소자 내부에서 전하 운송체의 이동 메카니즘에 관한 연구

심혜연, 김준호, 김영관
홍익대학교

A Study on the Transference Mechanism of Charge carriers within the Devices

Hye-Yeon Shim, Jun-Ho Kim, YoungKwan Kim
Hongik Univ.

Abstract : In case of ITO/MEH-PPV/Al structure, the quantity of charge carriers flowing through the organic material was few and the density of them is fixed. The electric field inside of the device almost didn't change with the position. On the other hands, in case of Au/MEH-PPV/Au structure, the hole density increased rapidly nearby the anode but decreased nearby the cathode. The space charge phenomenon followed sufficient hole injection resulted in the change of the electric field with the position inside of the device. We verified that the result of the current-voltage simulation corresponded with experimental result.

Key Words : Charge transport, Ohmic Contact, Injection-Limited Contact, Image force

1. 서 론

물질 내부의 전기적 특성 변화는 전기장을 임의로 변화시킬 때 나타나는 전하 운송체의 이동성 변화를 추적함으로써 알아볼 수 있고 또한 물질 계면에 축적될 수 있는 전하들의 양을 조사하여 누적 전하들이 만들어 내는 공간 전하 현상 및 소자의 전기적 특성에 미치는 영향을 규명할 수 있으리라 생각된다.

본 연구에서는 전하 운송 모델 계산을 통하여 유기 EL 소자의 최적 구조를 구현하기 위한 실험의 방향을 제시하고자 하였다. 소자 내부를 움직이는 전하들의 운송 메커니즘을 규명하기 위하여 전하 운송 모델을 이용한 모사 프로그램을 이용하여 OLED의 구조 최적화를 진행하였다. 이러한 계산을 통하여, 전극과 발광 물질간의 주입 장벽 크기에 따라서 소자 내부의 전하 운송 상태를 규명하고, 가상의 J-V 특성 그래프를 모사하였으며, 그 결과를 실험값과 비교하였다.

2. 실 험

정공이 다수 케리어인 MEH-PPV를 이용한 유기 소자에 대하여 전하 운송 모델을 적용하여 보았다[1]. 이를 위해 전자와 정공의 에너지 준위를 Ec = 2.9 eV와 Ev = 5.3 eV로 하였으며, 따라서 에너지 갭은 2.4 eV가 된다. 유전 상수 e = 3과 전하 밀도 $n_0 = 10^{21}$ cm^{-3}을 사용하였다. 또한, 실험 결과와 비교하기 위하여 정공의 이동도 변수를 $\mu_0 = 1.7\times10^{-6}$ cm^2/Vs와 $E_0 = 1\times10^5$ V/cm를 사용하였고, 모든 계산에서 온도는 실온으로 계산하였다[2].

본 연구에서는 ① ITO/MEH-PPV/Al 구조 와 ② Au/MEH-PPV/Au 구조에 대한 소자 특성을 시뮬레이션 하였다. ① 구조에서는 양극인 ITO와 MEH-PPV 사이의 Barrier의 크기가 0.5 eV이고 MEH-PPV와 Al 사이의 Barrier는 1.4 eV이다. ② 구조에서는 양극인 Au와 MEH-PPV 사이의 Barrier가 0.1 eV이고, 음극인 Au와 MEH-PPV 사이의 Barrier는 2.3 eV이다.

