

两种谐振腔长度的微腔有机电致发光器件模拟

张春玉^{1,2}, 陆景彬^{2*}, 王成³, 王洪杰¹

- 1. 吉林建筑工程学院材料科学与工程学院, 吉林 长春 130118
- 2. 吉林大学物理学院, 吉林 长春 130021
- 3. 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 吉林 长春 130033

摘要 微腔的谐振腔长度直接影响微腔有机电致发光器件(MOLED)的发光特性, 根据微腔器件的相关计算公式运用传输矩阵法, 分别对微腔长度 $L=\lambda/2$ 和 $L=\lambda$ (λ : 中心波长) 时, 在微腔内不同位置激子复合发光的电致发光谱(EL)进行模拟计算和比较。发现: 微腔长度为 $L=\lambda/2$ 时, 峰值均为 520 nm, 半峰全宽均为 17 nm, 激子处在微腔的中心位置时, 峰值强度和积分强度均为最大。 $L=\lambda$ 时, 激子在腔内不同位置时, 峰值均为 520 nm, 半峰全宽均 12 nm, 在腔的中心区域时, 与 $L=\lambda/2$ 时正好相反, 峰值强度和积分强度最小。分析后判断是因为两种长度的微腔内电场强度分布不同, 激子位于腔内电场的最大值处发光性能最好。说明要制作出高效率的 MOLED, 要区别不同谐振腔长度, 并使激子处于腔内电场最大处。

关键词 有机电致发光器件; 光学微腔; 谐振腔长度; 模拟计算

中图分类号: TN383.1; O482.3 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2011)01-0047-04

引言

近年来, 有机电致发光器件(OLED)的研究引起了人们广泛的兴趣, 这些工作主要集中在研发及选用高效发光材料, 染料掺杂^[1-6], 选择合适的器件结构^[7]和选用电极材料等方面^[8, 9]。光学微腔是指具有高品质因子而尺寸至少有一维小至与谐振光波长相比拟的光学微型谐振腔。平面微腔(或称 Fabry-Perot 微腔)是目前最常用的光学微腔。它的结构就是由两个反射镜及其间所夹的工作物质所组成。把微腔结构引入到 OLED 中, 可以利用微腔效应来提高器件的色纯度和发光效率^[10-13], 但与实验方面的进展相比而言, 对微腔有机电致发光的各种基本理论过程的理解仍然是不够充分的, 微腔器件的发光模式直接与腔的结构相关, 因此, 要制作出高效率的微腔有机电致发光器件(MOLED), 深入开展理论研究, 进行器件的结构合理化及优化设计是十分必要的。

本文从微腔的原理出发, 根据 MOLED 的计算公式运用传输矩阵法对微腔器件进行模拟计算, 并比较两种谐振腔长度情况下(微腔内光学厚度 $L=\frac{\lambda}{2}$ 和 $L=\lambda$) 的 MOLED 的电

致发光(EL)谱的各项发光性能。

1 计算公式

平面光学微腔即 Fabry-Perot(F-P)谐振腔。由长度为光波长量级的两个平行平面反射镜组成。

常用的微腔的反射镜有两种, 金属反射镜和分布式布拉格反射镜(DBR)。DBR 由 $(\lambda/4)$ 的光学厚度的交替生长的高低折射率介质材料形成。DBR 优点: 可以选择高反射波长、控制反射率、小的吸收损耗, 所以常作微腔器件的一个反射镜。

图 1 是内含辐射源的微腔有机发光器件的 Fabry-Perot 腔结构示意图。图中, E_0 表示自由空间电场强度, E_2 表示耦合输出波的电场强度, M_1 是反射率为 R_1 的背部反射镜, 一般来讲, 是金属反射镜。 $\sqrt{R_1}e^{i\varphi_1}$ 是 M_1 的综合反射系数; M_2 是反射率、透射率和吸收率分别为 R_2, T_2, A_2 的出射镜, 它是半反射镜, 可以由薄的金属膜制成或者由 DBR 制成, $\sqrt{R_2}e^{i\varphi_2}$ 是 M_2 的综合反射系数。 L_1 是源(即激子)到 M_1 镜的距离; L_2 是源到 M_2 距离。 L 是整个腔内的光学长度, $L=L_1+L_2$, 发射光谱随波长 λ 分布的与自由空间发射相比的发射增强系数 $|G_{\text{em}}(\lambda)|$ (在器件法线方向上)由下式得

