

# 金属纳米颗粒的导入对顶发射 OLED 光取出影响的 FDTD 模拟与研究

潘赛虎<sup>1</sup>, 于航<sup>1</sup>, 赵云平<sup>2</sup>, 胡苏豪<sup>1</sup>, 兰伟霞<sup>2\*</sup>, 魏斌<sup>2\*\*</sup>

<sup>1</sup>常州大学微电子与控制工程学院, 江苏 常州 213164;

<sup>2</sup>上海大学机电工程与自动化学院新型显示技术及应用集成教育部重点实验室, 上海 200072

**摘要** 由于有机发光二极管(OLED)中存在金属阴极和有机层界面,故部分光子会转化为表面等离子激元沿金属表面传播耗散掉。同时,金属阴极自身也会吸收部分光能量。这两种情况均会导致器件出光率降低。分析了在结构为 Ag (100 nm)/MoO<sub>3</sub>(5 nm)/NPB (35 nm)/EML (20 nm)/Alq<sub>3</sub>(40 nm)/Al (20 nm)/MoO<sub>3</sub>(50 nm)的器件内部引入银纳米颗粒(Ag NPs)或者金纳米颗粒(Au NPs)后器件出光效率的变化。同时,改变金属纳米颗粒的位置以观察其对出光效率的影响。利用有限差分域法对无金属纳米颗粒的器件和金属纳米颗粒位于器件不同位置时的出光效率进行了模拟计算。结果显示,Ag NPs 或者 Au NPs 都可以提高器件出光效率且 Ag NPs 优于 Au NPs。在 468 nm 波长下,Ag NPs 位于 Al 阴极表面、电子传输层(ETL)中间和 Ag 表面时器件的透光率分别是 51.1%,50.5%和 45.5%,而未掺杂 Ag NPs 的参考器件的透光率仅为 43.3%。

**关键词** 材料;金属纳米颗粒;顶发射有机发光二极管;有限差分域法;表面等离子激元

中图分类号 O482.31

文献标志码 A

DOI: 10.3788/AOS202242.0916001

## FDTD Simulation and Study on Effect of Metal Nanoparticle Introduction on Light Extraction of Top-Emitting OLED

Pan Saihu<sup>1</sup>, Yu hang<sup>1</sup>, Zhao Yunping<sup>2</sup>, Hu Suhao<sup>1</sup>, Lan Weixia<sup>2\*</sup>, Wei Bin<sup>2\*\*</sup>

<sup>1</sup>School of Microelectronics and Control Engineering, Changzhou University, Changzhou 213164, Jiangsu, China;

<sup>2</sup>Key Laboratory of Advanced Display and System Applications Ministry of Education, School of Mechatronic Engineering and Automation, Shanghai University, Shanghai 200072, China

**Abstract** Some photons will be transformed into surface plasmon polaritons and dissipated along the metal surface due to the existence of the interface between metal cathode and organic layer in organic light-emitting diode (OLED). At the same time, the metal cathode absorbs part of the light energy. Both of these cases will result in a very low power efficiency of the device. The changes of luminous efficiency of the device with the structure of Ag (100 nm)/MoO<sub>3</sub>(5 nm)/NPB (35 nm)/EML (20 nm)/Alq<sub>3</sub>(40 nm)/Al (20 nm)/MoO<sub>3</sub>(50 nm) are analyzed after the introduction of silver nanoparticles (Ag NPs) or gold nanoparticles (Au NPs). Furthermore, the positions of the metal nanoparticles are changed to observe the effect of different positions of the nanoparticles on the luminous efficiency of the device. The finite-difference time-domain method is used to simulate the luminous efficiencies of devices without metal nanoparticles and metal nanoparticles at different positions of the device. The results show that both Ag NPs and Au NPs can improve the luminous efficiency, and Ag NPs are better than Au NPs. At the wavelength of 468 nm, when Ag NPs are located on the surface of Al cathode, the middle of electron transport layer (ETL) and the Ag surface, the transmittance of the device is 51.1%, 50.5% and 45.5%, respectively. However, the transmittance of the reference device without Ag NPs is only 43.3%.

