده از 8 quinolinolato lithium (Liq) به عنوان میان‌لایه‌ای نازک، تزریق الکترون بالا از Al به Alq₃ و پایداری فرایند را فراهم می‌کند (شکل ۱). همچنین OLED

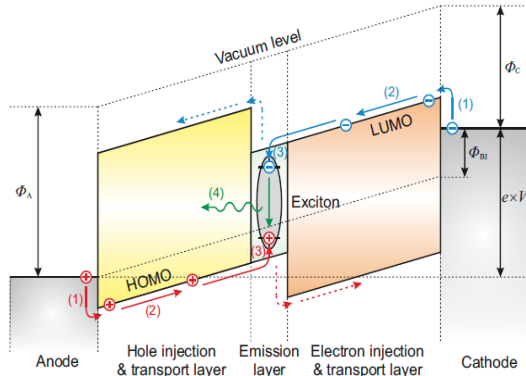
Electron Injection Layer ^o

Lowest Unoccupied Molecular Orbital ¹

Electron Transport Layer ²

Small Molecule OLED ³

- تزریق الکترون‌ها و حفره‌ها از الکترودها
- انتقال حامل‌های بار از میان لایه‌های آلی
- تشکیل زوج الکترون - حفره مقید (اکسایتون)
- بازترکیب تابشی اکسایتون و گسیل نور



شکل ۳. شماتیکی از دیگرام انرژی OLED سه‌لایه‌ای [۱۲]

تحلیل جامع راندمان OLED

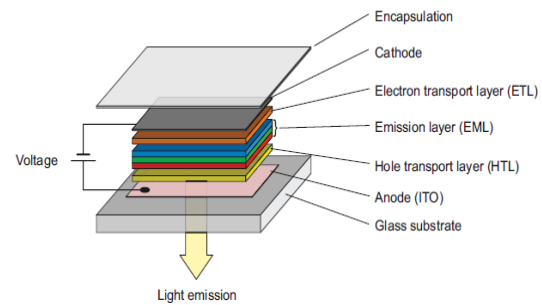
جدا از مشخصات طیفی OLED، مهم‌ترین پارامتر مشخص‌کننده یک OLED، بازده کوانتومی الکترومولومینسانس خارجی (EQE) است که نسبت بین تعداد فوتون‌های گسیل شده و حامل‌های بار تزریق شده را بیان می‌کند [۱۳]:

$$\eta_{EQE} = \gamma \eta_{ST} q_{eff} \eta_{out} \quad (1)$$

در این رابطه، γ ضریب تعادل حامل بار است که تشریح می‌کند که آیا مقدار مساوی الکترون‌ها و حفره‌ها تزریق شده‌اند یا خیر و چه کسری از آنها تشکیل اکسایتون می‌دهند. ضریب η_{ST} کسری از اکسایتون‌ها را که مجاز به بازترکیب تابشی طبق قضیه اسپین-آمار است بیان می‌کند. ضریب q_{eff} بیان می‌کند که چه تعداد اکسایتون‌های مجاز از نظر اسپین، واقعاً از طریق گسیل یک فوتون (بجای از دست دادن انرژی برانگیخته بطور غیر تابشی به محیط‌شان) از بین می‌روند. در نهایت ضریب η_{out} تعیین می‌کند که چه بخشی از فوتون‌های تولیدشده که در انتها هستند قادر به ترک نمونه به بیرون می‌باشند. از اینرو بازده کوانتومی خارجی می‌تواند از ضرب بازده کوانتومی داخلی $\eta_{IQE} = \gamma \eta_{ST} q_{eff}$ در ضریب خروجی η_{out} بدست آید.

در یک مدل ساده بر مبنای اپتیک پرتو، بازده خروجی نور از طریق رابطه زیر بیان می‌شود [۱۴]:

شکل ۲، لایه گسیل (EML) دارای یک یا چند گسیل‌کننده نور رنگی در نواحی مختلف طیف مرئی است. شایان ذکر است که افزودن لایه‌های اضافی نظیر لایه‌های تزریق الکترون و حفره و لایه‌های انسداد الکترون و حفره در ساختار OLED، یکی از راهکارهایی است که به منظور افزایش راندمان OLED مورد استفاده قرار می‌گیرد.



شکل ۲. طرح چینش OLED [۱۲]

معمولاً آند از اکسید ایندیوم قلع (ITO) ساخته می‌شود که بسیار شفاف است و هدایت‌پذیری الکتریکی خوبی دارد. بطور کلی مواد مورد استفاده به عنوان آند نیاز به تابع کار بالا دارند که فلزاتی نظیر طلا یک انتخاب مناسب است. برای کاتد فلزات با تابع کار پایین نظیر کلسیم یا منیزیم اغلب در ترکیب با فلزات بازتابنده بالا و واکنش‌پذیری پایین نظیر آلومینیوم یا نقره مورد استفاده قرار می‌گیرد. به منظور رسیدن به ارتفاع سد تزریق موثر برای حفره‌ها و الکترون‌ها، تابع کار آند باید با بالاترین اربیتال مولکولی اشغال شده (HOMO) و تابع کار کاتد باید با LUMO نیمه‌هادی آلی تطابق داشته باشد [۱].