收稿日期: 2010-05-19, 修订日期: 2010-09-29

基金项目: 国家自然科学基金项目(10174077, 60376029)资助

作者简介: 张春玉, 女, 1968年生, 吉林建筑工程学院材料学院讲师

e-mail: zhangccy68@163.com

* 通讯联系人 e-mail: ljbj@jlu.edu.cn

到^[10, 14, 15]

$$G_{\text{cav}}(\lambda) = \frac{|E_2|^2}{|E_0|^2} \times \frac{\tau_{\text{cav}}}{\tau_0} = \left[1 - \frac{4\sqrt{R_1} \sin^2\left(\frac{\varphi_1 - 2kL_1}{2}\right)}{(1 + \sqrt{R_1})^2} \right] \times \left[\frac{T_2(1 + \sqrt{R_1})^2}{(1 - \sqrt{R_1}R_2)^2 + 4\sqrt{R_1}R_2 \sin^2\left(\frac{\varphi_1 + \varphi_2 - 2kL}{2}\right)} \right] \frac{\tau_{\text{cav}}}{\tau_0} \quad (1)$$

式中, k 是有机层的波矢量, 与波长的关系为 $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, τ_{cav} 和 τ_0 分别是腔中和自由空间中的分子激发态寿命。为简化分析, 首先假定 $\frac{\tau_{\text{cav}}}{\tau_0} = 1$ 。 φ_2 和 φ_1 分别为两反射镜的反射相移。

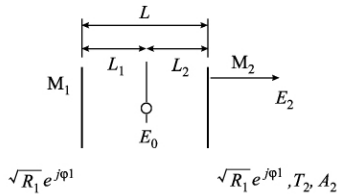


Fig. 1 Schematic diagram showing the structure and characteristics of a microcavity device

理论上垂直表面的有机微腔器件的发射光谱可以通过下面的方程计算近似而得

$$I_{\text{cav}}(\lambda) = G_{\text{cav}}(\lambda) \times I_n(\lambda) \quad (2)$$

式中 $I_n(\lambda)$ 为发光材料在自由空间的发射光谱分布。

微腔器件从腔的一个侧面(半反射镜)发出光子数可以通过对其发射光谱的所有波长进行积分比较而得到

$$\int I_{\text{cav}}(\lambda) d\lambda \quad (3)$$

现以一个典型的 DBR 半反射镜 M_2 和一个金属全反射镜 M_1 构成的 F-P 平面微腔结构的有机电致发光器件的设计为例说明。金属电极和 DBR 是 F-P 腔的两个反射镜, 它们之间形成微型的谐振腔, 光从玻璃基板即 DBR 一侧发出。

微腔的发光在谐振模式(波长)处因相长干涉而得到加强。即有机微腔的谐振模式满足 Fabry-Perot 方程

$$(\varphi_1 + \varphi_2) - \frac{4\pi}{\lambda} \sum_i n_i d_i \cos\left[\arcsin\left(\frac{\sin\theta}{n_i}\right)\right] = 2m\pi \quad (4)$$

其中 φ_2 和 φ_1 分别为 DBR 和金属反射镜的反射相移, λ 是谐振波长, n_i 和 d_i 为腔内各层薄膜的折射率和厚度, 总和即 L 是整个腔内的光学长度, θ 是外部探测角, m 是模式级数, 为整数。

根据上面的计算公式运用传输矩阵法分别模拟微腔长度为 $L = \lambda$ 和 $L = \lambda/2$ 的 MOLED 的 EL 光谱, 对光谱图进行分析并比较。