收稿日期: 2021-10-28; 修回日期: 2021-11-12; 录用日期: 2021-11-25

基金项目: 国家自然科学基金(11974236, 62005152)、江苏省研究生科研与实践创新计划(KYCX20\_2549)

通信作者: \*weixia\_lan@shu.edu.cn; \*\*bwei@shu.edu.cn

**Key words** materials; metal nanoparticles; top-emitting organic light-emitting diode; finite-difference time-domain method; surface plasmon polaritons

## 1 引言

有机发光二极管(OLED)因具有可任意弯曲、反应快、成本低、制造工艺简单和适用于大面积发光光源的应用场景等优点<sup>[1]</sup>,近些年得到了广泛应用。根据出光方向,OLED一般可被分为底发射 OLED 和顶发射 OLED。相较传统的底发射 OLED,顶发射 OLED 具有高开口率<sup>[2]</sup>、高色纯度和高发光效率等优点,故其已成为目前 OLED 显示的主要结构。

在器件工作过程中,各层材料的折射率存在差异<sup>[3]</sup>、器件内部存在波导损耗<sup>[4]</sup>、表面等离子体损耗和表面全反射损失等原因导致 OLED 的出光效率较低<sup>[5]</sup>,严重影响了器件的性能,故提高出光效率已成为研究热点。目前已知的提高 OLED 器件发光效率的方法主要有引入光子晶体结构、粗糙化材料表面和利用表面等离子激元(SPPs)增强等<sup>[6]</sup>。

SPPs<sup>[7]</sup>指的是在金属表面区域的一种自由电子和光子相互作用形成的电磁振荡。在入射光子的激发下,如果电子的振荡频率与入射光波的频率一致,就会产生共振,从而产生一种特殊的电磁模式,其特点是具有很强的局域增强,是对光子行为调控的一种有效方法。基于上述原理,可通过引入金属纳米结构的方式将表面等离子体的能量以光的形式辐射出去,进而提高器件的出光效率<sup>[8]</sup>。

SPPs 在 OLED 方面的应用目前已经取得了很多显著的成果。2013 年,肖艳等<sup>[9]</sup>以绿光 OLED 器件作为研究对象,采用化学合成法引入 Au 纳米颗粒(NPs),并利用等离子溅射的方法改变聚二氧乙基噻吩(PEDOT)层的粗糙度,实现了 SPPs 的激发,最终有效提高了器件的发光效率。2014 年,Fuchs 等<sup>[10]</sup>利用 SPPs 极化修饰增强顶发射 OLED 器件的光耦合。2020 年,张雅男等<sup>[11]</sup>将 Ag 纳米立方掺入电子传输层(ETL)中,使 Ag 纳米立方与激子之间产生充分的耦合作用,提高了激子发光强度。Wang 等<sup>[12]</sup>研究了银纳米颗粒对基于石墨电极的顶发射 OLED 光反射和有机光伏电池<sup>[13]</sup>的光吸收增强效果。由于 Ag 和 Au 在表面等离子体共振方面具有独特的、可调节的光学属性,故本文选择这两种纳米颗粒优化器件结构以提高出光效率。

本文在结构为 Ag(100 nm)/MoO<sub>3</sub>(5 nm)/

NPB(35 nm)/EML(20 nm)/Alq<sub>3</sub>(40 nm)/Al(20 nm)/MoO<sub>3</sub>(50 nm)的顶发射 OLED 器件中引入半球形 Ag/Au NPs 激发等离子激元增强效应。在红绿蓝(RGB)三种经典波长下,利用有限差分时间域(FDTD)法对引入不同纳米颗粒的器件进行仿真,并对比 NPs 分别位于 Al 阴极表面、ETL 中间和 Ag 表面时对器件发光效率和透光率的影响。最后,通过对比发现,引入 Ag NPs 的效果较好且 Ag NPs 位于 Al 表面时透光率最好。