نحوه تولید نور توسط OLED

برخلاف منابع نوری متداول که جریان از یک سیم یا گاز عبور می‌کند، جریان شارش یافته در OLED، از طریق لایه‌هایی از مواد آلی هدایت می‌شود [۱۲]. با اعمال یک منبع ولتاژ خارجی در حد چند ولت به نمونه، الکترون‌ها از کاتد و حفره‌ها از آند تزریق و به سمت یکدیگر رانده می‌شوند و در لایه EML به یکدیگر می‌رسند. هنگامی که الکترون‌ها در LUMO و حفره‌ها در HOMO از نظر مکانی به یکدیگر می‌رسند، زوج الکترون - حفره مقیدی (اکسایتون) را در EML تشکیل می‌دهند که ممکن است با بازترکیب تابشی، فوتون گسیل کند. روند کلی نحوه تولید نور توسط یک نمونه OLED که در شکل ۳ نشان داده شده است را می‌توان در ۴ گام زیر خلاصه نمود:

External Quantum Efficiency [^]
Spin Statistics [^]

Emission Layer [^]
Highest Occupied Molecular Orbital [^]

که در آن، n_i چگالی بار ذاتی، Ψ پتانسیل الکترواستاتیک، φ_n و φ_p پتانسیل‌های شبه فرمی برای الکترون‌ها و حفره‌ها، k ثابت بولتزمن و T دما است.

همچنین بر طبق رابطه اینشتین، ضریب نفوذ الکترون‌ها و حفره‌ها از معادله زیر محاسبه می‌شود:

$$D = \mu \frac{kT}{q} \quad (11)$$

به دلیل ساختار بی‌نظم مواد آلی، حامل‌های بار اساساً از طریق پرش بین مولکولی حرکت می‌کنند. بی‌نظمی موقعیت و انرژی، مانع انتقال بار شده و باعث موبیلیتی پایین برای مواد آلی می‌شود. به عنوان نتیجه‌ای از ساختار بی‌نظم، بیشتر مواد آلی دارای موبیلیتی وابسته به میدان الکتریکی هستند. وابستگی موبیلیتی به میدان الکتریکی از طریق معادله Poole-Frenkel تشریح می‌شود:

$$\mu(E) = \mu_0 e^{\gamma\sqrt{E}} \quad (12)$$

که در آن E میدان الکتریکی، μ موبیلیتی حامل بار تحت میدان الکتریکی E ، μ_0 موبیلیتی تحت میدان الکتریکی صفر و γ ضریب Poole-Frenkel وابسته به میدان است. از آنجا که μ_0 و γ هر دو ثابت هستند، موبیلیتی ماده آلی تحت هر میدان الکتریکی داده شده می‌تواند از طریق معادله ۱۲ محاسبه شود.

همچنین برای تشریح نرخ بازترکیب در مواد آلی بی‌نظم معادله ۱۳ (تئوری لانژوین) به کار می‌رود.

$$R = \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_r} (\mu_n + \mu_p) np \quad (13)$$

نرخ بازترکیب در ماده آلی بستگی به این دارد که چقدر سریع الکترون‌ها و حفره‌ها یکدیگر را پیدا کنند. بنابراین موبیلیتی حامل‌های بار نقش مهمی را در فرایند بازترکیب بازی می‌کند.

نفوذ و رانش، حامل‌های بار را در نمونه حرکت می‌دهند و بازترکیب، چگالی حامل‌های بار را کاهش می‌دهد. با ترکیب اینها با یکدیگر، می‌توان تغییر چگالی حامل بار را در طول زمان از طریق معادله پیوستگی زیر محاسبه نمود [۱۶]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} - R \quad (14)$$

در صورتی که در ساختار OLED از لایه بافر استفاده شده باشد، حامل‌ها برای رسیدن به لایه گسیل نور تونل می‌زنند. تزریق حامل از میان لایه بافر با استفاده از مدل تونل‌زنی مستقیم و مدل تونل‌زنی Fowler-Nordheim (FN) توصیف می‌شود که در

$$\eta_{out} = \frac{1}{2n^2} \quad (2)$$

که در آن n ضریب شکست پشته لایه آلی است. با مقادیر $n = 1/6 - 1/8$ فقط بین ۱۵٪ تا ۲۰٪ توان نوری از یک OLED استخراج می‌شود.

معادلات حاکم بر OLED

برای مدل‌سازی صحیح انتقال حامل بار در نمونه‌های OLED، نیاز به محاسبه میدان الکتریکی و توزیع چگالی حامل بار در سراسر کل نمونه است. انتقال بار از طریق مدل نفوذ-رانش مستقل از زمان و یک بعدی شامل معادلات پواسن (معادله ۳) و پیوستگی برای الکترون‌ها و حفره‌ها (معادلات ۴ و ۵) بیان می‌شود [۱۵]. معادله یک بعدی پواسن، توزیع میدان الکتریکی را در سراسر لایه آلی تشریح می‌کند و ولتاژ اعمال شده به کل نمونه، شرط مرزی لازم را فراهم می‌نماید (معادله ۶) [۱۶].

