

Наноматериалы: 2. Да будет свет!

Задание: Очень простой вопрос с непростым ответом, который принципиально важен для понимания того, что ждет нас в недалеком будущем в связи с созданием различных устройств, использующих органические светоизлучающие диоды (ОСИД).

Опишите основные механизмы инжекции и транспорта зарядов в ОСИД (до 10 баллов).

Ответ: В настоящее время для описания инжекции носителей зарядов в структуре ЭЛУ используются два классических механизма: 1) *туннельной инжекции Фаулера-Нордгейма* и 2) *термоионной эмиссии Ричардсона-Шоттки* (рис. 1). Исследования показали, что при больших электрических полях имеет место туннельная инжекция, а при малых – термоионная эмиссия. Плотность тока туннельной инжекции определяется формулой:

$$J_{FN} = \frac{Ae^2 F^2}{\Phi \alpha^2 k^2} \exp\left(\frac{2\alpha\Phi^{3/2}}{3eF}\right), \quad (2-1)$$

где A – постоянная Ричардсона, $\alpha = 4\pi\sqrt{2m/h}$, e и m – заряд и масса электрона, k – постоянная Больцмана, h – постоянная Планка, Φ – работа выхода, F – напряженность электрического поля.

Ток термоионной эмиссии:

$$J_{RS} = AT^2 \exp\left(\frac{\Phi - \delta\sqrt{E}}{kT}\right), \quad (2-2)$$

где $\delta = \sqrt{e^3 / 4\pi\epsilon\epsilon_0}$, ϵ - диэлектрическая постоянная, T – температура.

Как следует из формул (2-1), (2-2) ток инжектированных носителей определяется, главным образом, величинами напряженности электрического поля и работы выхода, или барьером, зависящим от сродства к электрону или потенциала ионизации органического материала.

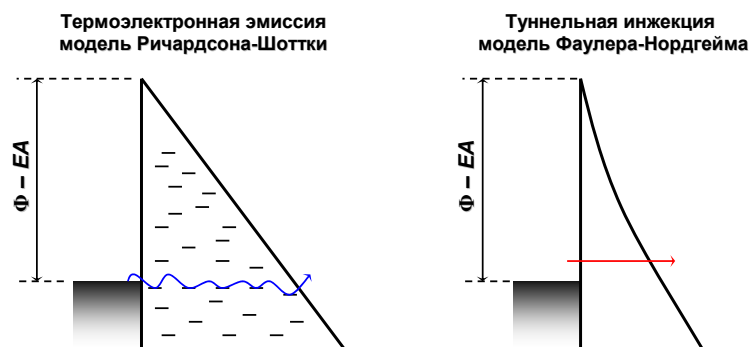


Рис. 1. Модели инжекции носителей зарядов.

Форрест с сопр. предсказывают также механизм инжекции, связанный с заполнением ловушек на границе металл/органический слой. В действительности для

описания работы реальных ЭЛУ используется комбинация существующих механизмов инжекции.

Необходимо отметить, что, так как ЭЛУ представляет собой многослойную структуру, явления на границах раздела металл/органика и органика/органика играют очень важную роль при работе устройств. На границе металл/органика, величина барьеров, которые необходимо преодолевать электронам (Φ_e) и дыркам (Φ_h), зависит от положения НОМО и LUMO органического слоя по отношению к уровню Ферми (E_F). Если построить энергетическую диаграмму относительно уровня вакуума (E_{vac}), Φ_h будет равен разнице между потенциалом ионизации (IP) и работой выхода металла (Φ_M) ($\Phi_h = IP - \Phi_M$), а Φ_e – разнице между Φ_M и сродством к электрону (EA) органического слоя ($\Phi_e = \Phi_M - EA$). IP и E_F могут быть определены из фотоэлектронных спектров органической и металлической пленок, соответственно. Величина EA обычно оценивается по величине IP и разнице между уровнями НОМО и LUMO; последняя может быть определена на основе оптических измерений. В реальных системах предположение о существовании общего уровня вакуума не является вполне обоснованным. В большинстве случаев при осаждении пленок органических материалов на металлическую поверхность возникает “дипольный слой” на границе металл/органика. Образование такого слоя может быть результатом действия многих факторов, например, переноса заряда через границу раздела, перераспределения электронных облаков, химической реакции, а также других типов перераспределения электронного заряда. Это приводит к резкому смещению электрического потенциала вдоль дипольного слоя и, как следствие, к “смещению” на величину Δ идеального уровня вакуума на границе раздела. Величина Δ зависит от величины дипольного момента. Схематическая энергетическая диаграмма расположения уровней на границе раздела металл/органика в случае отсутствия и при образовании дипольного слоя представлена на рис. 2а и 2б, соответственно. Так, во втором случае, $\Phi_e = \Phi_M - EA - \Delta$, а $\Phi_h = IP - \Phi_M + \Delta$. Экспериментальные данные фотоэлектронной спектроскопии для металлической и органической пленок представлены на рис. 2в.

Приведем некоторые выводы, сделанные на основании анализа экспериментальных данных:

- 1) В общем случае, энергетическая разница между металлическим и органическим слоем отрицательна (уровень вакуума понижается, $\Delta < 0$). Исключение составляют случаи, когда сильные электроноакцепторные группы, такие как, например, атомы фтора, контактируют с поверхностью;
- 2) Чем больше величина работы выхода металла, тем больше величина смещения Δ ;

- 3) Дипольный слой на границе органика/органика обычно пренебрежимо мал; только в случае границ раздела между сильным донором и сильным акцептором может существовать барьер $\sim 0.2\text{--}0.3$ эВ за счет процессов переноса заряда;
- 4) В целом же, образование дипольного слоя на границах раздела металл/органика является очень многофакторным процессом, и требует дальнейшего изучения.

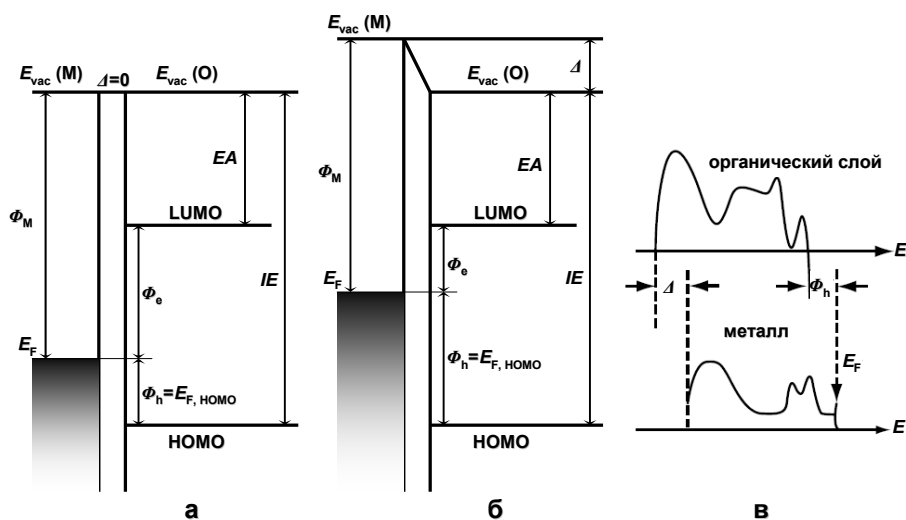


Рис. 2. Схематическая энергетическая диаграмма границы раздела металл/органический слой при (а) отсутствии и (б) образовании диполей ($\Delta>0$), (в) фотоэлектронные спектры металла и органического слоя.