## 2 结构与建模

FDTD 法是解决复杂问题的有效方法之一<sup>[14]</sup>,是一种直接基于时域电磁场微分方程的数值算法,基于此原理的软件 Lumerical FDTD Solutions 能够十分准确地对 OLED 中的微纳光学结构、非线性光学等进行模拟研究。通过 FDTD Solutions 能更加高效、准确地分析与设计 OLED 的光学特性,与实验相比,其可以更加快捷、方便地显示出成果,节省了大量的时间成本和材料成本。

参考器件结构如图 1 所示,其中 Ag(100 nm)作为阳极,MoO<sub>3</sub>(5 nm)作为阳极修饰层,用以降低阳极与空穴传输层[N,N'-Di(1-naphthyl)-N,N'-diphenyl(1,1-biphenyl)-4,4'-diamine(NPB)(35 nm)]间的势垒,发光层 EML(20 nm),tris(8-quinolinolato)aluminium(Alq<sub>3</sub>)作为电子传输层(40 nm),Al(20 nm)作为阴极,MoO<sub>3</sub>(50 nm)作为阴极修饰层。在参考器件的基础上,通过在器件的 Al 阴极表面、ETL 中间和 Ag 阳极表面分别引入不同金属纳米颗粒,以研究引入金属纳米颗粒对器件发光效率的影响和金属纳米颗粒在器件不同位置对发光效率的影响,3 种器件分别记为 Device1、Device2 和 Device3,其结构分别为:Ag(100 nm)/MoO<sub>3</sub>(5 nm)/NPB(35 nm)/EML(20 nm)/Alq<sub>3</sub>(40 nm)/Al(20 nm)/Ag(Au) NPs(5 nm)/MoO<sub>3</sub>(50 nm); Ag(100 nm)/MoO<sub>3</sub>(5 nm)/NPB(35 nm)/EML(20 nm)/Alq<sub>3</sub>(40 nm)/Ag(Au) NPs(5 nm)/Al(20 nm)/MoO<sub>3</sub>(50 nm); Ag(Au) NPs(5 nm)/Ag(100 nm)/MoO<sub>3</sub>(5 nm)/NPB(35 nm)/EML(20 nm)/Alq<sub>3</sub>(40 nm)/Al(20 nm)/MoO<sub>3</sub>(50 nm)。