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{q(p-n)}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (3)$$

$$\frac{d}{dx} (+\mu_n n E + D_n \frac{dn}{dx}) = R \quad (4)$$

$$\frac{d}{dx} (-\mu_p p E + D_p \frac{dp}{dx}) = R \quad (5)$$

$$V_{applied} - (E_{cathode} - E_{anode}) = \int_0^L E(x) dx \quad (6)$$

که در آنها، E میدان الکتریکی، q بار الکتریکی، ϵ_0 و ϵ_r ضریب گذردهی خلا و نسبی، n و p چگالی‌های الکترون و حفره، μ_n و μ_p موبیلیتی الکترون و حفره، D_n و D_p ضرایب نفوذ الکترون و حفره، R نرخ بازترکیب، ولتاژ اعمال شده به کل نمونه، $E_{cathode}$ و E_{anode} توابع کاری کاتد و آند و L ضخامت کل لایه آلی است.

چگالی جریان الکترون و حفره با در نظر گرفتن نفوذ و رانش مطابق روابط زیر محاسبه می‌شود:

$$J_n = q(\mu_n n E + D_n \frac{\partial n}{\partial x}) \quad (7)$$

$$J_p = q(\mu_p p E - D_p \frac{\partial p}{\partial x}) \quad (8)$$

چگالی الکترون و حفره نیز طبق معادله ۹ و ۱۰ از تابع توزیع بولتزمن تخمین زده می‌شود:

$$n = n_i \exp\left(\frac{q(\Psi - \varphi_n)}{kT}\right) \quad (9)$$

$$p = n_i \exp\left(\frac{q(\varphi_p - \Psi)}{kT}\right) \quad (10)$$

که در آن، چگالی اکسایتون‌های یکتایی، $g = \frac{1}{4}$ احتمال تشکیل حالت یکتایی ناشی از قضیه اسپین آمار، D_s ضریب نفوذ اکسایتون یکتایی، η_{PL} بازده کوانتومی فوتولومینسانس و τ_s طول عمر اکسایتون است. ضریب نفوذ اکسایتون یکتایی از معادله ۱۷ محاسبه می‌شود:

$$D_s = \frac{L_D^2}{\tau_s} \quad (17)$$

که در آن، L_D طول نفوذ اکسایتون یکتایی است. اولین عبارت در سمت چپ معادله ۱۶، تولید، دومین عبارت، نفوذ و سومین عبارت باز ترکیب اکسایتون‌های یکتایی را بیان می‌کند.

در حالی که دستیابی به کمیت‌های رادیومتری مانند شار تابشی ϕ (توان اپتیکی) و چگالی شار تابشی $M = \frac{d\phi}{dA}$ در نرم‌افزار سیلواکو امکان‌پذیر است، کمیت‌های فوتومتری مانند درخشندگی L توسط نرم‌افزار محاسبه نمی‌گردند. بنابراین به منظور محاسبه میزان درخشندگی از معادله زیر استفاده می‌شود:

$$L = \frac{\eta_{out} K_m K_{SY}}{\pi sr} M \quad (18)$$

که در آن، $K_m = 683 \text{ lm/W}$ ماکزیم حساسیت چشم انسان برای دید فوتوپیک و η_{out} بازده خروجی نور OLED است. K_{SY} نیز از رابطه:

$$K_{SY} = \int_{380nm}^{780nm} \phi_{\lambda,n}(\lambda) A(\lambda) d\lambda \cong 0.35 \quad (19)$$

تعیین می‌شود که در آن، $\phi_{\lambda,n}(\lambda)$ طیف الکترو لومینانس (EL) پلیمر PH-PPV و $A(\lambda)$ حساسیت طیف فوتوپیک چشم انسان است [۱].

بازده خروجی نور OLED برای لایه گسیل با استفاده از معادله ۲ معادل $0.1/18$ بدست می‌آید. بنابراین با استفاده از مقادیر بیان شده در فوق، می‌توان مقدار درخشندگی را از رابطه زیر بدست آورد:

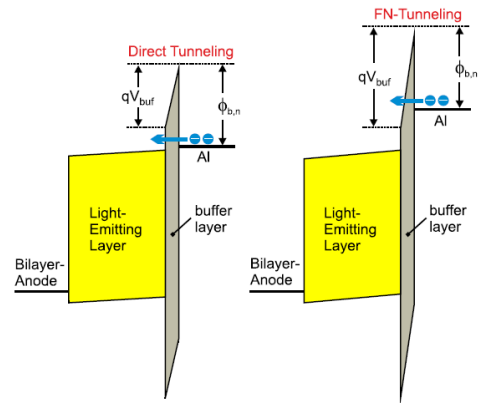
$$L = 13.7M \quad (20)$$

شبیه‌سازی و تجزیه و تحلیل یافته‌ها

ساختار نمونه مورد استفاده در شبیه‌سازی

ساختار نمونه مورد استفاده در شبیه‌سازی، مطابق شکل ۵ به صورت ITO/PEDOT:PSS/PH-PPV/ETL-EIL/Al می‌باشد. لایه گسیل نور از (PH-PPV) poly(para-phenylenevinylene) با ضخامت 80 nm تشکیل شده و برای لایه تزریق الکترون نیز موادی نظیر NaSt، TiO_2 و Al_2O_3 با ضخامت 2 nm مورد استفاده قرار گرفته است. همچنین ضخامت آند و کاتد در

شکل ۴ نشان داده شده است [۱۵]. در بایاس‌های کم ($qV_{buf} < \phi_{b,n}$)، سد انرژی تشکیل شده توسط لایه بافر دوزنقه‌ای است، بنابراین حامل‌ها از میان کل سد انرژی تونل می‌زنند (تونل‌زنی مستقیم). در بایاس‌های بالاتر ($qV_{buf} > \phi_{b,n}$)، سد انرژی مثلثی شکل است، بنابراین حامل‌ها فقط از بخشی از سد تونل می‌زنند (تونل‌زنی FN).