3. 결과 및 고찰

전극과 유기물 사이의 전하 주입 특성은 크게 두 가지로 구분할 수 있는데, 두 물질간의 Barrier 차가 0.3 ~ 0.4 eV 이하이면 Ohmic Contact(OC)이라고 하고, 0.4 eV 이상이면 Injection Limitted Contact(ILC)이라고 한다[3]. OC의 경우 전하의 이동은 공간 전하 효과(Space Charge Limitted)가 중요한 역할을 하며, 소자 내부의 전기장이 불안정하게 된다. 본 계산에서는 운반자의 확산과 전기장에 비례하는 이동도를 고려하였으므로 전기장과 무관한 이동도와 확산을 무시한 경우 유도될 수 있는 Space Charge Limitted 영역의 간단한 공식의 형태로는 나타낼 수 없다. ILC의 경우 전하의 이동은 전하 주입 특성의 영향을 받으며, 이 영역에서의 실질 주입 전하는 매우 적으므로 소자 내부의 전기장이나 전하 밀도는 거의 일정하고 공간 전하 효과는 중요하지 않다. 이 경우 운반자 밀도가 거의 일정하기 때문에 소자 전류 밀도는 전류의 drift 항으로 근사될 수 있다.

그림 1과 그림 2에서 실선은 소자 모사 과정을 통하여 얻어진 그래프이고, 점선은 제작한 소자의 J-V 특성 그래프이다. 그림 중 (a)는 계산된 결과를 로그-선형 관계로 나타내었고, (b)에서는 선형-선형 관계로 나타내었다.

그림 1은 전자 주입 전극과 정공 주입 전극을 각각 Al과 ITO을 사용하였다. 전자 주입 장벽이 정공 주입보다 매우 크기 때문에 주된 전류 흐름은 정공에 의해 결정된다. 이러한 injection limited 조건에서 계산된 결과는 실험으로 측정된 J-V 특성을 잘 설명하여 주고 있다.

그림 2는 전자 및 정공 주입 전극을 모두 Au로 사용하였다. 이와 같이 작은 정공 주입 장벽에서는 그림 1과 같이 에너지 장벽에 결과가 크게 변화되지 않는다. 전자 주입

장벽은 매우 크므로 이 소자에는 전자를 무시해도 좋다. 전체적으로 space charge limited 조건에서 실험으로 측정된 J-V 특성을 잘 나타내고 있다.

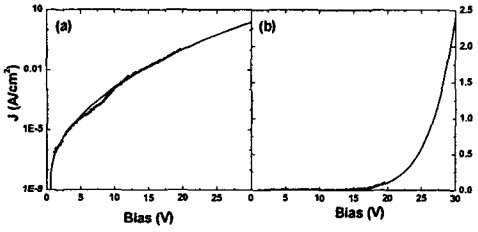


그림 1. ① 소자의 J-V 특성 그래프.

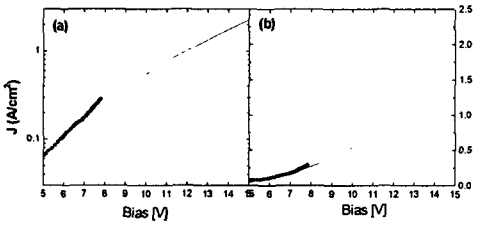
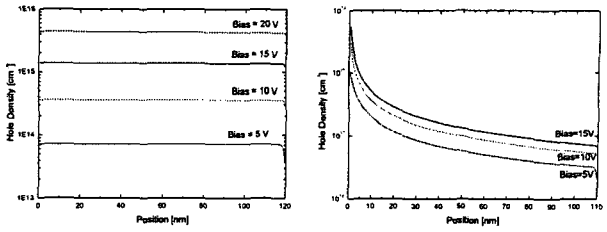


그림 2. ② 소자의 J-V 특성 그래프.