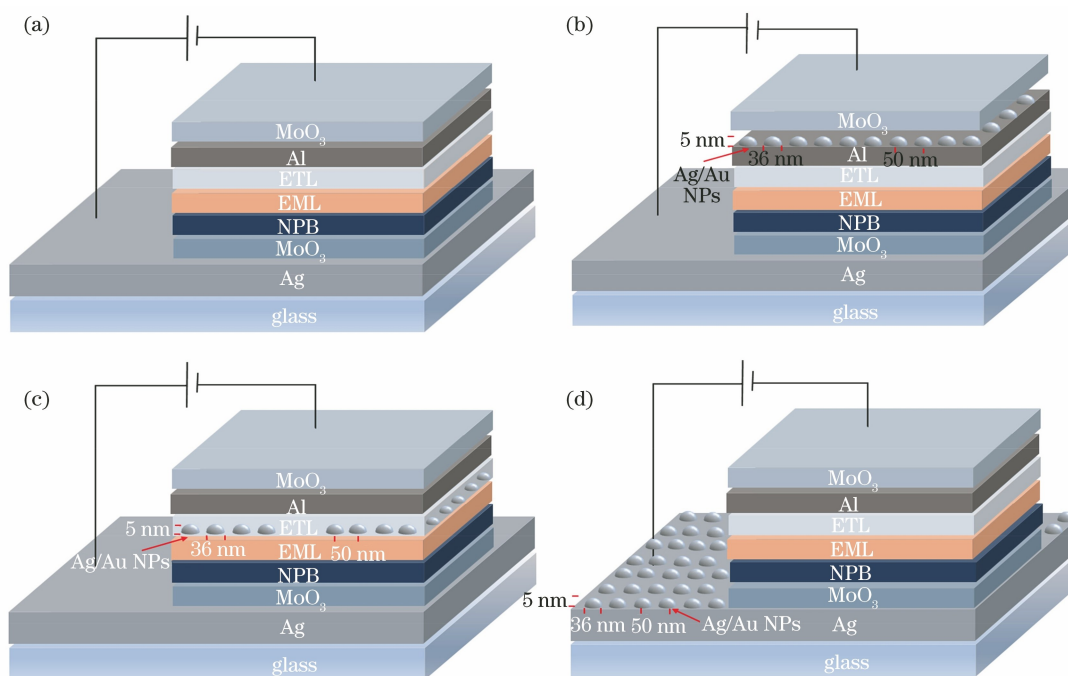


图 1 器件结构图。(a)参考器件结构;(b)金属纳米颗粒在阴极表面(Device1);  
(c)金属纳米颗粒在 ETL 中(Device2);(d)金属纳米颗粒在阳极表面(Device3)

Fig. 1 Device structure diagrams. (a) Reference device structure; (b) metal nanoparticles on cathode surface (Device1);  
(c) metal nanoparticles in ETL (Device2); (d) metal nanoparticles on anode surface (Device3)

在明确器件结构后,利用仿真软件 Lumerical FDTD Solutions 对上述器件结构进行建模仿真,仿真的步骤包括创建物理模型、设置仿真区域与几何参数、设置激励源、设置监视器、运算仿真和数据

分析。

首先,将各层设置为长度一致的长方形,根据器件结构依次设置各层厚度、材料介质的介电常数等。其中,材料的折射系数和消光系数<sup>[15-19]</sup>如图 2 所示。

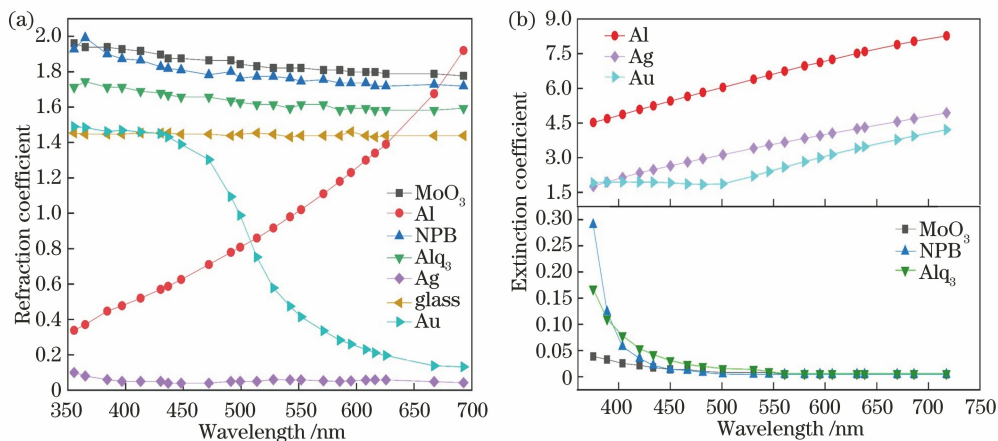


图 2 材料的折射系数和消光系数。(a)折射系数;(b)消光系数

Fig. 2 Refraction coefficient and extinction coefficient of material. (a) Refraction coefficient; (b) Extinction coefficient

引入器件中的金属纳米颗粒是高度为 5 nm,直径为 36 nm,圆心间距为 50 nm 的半球形。此外,还需要选择合适的仿真区域,因为模拟区域的大小和网格精度对模拟结果的准确性有着很大的影响。电子和空穴结合产生光子会导致光在 OLED 的发射层中产生。OLED 是面发光的,相当于无数点光

源排列在一起。为简化模拟过程,在软件中选择水平方向偶极光源作为激励源,并将其放置在发光层的中心。为了测量有源层中产生的总功率,将监视器放于偶极子光源四周。在所有边界上都设置了完全匹配层(PML)边界条件,以减少光反射的影响。通过计算发射偶极子光源的近场分布来确定光提取



效率是否有提高。

### 3 结果与讨论

在确定好器件结构后,首先以 468,534,618 nm

波长的点光源作为蓝、绿、红光发射光源,研究了 Al 阴极表面加入不同金属纳米颗粒前后器件的发光光谱,为了便于观察光谱强度变化的趋势将其归一化处理,所得结果如图 3 所示。