شکل ۴. شماتیکی از تراز انرژی نمونه OLED در دو حالت: مدل تونل‌زنی مستقیم (سمت چپ) و مدل تونل‌زنی FN (سمت راست) [۱۵]

جریان تونل‌زنی در مدل تونل‌زنی FN از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$J_T = AE_{buf}^2 \exp\left(\frac{-B}{E_{buf}}\right) \quad (15)$$

که در آن، E_{buf} میدان الکتریکی در لایه بافر است و پارامترهای A و B به ارتفاع سد انرژی، بار و جرم موثر حامل‌های بار بستگی دارند.

معادلات بالا برای شبیه‌سازی چگالی جریان بر اساس مشخصه‌های ولتاژ و توزیع باز ترکیب در OLED کافی هستند. حامل‌های بار در نمونه، توزیع میدان الکتریکی را تعیین می‌کنند و میدان الکتریکی توزیع حامل بار را اصلاح خواهد کرد. برهمکنش بین حامل‌های بار و میدان الکتریکی، یک موضوع کلیدی در OLED است [۱۶].

با توجه به اینکه حالت مقید زوج الکترون و حفره، تحت عنوان اکسایتون (یکتایی یا سه‌تایی) شناخته می‌شود، برای محاسبه گسیل نور لازم است که تنها اکسایتون‌های یکتایی مورد بررسی قرار گیرند، زیرا اکسایتون‌های سه‌تایی بطور غیرتابشی باز ترکیب می‌شوند [۱۵]. معادله پیوستگی یک بعدی برای اکسایتون‌های یکتایی از رابطه زیر تعیین می‌شود:

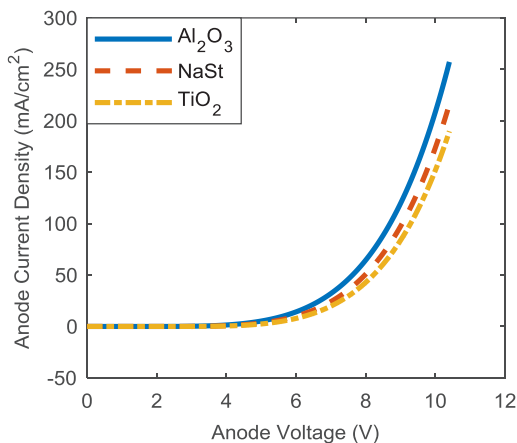
$$gR + D_s \frac{d^2 S(x)}{dx^2} - \frac{\eta_{PL}}{\tau_s} S(x) = 0 \quad (16)$$

که در آن، ϵ_r ضریب گذردهی نسبی، N_V و N_C چگالی حالت‌های باند هدایت و ظرفیت، E_g گاف انرژی، χ_c الکترون خواهی، $\mu_{0,p}$ و $\mu_{0,n}$ موبیلیتی الکترون و حفره در میدان صفر، $E_{0,p}$ و $E_{0,n}$ مشخصه برای الکترون و حفره، η_{PL} بازده کوانتومی فوتولومینسانس، τ_s و L_D طول عمر و طول نفوذ اکسایتون‌های یکتایی، n ضریب شکست و ϕ تابع کار می‌باشند. لازم به ذکر است که محاسبه توان نوری در طول موج 565nm انجام شده است.

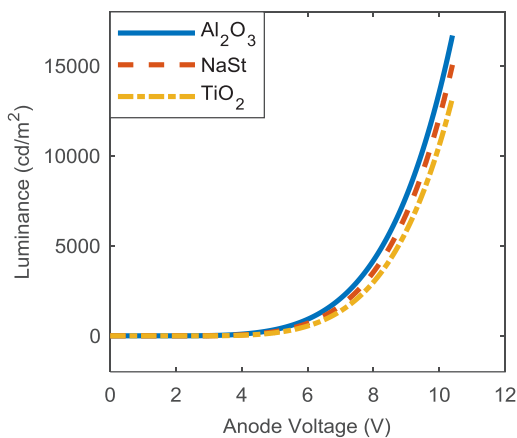
در ادامه، با انجام شبیه‌سازی با نرم‌افزار اتلس سیلواکو، عملکرد لایه تزریق الکترون و پارامترهای تاثیرگذار بر روی عملکرد نمونه OLED، مورد بررسی و تجزیه و تحلیل قرار گرفته و نتایج حاصل شده با یکدیگر مقایسه شده است.

نتایج شبیه‌سازی با نرم‌افزار سیلواکو

نمودار چگالی جریان و درخشندگی برحسب ولتاژ در نمودارهای ۱ و ۲ نشان داده شده است.