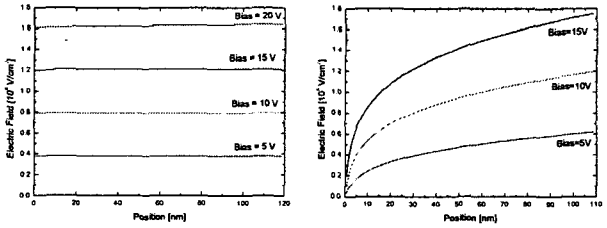
그림 3은 (a) ① 구조와 (b) ② 구조에 대하여 인가전압 5, 10, 15, 20 V 에서의 정공의 밀도를 위치에 따른 함수로 나타내었다. 두 그림 모두에서 왼쪽이 정공 주입 전극을 나타낸다. 그림 3(a)의 정공 밀도는 전체 공간에서 일정한 값을 나타내고 있다. 정공 밀도는 인가전압을 증가함에 따라 증가하는데 모든 인가전압에 대해 적은 값을 나타내므로 소자가 전기장에 크게 영향을 받지 않음을 알 수 있다. 이것으로 이러한 인가전압에서의 정공 주입은 thermionic임을 알 수 있다. 그림 3(b)의 0.1 eV의 정공 주입 장벽을 가진 소자의 정공 밀도는 소자 위치에 따라 크게 변화한다. 양 끝 Au 전극에서의 정공 밀도는 평형 값과 같은데, 이는 이 경우 정공 주입 장벽을 낮추어주는 image force도 없으며, tunneling 주입도 없기 때문이다[4]. 이 소자의 경우 정공 밀도는 인가전압에 따라 크게 변하며, 이들 정공 밀도가 매우 커서 소자의 전기장에 크게 영향을 미침을 알 수 있다.

그림 4는 (a) ① 구조와 (b) ② 구조에 대하여 그림 3과 같은 인가전압을 가할 때의 위치에 따른 전기장을 계산한 결과이다. 또한 이 역시 그림 3과 같이 왼쪽이 정공 주입 전극을 나타낸다. 그림 4(a)는 위치에 따라 일정한 반면, 그림 4(b)는 위치에 따라 전기장이 크게 변함을 알 수 있다. 그림 4(a)는 정공 주입 전극에서의 전기장이 image force가 정공 주입 장벽을 낮추어 주는 옳은 방향으로 나타나지만, 그림 4(b)에서는 정공 주입 전극 근처의 높은 정공 밀도 때문에 전기장의 방향이 반대로 되어 정공 주입 장벽을 낮출 수 있는 image force를 유도하는 방향이 아니기 때문이다.



(a) (b)

그림 3. (a) ① 소자와 (b) ② 소자 내부의 위치에 따른 정공 밀도 분포 곡선.



(a) (b)

그림 4. (a) ① 소자와 (b) ② 소자 내부의 위치에 따른 전기장 변화 곡선.

4. 결 론

우리는 계산을 통하여 전극과 발광 물질간의 주입 장벽 크기에 따라서 소자 내부의 전하 이송 상태를 규명하였다. ① 구조의 경우, 양극과 발광층, 음극과 발광층에서 barrier의 크기가 모두 0.4 eV 이상이므로 전하의 운송 특성은 계면의 특성에 영향을 받으므로 소자 내부를 흐르는 전하들의 양이 매우 적고, 그 농도가 일정하여 소자 내부의 각 지점에서 전기장의 변화가 거의 없었다. 그러나 ② 구조를 가진 유기 EL 소자의 경우, 양극과 발광층의 barrier의 크기는 0.1 eV로 매우 작아 양극에서 정공 농도가 급격히 증가하고 음극으로 갈수록 줄어드는 양상을 보였으며, 다량의 정공 유입에 따른 공간 전하 현상으로 소자 내부의 각 지점에서 전기장의 변화를 볼 수 있었다. 서로 다른 전하 이동 특성을 가진 두 구조에 대한 J-V 모사는 실제 실험 결과와 매우 잘 일치하는 것을 볼 수 있었다.

감사의 글

이 논문은 2001년도 한국학술진흥재단의 연구비에 의하여 지원되었음 (KRF-2001-005-D22001).

참고 문헌

[1]. P. Cea, Y. Hua, M. C. Petty, Materials Science and Engineering C 22, 87 (2002)

[2]. P. M. Borsenberger and D. W. Weiss, Organic Photoreceptors for Imaging Systems (Dekker, New York, 1993)

[3]. S. O. Kasap. Principles of Electronic Materials and Deviced (McGrawHill, 2002)

[4]. A. Hartstein, Z. A. Weinberg. J. Phys. C. 11,469 (1978)