微腔器件结构: G/DBR/ITO/NPB/Alq₃/Al。

G 代表玻璃衬底; DBR 中心波长 $\lambda = 520$ nm, 3 个周期的光学厚度为 $\lambda/4$ 的高低折射率材料交替而成; NPB 和 Alq₃ 为有机材料; ITO 是正极, Al 为负极并作为全反射镜。式(2)中用的是实际测得的发光材料 Alq₃ 的光致发光光谱。

2 模拟与结果分析

比较模拟计算的微腔长度为 $L = \lambda$ 的情况下, 激子在腔内不同位置时(L_1/L 改变)的 MOLED 在器件法线方向上的 EL 光谱, 分析其光谱特性。

图 2 是 $L = \lambda$, 激子位置 L_1/L 不同的 MOLED 的 EL 谱, 从图中可以看到, 激子在微腔内不同位置时, 峰值均为 520 nm, 半峰全宽均为 12 nm。

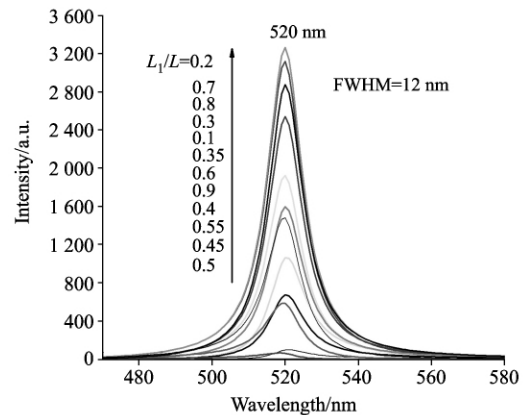


Fig. 2 Modeled EL spectra of the exciton positions L_1/L when $L = \lambda$

图 3 为不同位置激子的光谱峰值强度变化(发光光谱的积分强度分布曲线与峰值强度分布曲线的变化完全一致), 由图 3 可知, 峰值强度变化很大。当 $L_1/L = 0.5$ 时, 即激子位于微腔的正中间时, 发光光谱的峰值强度(积分强度同样)最小, 两边渐次变大至最大值(L_1/L 为 0.2 和 0.75)后又逐渐变小。设计器件时, 要使激子处于峰值强度最大值处, 做出的器件性能最佳。

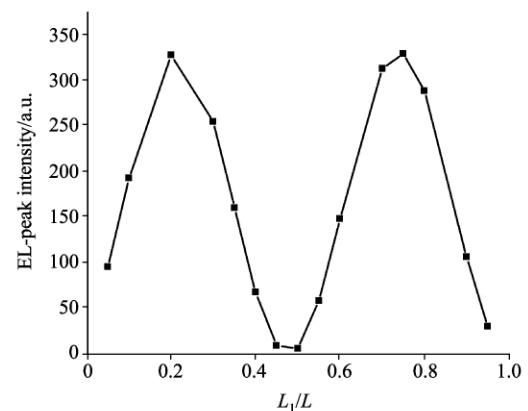


Fig. 3 The distribution of peak intensity in different positions when $L = \lambda$

当微腔长度为 $\frac{\lambda}{2}$, 激子在腔内不同位置的 MOLED 在器件法线方向上的电致发光光谱。

模拟结果表明: 激子在腔内不同位置时, 光谱的峰值都在设计的中心波长 520 nm 处, 半峰全宽均为 17 nm, 但是峰

值强度变化和发光谱的积分强度变化很大, 激子位于微腔的长度方向上中心区时, 峰值强度(积分强度同样)最大, 两边渐逐减弱。

进行比较后发现, 微腔长度为 $\lambda/2$ 的 EL 光谱的峰值强度(积分强度)变化与腔长为 λ 时正好相反。对原因进行分析, 首先模拟计算了两种微腔长度器件的透射谱, 然后模拟计算了两者的电场强度分布, 模拟结果分别见图 4 和图 5。