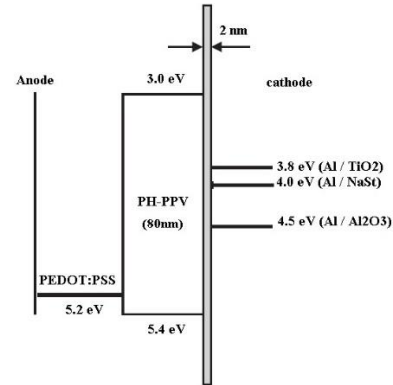


نمودار ۱. چگالی جریان بر حسب ولتاژ برای نمونه‌های تحت بررسی



نمودار ۲. درخشندگی بر حسب ولتاژ برای نمونه‌های تحت بررسی

شبیه‌سازی، 100nm در نظر گرفته شده است. شایان ذکر است که بجز لایه عایق NaSt، استفاده از دو ماده Al₂O₃ و TiO₂ در OLED با لایه گسیل PH-PPV، در هیچ مطالعه‌ای بررسی نگردیده است.

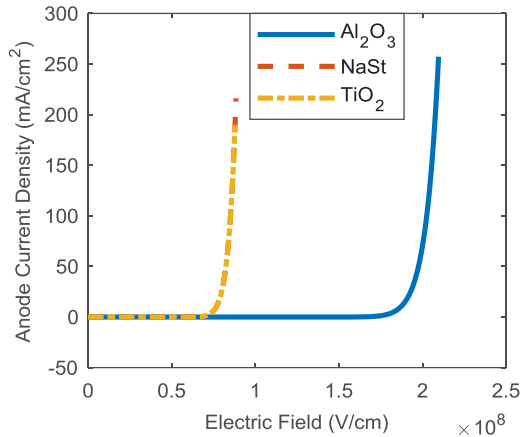


شکل ۵. تراز انرژی نمونه OLED مورد استفاده در شبیه‌سازی

پارامترهای مواد بکار رفته در شبیه‌سازی، در جدول ۱ درج گردیده‌اند:

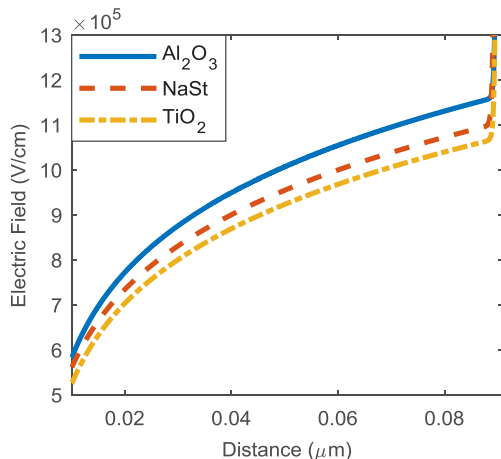
جدول ۱. پارامترهای ورودی برای شبیه‌سازی

نوع ماده	نام پارامتر	واحد	مقدار
PH-PPV	ϵ_r	-	۳ [۱]
	N_C	cm ⁻³	1×10^{21} [۱]
	N_V	cm ⁻³	1×10^{21} [۱]
	E_g	eV	۳/۰ [۱]
	χ_c	eV	۳ [۱]
	$\mu_{0,p}$	Cm ² /Vs	1×10^{-7} [۱]
	$E_{0,p}$	V/cm	۳۵,۰۰۰ [۱]
	$\mu_{0,n}$	Cm ² /Vs	1×10^{-11} [۱]
	$E_{0,n}$	V/cm	۷,۰۰۰ [۱]
	η_{PL}	-	۰/۲۲ [۱]
	τ_s	ns	۰/۴ [۱]
	L_D	nm	۴ [۱]
	n	-	۱/۶۵ [۱]
PEDOT:PSS	ϕ	eV	۵/۲ [۱]
ITO	n	-	۱/۸۳ [۱]
NaSt	ϵ_r	-	۳ [۱]
Al/NaSt	ϕ	eV	۴ [۱]
Al ₂ O ₃	ϵ_r	-	۹/۳ [۱۷]
Al/Al ₂ O ₃	ϕ	eV	۴/۵ [۱۷]
TiO ₂	ϵ_r	-	۱۲/۳ [۱۸]
Al/TiO ₂	ϕ	eV	۳/۸ [۱۸]
FN tunneling parameters	A	A/V ²	2×10^{-7} [۱]
	B	V/cm	$1/6 \times 10^8$ [۱]



نمودار ۳. چگالی جریان برحسب میدان الکتریکی برای نمونه‌های تحت بررسی

نمودار ۴ توزیع میدان الکتریکی را در طول لایه گسیل PH-PPV نمایش می‌دهد. همانطور که در توضیح نمودارهای ۱ و ۲ اشاره شد، در فصل مشترک PH-PPV/ Al ساختار Al_2O_3 حضور تعداد زیاد الکترون‌ها در بخش کاتد در کنار تجمع حفره‌ها در بخش لایه گسیل، میدان فضایی قوی را ایجاد می‌نماید.



نمودار ۴. میدان الکتریکی برحسب موقعیت مکانی برای نمونه‌های تحت بررسی

نرخ باز ترکیب لانژوین در نمودار ۵ نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که نرخ باز ترکیب لانژوین در ساختار با لایه NaSt بیشتر از Al_2O_3 و سپس TiO_2 است. دلیل این موضوع از روی معادله ۱۳ (رابطه معکوس بین نرخ باز ترکیب لانژوین و ضریب گذردهی نسبی) قابل پیش‌بینی است. ضمناً بیشینه باز ترکیب در نمونه با ساختار Al_2O_3 در فاصله کمتری از مرکز لایه گسیل قرار دارد و به آند نزدیک‌تر است. با توجه به این که گسیل نور از سمت آند صورت می‌گیرد، نمونه Al_2O_3 از این حیث نیز عملکرد بهتری داشته است.