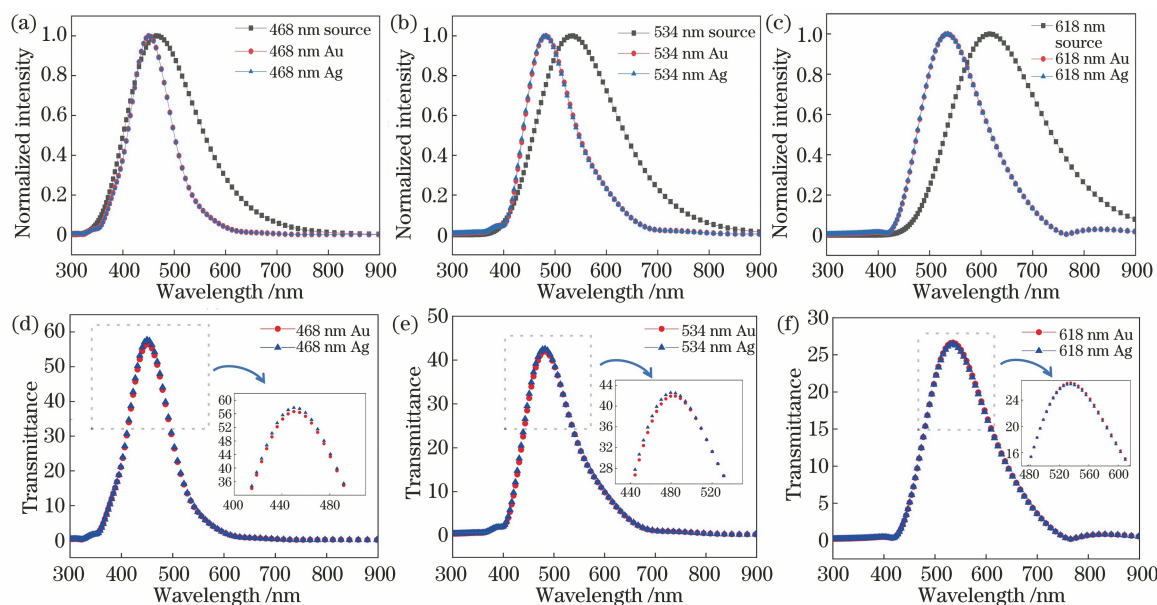


图 3 归一化光谱和透光率。(a)当输入光源波长为 468 nm 时,Au、Ag 输出的归一化光谱;(b)当输入光源波长为 534 nm 时,Au、Ag 输出的归一化光谱;(c)当输入光源波长为 618 nm 时,Au、Ag 输出的归一化光谱;(d)当输入光源波长为 468 nm 时,Au、Ag 的透光率;(e)当输入光源波长为 534 nm 时,Au、Ag 的透光率;(f)当输入光源波长为 618 nm 时,Au、Ag 的透光率

Fig. 3 Normalized spectra and transmittances. (a) Normalized output spectra of Au and Ag when wavelength of input light source is 468 nm; (b) normalized output spectra of Au and Ag when wavelength of input light source is 534 nm; (c) normalized output spectra of Au and Ag when wavelength of input light source is 618 nm; (d) transmittances of Au and Ag when wavelength of input light source is 468 nm; (e) transmittances of Au and Ag when wavelength of input light source is 534 nm; (f) transmittances of Au and Ag when wavelength of input light source is 618 nm