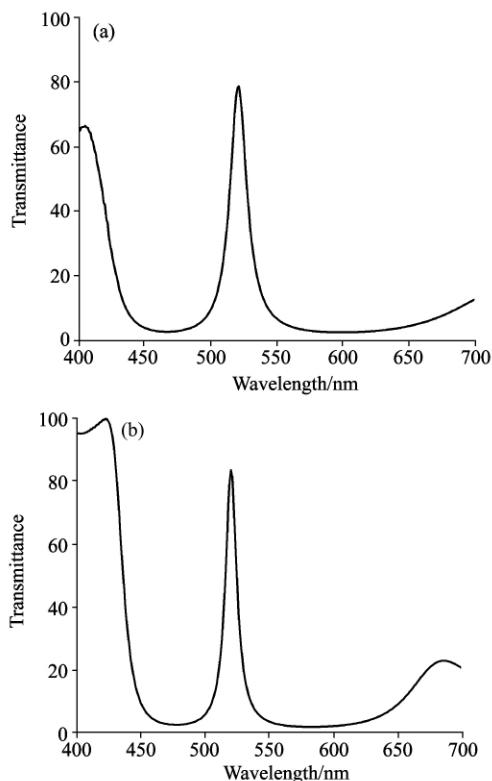


Fig 4 The transmittance spectrum of microcavity device when $L=\lambda/2$ (a) and $L=\lambda$ (b)

由图 4 和图 5 可以观察到, 总体微腔长度 $L=\lambda/2$ 与 $L=\lambda$ 两种微腔器件反射峰的透射峰虽然都是在 520 nm 处, 但是二者的电场强度分布却完全相反。图(a), 微腔器件的腔长为 $L=\lambda/2$, 微腔长度的中心处于电场强度最大值处; 微腔器件的腔长为 $L=\lambda$ 的图(b)中, 却处于电场强度最小处, 即辐射偶极子在驻波场的波节处, 对应电场强度的极小值。

References

- [1] PI Ya-juan, TANG Hao, ZHAO Guo-sheng, et al(皮雅娟, 汤昊, 赵国生, 等). Acta Chimica Sinica(化学学报), 2008, 66(12): 1460.
- [2] YU Jun-sheng, LI Lu, WEN Wen, et al(于军胜, 李璐, 文雯, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2009, 29(8): 2046.
- [3] Tokito Shizuo, Tsuzuki Toshimitsu, Sato Fumio, et al. Current Applied Physics, 2005, 5: 331.
- [4] WEN Wen, WANG Bo, LI Lu, et al(文雯, 王博, 李璐, 等). Acta Phys. Sin.(物理学报), 2009, 58(11): 8014.
- [5] DING Gui-ying, JIANG Wen-long, CHANG Xi, et al(丁桂英, 姜文龙, 常喜, 等). Acta Phys.-Chim. Sinica(物理化学学报), 2009, 25(5): 958.
- [6] NIU Lian-bin, GUAN Yun-xia(牛连斌, 关云霞). Acta Phys. Sin.(物理学报), 2009, 58(7): 4931.

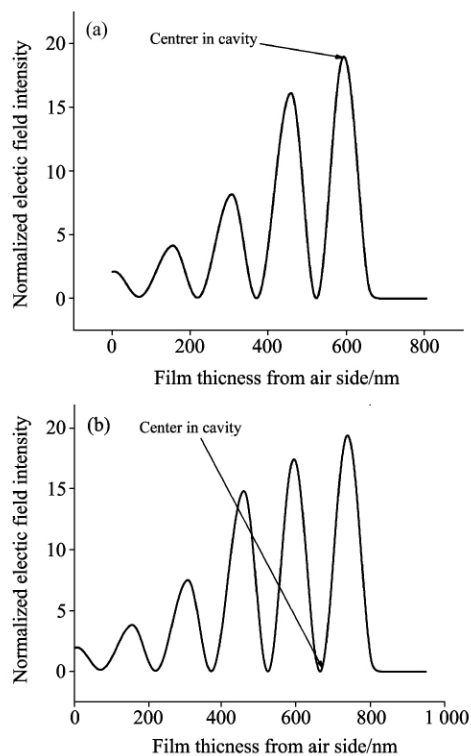


Fig 5 The distribution of electrical field of microcavity device when $L=\lambda/2$ (a) and $L=\lambda$ (b)