مشاهده می‌شود که چگالی جریان و درخشندگی نمونه با لایه بافر Al_2O_3 به ازای اعمال ولتاژ یکسان، از دو نمونه دیگر بیشتر است. از طرفی این نمونه به ولتاژ تحریک^{۱۱} و ولتاژ کاری^{۱۲} کمتری نیاز دارد که مطلوب‌تر می‌باشد.

همانطور که از داده‌های جدول ۱ مشخص است، لایه گسیل نور PH-PPV دارای موبیلیتی حفره بالاتری نسبت به موبیلیتی الکترون می‌باشد. بنابراین حفره‌ها تحت تاثیر میدان الکتریکی خارجی، به سرعت از فیلم نازک عبور کرده و توسط لایه تزریق الکترون مسدود می‌شوند. از طرفی، با توجه به تابع کار سه لایه تزریق الکترون - Al_2O_3 ($4/5eV$)، NaSt ($4eV$) و TiO_2 ($3/7eV$) - و الکترون‌خواهی PH-PPV ($3eV$)، تزریق الکترون‌ها از Al_2O_3 به PH-PPV نمی‌تواند به راحتی انجام پذیرد. بنابراین در فصل مشترک PH-PPV/ Al نمونه با ساختار Al_2O_3 حضور تعداد زیاد الکترون‌ها در بخش کاتد در کنار تجمع حفره‌ها در بخش لایه گسیل، میدان فضایی قوی را ایجاد می‌نماید [۱۹]. این میدان فضایی، تزریق الکترون‌ها از سد پتانسیل Al_2O_3 به لایه گسیل نور PH-PPV را به ازای اعمال ولتاژ تحریک کوچک‌تری میسر می‌کند. لذا در نمودارهای ۱ و ۲ به ازای اعمال ولتاژ یکسان، چگالی جریان و درخشندگی نمونه با ساختار Al_2O_3 بیشتر از دو نمونه دیگر است. میدان الکتریکی بالا در نمونه Al_2O_3 را می‌توان به ولتاژ توکار (V_{bi}) بزرگتر در این نمونه نیز نسبت داد. تابع کار بزرگتر Al_2O_3 نسبت به NaSt و TiO_2 ، باعث ایجاد V_{bi} بزرگتر در ساختار OLED با لایه بافر Al_2O_3 می‌گردد. لذا با اعمال ولتاژ یکسان به آند و با در نظر گرفتن رابطه زیر:

$$q(V_{bi} - V_{applied}) \propto E \quad (21)$$

مشاهده می‌شود که سهم ($V_{bi} - V_{applied}$) بزرگتر در ساختار با لایه بافر Al_2O_3 ، عامل اصلی میدان الکتریکی بالا در این نمونه نسبت به دو نمونه دیگر است. این موضوع در نمودار ۳ که چگالی جریان را برحسب میدان الکتریکی نشان می‌دهد، کاملاً مشهود است. در حالی که در نمودار ۳ برای چگالی جریان یکسان، اختلاف قابل ملاحظه‌ای در میدان الکتریکی نمونه با ساختار NaSt و TiO_2 وجود ندارد، میدان الکتریکی نمونه با ساختار Al_2O_3 حدود ۲/۴ برابر بیشتر از دو نمونه دیگر است.

^{۱۲} ولتاژ لازم برای رسیدن به درخشندگی 100 cd/m^2

^{۱۱} ولتاژ لازم برای رسیدن به درخشندگی 1 cd/m^2

براساس داده‌های مندرج در جدول ۲، مشاهده می‌گردد که بازده خروجی در نمونه TiO_2 بیشتر از دو ساختار دیگر است. علت این موضوع آن است که TiO_2 نیمه هادی نوع n بوده که قادر است حفره‌های وارده را در مقایسه با دو ساختار دیگر، با قدرت بیشتری مسدود نماید. انسداد حفره‌ها در فصل مشترک کاتد / لایه گسیل، باعث افزایش بازترکیب الکترون‌ها و حفره‌ها در لایه گسیل نور می‌گردد. به دنبال آن، بازترکیب تابشی نیز بیشتر می‌شود که راندمان خروجی را افزایش می‌دهد. راندمان خروجی پایین در نمونه با ساختار Al_2O_3 می‌تواند به دو دلیل رخ دهد: انسداد ناکافی حفره‌ها توسط لایه تزریق الکترون و میدان الکتریکی بالا. میدان الکتریکی بالا باعث غلبه بر انرژی پیوندی اکسایتون شده و با از بین رفتن اکسایتون، منجر به شکل‌گیری حامل‌های بار (الکترون و حفره) غیرمفید می‌گردد.