从图 3(a)中可以看出,Au、Ag 两种材质的强度变化趋势几乎一致。同样,当输入光源波长为 534 nm 时,Au、Ag 的强度变化趋势也几乎一致,如图 3(b)所示。图 3(d)展示了当输入光源波长为 468 nm 时,Au、Ag 的透光率。可以发现,透光率在 450 nm 附近最高(56%),Ag 的透光率优于 Au。从图 3(e)中可以看出,透光率在 475 nm 附近有最大值(42%)。当输入光源波长为 618 nm 时,Ag 与 Au 的透光率几乎一致,如图 3(f)所示。最终,可以得出,Ag NPs 的效果稍微优于 Au NPs。此外,光谱发生了蓝移,这主要是纳米微粒尺寸小,大的表面张力使晶格畸变,晶格常数变小导致的。键长的缩短导致纳米微粒的键本征振动频率增大,进而造成红外光吸收带移向短波方向<sup>[20]</sup>。接着,研究了同种纳米颗粒在 3 种波长入射光下透光率的大小,结果如图 4 所示。通过对比发现,无论是 Ag NPs 还是 Au NPs 都是在 468 nm 入射光波长具有最高的透

光率。

最终,通过对比选择研究当光源波长为 468 nm 时,Ag NPs 在器件不同位置对器件出光效率的影响。根据所选定的结构对器件进行仿真,仿真结果如图 5 所示。

图 5(a)是未引入 Ag NPs 的器件仿真图,图 5(b)~(d)分别是 Ag NPs 位于 Al 阴极表面、ETL 中间、Ag 表面的器件仿真图。可以看出:未引入 Ag NPs 的器件的光主要集中在器件内部,少部分的激子散发到器件外;在引入 Ag NPs 后,情况明显得到改善,表面等离子增强效应使得出光效率得到明显提高。计算结果表明:在未引入 Ag NPs 的条件下器件的透光率仅有 43.3%;在 Al 阴极表面引入 Ag NPs 后透光率最高(51.1%);当 Ag NPs 位于 ETL 中间时,透光率稍微降低(50.5%);当 Ag NPs 位于底部时,透光率最低(45.5%)。

当在 Al 阴极表面引入 Ag NPs 时,器件的出光

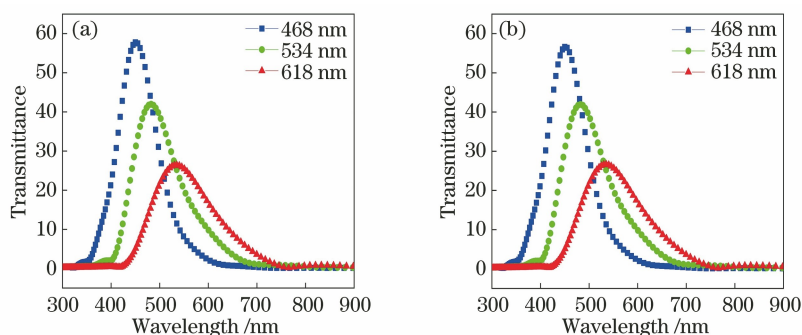


图 4 3 种波长下不同纳米颗粒的透光率。(a) Ag; (b) Au

Fig. 4 Transmittances of different nanoparticles under three wavelengths. (a) Ag; (b) Au