3 结 论

对微腔长度不变情况下, 处于微腔内不同位置激子的微腔有机电致发光器件的电致发光谱进行光谱模拟。发现: 激子在 $L=\lambda/2$ 腔的中心位置时, EL 谱的峰值强度和积分强度最大, 两边渐次减小, 经过分析是由于激子在中心时, 正在微腔内电场强度的最大值处; 而激子在 $L=\lambda$ 微腔的中心位置时, EL 谱的峰值强度和积分强度最小, 是由于此时激子处于电场强度的最低点。所以设计微腔器件时, 必须根据微腔总长度 L 的不同, 进行具体分析, 在其电场强度最大处使激子复合发光, 可以得到发光效率高的器件。通过以上的模拟计算和光谱分析, 加深了对微腔有机电致发光器件的了解, 为设计高效微腔器件奠定了基础。

- [7] HOU Lin-tao, HUANG Fei, CAO Yong, et al(侯林涛, 黄飞, 曹镛, 等). Progress in Chemistry(化学进展), 2007, 19(11): 1681.
- [8] LI Chun, PENG Jun-biao, ZENG Wen-jin(李春, 彭俊彪, 曾文进). Acta Phys. Sin.(物理学报), 2009, 58(3): 1992.
- [9] YU Jun-sheng, SUO Fan, LI Wei-zhi, et al(于军胜, 锁钺, 黎威志, 等)Acta Phys.-Chim. Sinica(物理化学学报), 2007, 23(11): 1821.
- [10] Jordan R H, Rothberg L J, Dodabalapur A, et al. Appl. Phys. Lett., 1996, 69(14): 1997.
- [11] Liu X Y, Wang L X, Liu Y, et al. Thin Solid Films, 2000, 363: 204.
- [12] ZHANG Chun-yu, LIU Xing-yuan, MA Feng-ying, et al(张春玉, 刘星元, 马凤英, 等). Acta Optica Sinica(光学学报), 2006, 26(1): 111.
- [13] ZHANG Chun-yu, XIAO Li-guang, QIN Li, et al(张春玉, 肖力光, 秦丽, 等). Acta Optica Sinica(光学学报), 2009, 29(7): 1967.
- [14] Dodabalapur A, Rothberg L J, Jordan R H, et al. J. Appl. Phys., 1996, 80(12): 6954.
- [15] Lin Chun-liang, Lin Hao-wu, Wu Chung-chih. Appl. Phys. Lett., 2005, 87(2): 021101-1.

Simulation of Microcavity Organic Light Emitting Device with Two Kinds of Resonant Cavity Lengths

ZHANG Chun-yu^{1,2}, LU Jing-bin^{2*}, WANG Cheng³, WANG Hong-jie¹

1. School of Materials Science and Engineering, Jilin Architectural and Civil Engineering Institute, Changchun 130118, China

2. College of Physics, Jilin University, Changchun 130021, China

3. Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China

Abstract The resonant cavity length of microcavity influences the light emitting characteristics of microcavity organic light emitting device (MOLED) directly. According to the related calculation formula of microcavity device, when the lengths of microcavity are $\lambda/2$ and λ , the authors use transfer matrix method to simulate and compare with the functions of composite light emitting EL when exciton is in different positions of microcavity. The authors found that when the length of microcavity is $\lambda/2$, the peaks of luminous spectrum are all at the 520 nm, and the width of half-peaks are all 17 nm. The peak intensity and integral intensity are biggest when exciton is in the central area of microcavity. When the length of microcavity is λ and exciton is at different positions of microcavity, the peaks of luminous spectrum are all at the 520 nm of designed center wavelength, and the widths of half-peaks are all 12 nm. The peak intensity and integral intensity are smallest when exciton is in the central area of microcavity. After analyzing, The authors found that the light emitting characteristics is best when the exciton is at the maximum position of the electric field. This is because the electric field's intensities in the microcavity with two kinds of lengths are distributed differently. It illustrates that one should distinguish different resonant cavity length and exciton at the maximum position of the electric field within microcavity if one wants to create an efficient MOLED.

Keywords Organic light emitting device; Optical microcavity; Resonant cavity length; Simulation

(Received May 19, 2010; accepted Sep. 29, 2010)

* Corresponding author