همانطور که قبلاً اشاره گردید، تنها لایه تزریق الکترون NaSt در ساختار یک OLED با لایه گسیل PH-PPV مورد تحقیق و بررسی قرار گرفته است [۱] و دو ماده Al_2O_3 و TiO_2 در چنین ساختاری، در هیچ مطالعه‌ای بررسی نشده‌اند. لذا در جدول ۳، نتایج شبیه سازی انجام شده برای این دو نمونه با نتایج عملی نمونه با لایه تزریق الکترون NaSt مقایسه گردیده است.

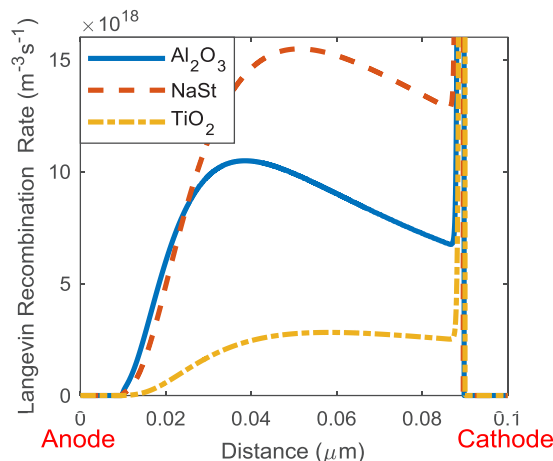
جدول ۳: مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی OLED برای دو ساختار با لایه تزریق الکترون Al_2O_3 و TiO_2 با تحقیق انجام شده در [۱] با لایه تزریق الکترون NaSt

Al_2O_3 (نتایج شبیه‌سازی)	TiO_2 (نتایج شبیه‌سازی)	NaSt [۱]	شرح
۹۲۰۰	۶۹۰۰	۸۰۰۰	درخشندگی در چگالی جریان $100 (mA/cm^2)$ (cd/m^2)
۹/۲	۶/۹	۸	راندمان جریان (cd/A)
۱۶۰۰۰	۱۲۰۰۰	۱۵۰۰۰	درخشندگی در ولتاژ $10/3$ ولت (cd/m^2)

ملاحظه می‌شود که نمونه با ساختار Al_2O_3 در مقایسه با دو نمونه دیگر عملکرد بهتری را از خود نشان داده است.

نتیجه‌گیری

در این مقاله یک ساختار OLED با استفاده از لایه گسیل نور PH-PPV به ازای بکارگیری ۳ ماده مختلف در لایه تزریق



نمودار ۵: نرخ بازترکیب لانژوین برای نمونه‌های تحت بررسی

به منظور امکان بررسی دقیق‌تر عملکرد نمونه‌ها، نتایج حاصل از شبیه‌سازی در جدول ۲ درج گردیده است.

جدول ۲: نتایج حاصل از شبیه‌سازی

Al_2O_3	TiO_2	NaSt	شرح
۲۱۰	۱۵۲	۱۷۴	چگالی جریان در ولتاژ ۱۰ ولت (mA/cm^2)
$2/0.8 \times 10^{-8}$	$1/69 \times 10^{-7}$	$1/75 \times 10^{-7}$	میدان الکتریکی در چگالی جریان ردیف بالا (V/cm)
۱۳۵۵۰	۱۰۶۵۰	۱۲۱۳۰	درخشندگی در ولتاژ ۱۰ ولت (cd/m^2)
۶/۴۵	۷/۰۱	۶/۹۷	راندمان جریان* (cd/A)
۲/۳	۲/۹	۲/۷۳	ولتاژ تحریک (V)
۴/۰۵	۴/۶	۴/۴	ولتاژ کاری (V)
$3/46 \times 10^{12}$	$2/74 \times 10^{12}$	$3/13 \times 10^{12}$	نرخ بازترکیب تابشی** ($1/s.\mu m$)
$13/59 \times 10^{12}$	$1/14 \times 10^{12}$	$9/98 \times 10^{12}$	نرخ بازترکیب کل** ($1/s.\mu m$)
۲۵/۴۶	۳۳/۷۴	۳۱/۳۶	راندمان خروجی*** (%)
$1/0.5 \times 10^{19}$	$2/82 \times 10^{18}$	$1/55 \times 10^{19}$	حداکثر نرخ بازترکیب لانژوین و فاصله آن ($1/s.m^3$) نسبت به آند
در ۳۵ نانومتری	در ۵۸ نانومتری	در ۵۱ نانومتری	