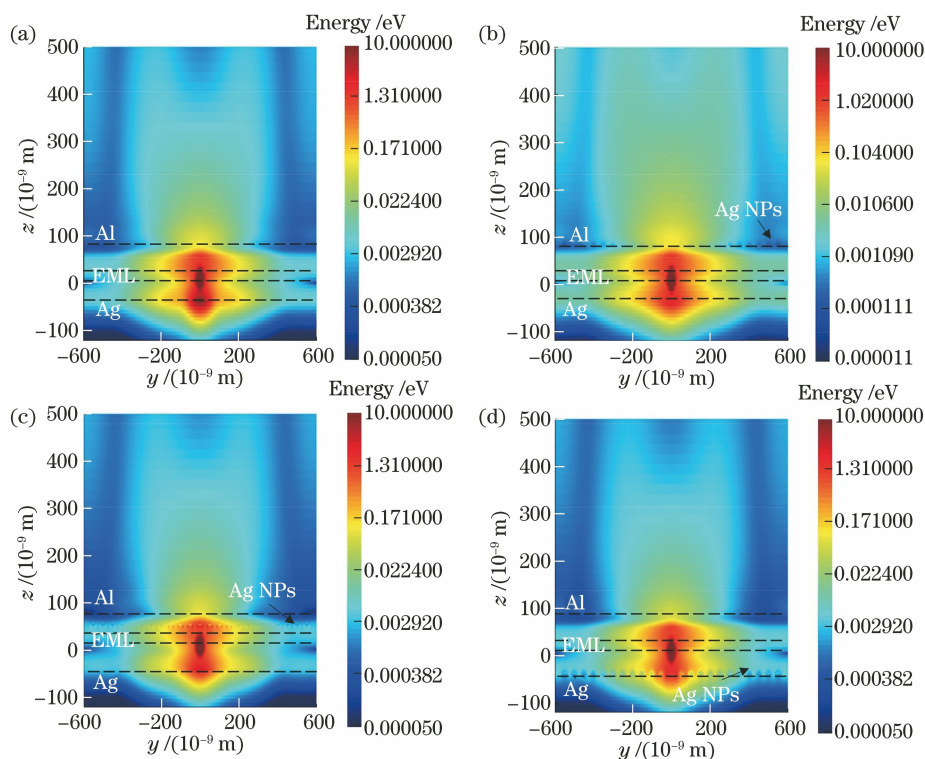


图 5 不同位置引入 Ag NPs 的仿真结果。(a)未引入 Ag NPs; (b)在阴极表面; (c)在 ETL 中间; (d)在阳极表面

Fig. 5 Simulation results of inserting Ag NPs in different positions. (a) without inserting Ag NPs;

(b) on cathode surface; (c) in middle of ETL; (d) on anode surface

效率最高,这主要是因为当 Ag NPs 置于器件 Al 阴极表面时,表面等离子增强效应存在,纳米结构将表面等离子体的能量以光的形式辐射出去<sup>[21]</sup>。当 Ag NPs 位于 Ag 表面时改变了阳极表面的粗糙度,增大了接触面积,从而提高了出光效率<sup>[22]</sup>。

## 4 结 论

通过 FDTD 研究分析了在 OLED 器件中引入纳米颗粒对出光效率的影响,发现引入 Ag NPs 或者 Au NPs 都可以提高器件的出光效率,从实验效果来看,Ag NPs 稍微优于 Au NPs。同时,计算了 Ag NPs 在器件不同位置处器件的透光率,发现当

Ag NPs 颗粒位于 Al 阴极表面时器件的透光率最高,达到了 51.1%,这是因为 Ag NPs 的存在将表面等离子体的能量以光的形式辐射出去。当 Ag NPs 位于器件底部时,出光效率的增强相较于 NPs 位于其他位置时略有不足,透光率仅有 45.5%,这是因为当 Ag NPs 位于阳极时虽然增加了表面粗糙度,让更多的激子能耦合,但是大部分激子依然被困在器件内部。然而,Ag NPs 位于器件底部时的结果依然优于未引入 Ag NPs 的情况(43.3%)。由此看来,在 OLED 器件阴极表面引入 Ag NPs 是一种很好地提高出光率的方式。