* چگالی جریان / درخشندگی = راندمان جریان

** نرخ بازترکیب تابشی و نرخ بازترکیب کل توسط نرم‌افزار محاسبه گردیده است.

*** نرخ بازترکیب کل / نرخ بازترکیب تابشی = راندمان خروجی

- Emitting Units by Solution - Based Processes,” *Adv. Mater.*, vol. 27, no. 8, pp. 1327-1332, 2015
8. Y. Zhou et al., “A Universal Method to Produce Low Work Function Electrodes for Organic Electronics,” *Science*, vol. 336, no. 6079, pp. 327-332, 2012
 9. X. J. Wang et al., “Enhancement of Electron Injection in Organic Light Emitting Devices Using an Ag/LiF Cathode,” *J. Appl. Phys.*, vol. 95, no. 7, pp. 3828-3830, 2004
 10. S.Y. Park, C.H. Lee, W.J. Song, C. Seoul, “Enhanced electron injection in organic light-emitting devices using Al/LiF electrodes,” *Curr. Appl. Phys.*, no. 1, pp. 116-120, 2001
 11. L. S. Hung, C. W. Tang, and M. G. Mason, “Enhanced electron injection in organic electroluminescence devices using an Al/LiF electrode,” *Appl. Phys. Lett.*, no. 70, pp. 152-154, 1997
 12. W. Brutting, J. Frischeisen, T. D. Schmidt, B. J. Scholz and C. Mayr, “Device Efficiency of Organic Light Emitting Diodes: Progress by Improved Light Outcoupling,” *Phys. Status Solidi A*, vol. 210, no. 1, pp. 44-65, 2013
 13. T. Tsutsui, E. Aminaka, C. P. Lin, and D. U. Kim, “Extended molecular design concept of molecular materials for electroluminescence: sublimed-dye films, molecularly doped polymers and polymers with chromophores”, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, no. 355, pp. 801-814, 1997
 14. N. C. Greenham, R. H. Friend, and D. D. C. Bradley, “Angular Dependence of the Emission from a Conjugated Polymer Light-Emitting Diode: Implications for efficiency calculations,” *Adv. Mater.*, vol. 6, no. 6, 1994
 15. H. Siemund, and H. Gobel, “Numerical Simulation of Organic light-emitting diodes with Insulating cathode buffer layer,” *IEEE Trans. on Electron Dev.*, vol. 63, no.9, pp. 3700-3706, 2016
 16. H. Wang, “Simulation of Organic Light-Emitting Diodes and Organic Photovoltaic Devices,” University of Rochester, PhD thesis, 2012
 17. Atlas User’s Manual
 18. T. Chiba, Y. Jin Pu, and J. Kido, “Solution – Processable Electron Injection Materials for Organic Light-Emitting Devices,” *Journal of Materials Chemistry C*, 2015
 19. H. J. Bolink et al., “Inverted Solution Processable OLEDs Using a Metal Oxide as an Electron Injection Contact,” *Adv. Funct. Mater.*, no. 18, pp. 145-150, 2008

الکترون شامل Al_2O_3 ، NaSt و TiO_2 در نرم‌افزار سیلوآکو شبیه‌سازی گردید. قابل ذکر است که بجز لایه عایق NaSt استفاده از دو ماده Al_2O_3 و TiO_2 در OLED با لایه گسیل PH-PPV در هیچ مطالعه‌ای بررسی نگردیده است. نتایج حاصل شده، بیانگر بالا بودن چگالی جریان و درخشندگی همراه با ولتاژ تحریک و کاری پایین در ساختار با لایه بافر Al_2O_3 بوده است. با توجه به تابع کار سه لایه تزریق الکترون Al_2O_3 ، NaSt و TiO_2 و الکترون‌خواهی PH-PPV، تزریق الکترون‌ها از Al_2O_3 به PH-PPV نمی‌تواند به راحتی انجام پذیرد. بنابراین در فصل مشترک PH-PPV/ Al Al_2O_3 حضور تعداد زیاد الکترون‌ها در بخش کاتد در کنار تجمع حفره‌ها در بخش لایه گسیل، میدان فضایی قوی را ایجاد می‌کند. علاوه بر این، بیشینه بازترکیب در نمونه با ساختار Al_2O_3 در فاصله کمتری از مرکز لایه گسیل قرار دارد و به آند نزدیک‌تر است. با این وجود، بالاترین راندمان خروجی مربوط به نمونه TiO_2 است که به دلیل افزایش میزان بازترکیب تابشی نسبت به سایر مکانیزم‌های بازترکیب، ناشی از انسداد بیشتر حفره‌ها در فصل مشترک کاتد / لایه گسیل نور می‌باشد.

مراجع

1. H. Siemund, F. Brocker, and H. Gobel, “Enhancing the electron injection in polymer light-emitting diodes using a sodium stearate / aluminum bilayer cathode,” *Organic Electron.*, vol. 14, no.1, pp. 335-343, 2013
2. J. H. Kwon and J. Y. Lee, “High efficiency and long lifetime in organic light-emitting diodes using bilayer electron injection structure,” *Synthetic Metals*, no. 13, pp. 1292-1294, 2009
3. S. Ho, S. Liu, Y. Chen and F. So, “Review of Recent Progress in Multi-Layer Solution – Processed Organic Light Emitting Diodes,” *J. of Photonics for Energy*, vol. 5, pp. 057611-1-057611-17, 2015
4. T. Earmme and S. A. Jenekhe, “High Performance Multilayered Phosphorescent OLEDs by Solution-Processed Commercial Electron Transport Materials,” *J. Mater. Chem.*, no. 22, pp. 4660-4668, 2012
5. W. Jiang et al., “Alcohol Soluble Electron Transport Small Molecule for Fully Solution-Processed Multilayer White Electrophosphorescent Devices,” *Org. Lett.*, vol. 16, no. 4, pp. 1140-1143, 2014
6. T. Ye et al., “Efficient Phosphorescent Polymer Yellow Light Emitting Diodes Based on Solution-Processed Small Molecular Electron Transporting Layer,” *ACS Appl. Mater. Interfaces*, vol. 3, no. 2, pp. 410-416, 2011
7. Y. J. Pu et al., “Fabrication of Organic Light Emitting Devices Comprising Stacked Light