## 参 考 文 献

- [1] 金成龙, 李青. OLED 显示技术概要及应用领域的发展趋势 [J]. 数字技术与应用, 2020, 38(8): 216-219.  
Jin C L, Li Q. Overview of OLED display technology and development trends in application fields [J]. Digital Technology & Application, 2020, 38(8): 216-219.
- [2] Wan Q R, Kyung R S, Tae H P, et al. Manipulation of blue TADF top-emission OLEDs by the first-order optical cavity design: toward a highly pure blue emission and balanced charge transport[J]. Photonics Research, 2021, 9(8): 1502-1512.
- [3] 李继军, 聂晓梦, 李根生, 等. 平板显示技术比较及研究进展 [J]. 中国光学, 2018, 11(5): 695-710.  
Li J J, Nie X M, Li G S, et al. Comparison and research progress of flat panel display technology[J]. Chinese Optics, 2018, 11(5): 695-710.
- [4] Duan L, Yang H, Wang G, et al. Preparation of 8-hydroxyquinoline aluminum nanomaterials to enhance properties for green organic light-emitting diode devices [J]. Journal of the Society for Information Display, 2021, 29(6): 466-475.
- [5] Sharma R K, Deepak, Katiyar M. Effect of various microlens parameters on enhancement of light outcoupling efficiency of organic light emitting diode [J]. Organic Electronics, 2016, 38: 121-129.
- [6] 邱丽淳, 郑晓静, 胡海龙, 等. 喷墨打印像素化蓝光 OLED 器件 [J]. 光电子技术, 2021, 41(1): 45-49.  
Qiu L C, Zheng X J, Hu H L, et al. Inkjet printing pixelated blue OLED devices [J]. Optoelectronic Technology, 2021, 41(1): 45-49.
- [7] He W, Dong X H, Zhou J G, et al. Manipulation of the size of polystyrene spheres as the templates for internal light out-coupling structures of a white organic light-emitting diode [J]. Journal of Materials Chemistry C, 2021, 9(21): 6923-6929.
- [8] Abbasi F, Ghorashi S M B, Karimzadeh E, et al. Investigating the effect of Ag and Au nanostructures with spherical and rod shapes on the emission wavelength of OLED [J]. Plasmonics, 2021, 16(5): 1841-1848.
- [9] 肖艳. 表面等离子增强效应在有机发光二极管 (OLED) 中的应用 [D]. 苏州: 苏州大学, 2013: 11-21.  
Xiao Y. Applications of surface plasmons polarization in organic light emitting diodes [D]. Suzhou: Soochow University, 2013: 11-21.
- [10] Fuchs C, Schwab T, Wiczorek M, et al. Surface plasmon polariton modification in top-emitting organic light-emitting diodes for enhanced light outcoupling [J]. Proceedings of SPIE, 2014, 9183: 91831Z.
- [11] 张雅男, 詹楠, 邓玲玲, 等. 利用银纳米立方增强效率的多层溶液加工白光有机发光二极管 [J]. 物理学报, 2020, 69(4): 20191526.  
Zhang Y N, Zhan N, Deng L L, et al. Efficiency improvement in solution-processed multilayered phosphorescent white organic light emitting diodes by silica coated silver nanocubes [J]. Acta Physica Sinica, 2020, 69(4): 20191526.
- [12] Wang S L, Yang J L, Xu T, et al. Highly efficient and foldable top-emission organic light-emitting diodes based on Ag-nanoparticles modified graphite electrode [J]. Organic Electronics, 2019, 64: 146-153.
- [13] Xu T, Gong C L, Wang S L, et al. Ultraviolet-durable flexible nonfullerene organic solar cells realized by a hybrid nanostructured transparent electrode [J]. Solar RRL, 2020, 4(5): 1900522.
- [14] Lüder H, Gerken M. FDTD modelling of nanostructured OLEDs: analysis of simulation parameters for accurate radiation patterns [J]. Optical and Quantum Electronics, 2019, 51(5): 1-20.
- [15] Mann V, Rastogi V. Dielectric nanoparticles for the enhancement of OLED light extraction efficiency [J]. Optics Communications, 2017, 387: 202-207.
- [16] Pan S H, Yu H, Zhu Z Q, et al. Toward improved device efficiency and stability of organic light-emitting diodes via external pressure treatment [J]. Physica Status Solidi, 2021, 218(14): 2100120.
- [17] Lajaunie L, Boucher F, Dessapt R, et al. Strong anisotropic influence of local-field effects on the dielectric response of  $\alpha$ -MoO<sub>3</sub> [J]. Physical Review B, 2013, 88(11): 115141.
- [18] Lin B Y, Lin T C, Chiu T L, et al. Room-temperature corrugated indium zinc oxide anode to achieve high-efficiency blue phosphorescent organic light-emitting diodes [J]. Organic Electronics, 2021, 96: 106237.
- [19] 季渊, 龚淑萍, 穆廷洲, 等. 基于亮度衰减模型的硅基 OLED 微显示器寿命研究 [J]. 光学学报, 2021, 41(19): 1923003.  
Ji Y, Gong S P, Mu T Z, et al. Lifetime of OLED-on-silicon microdisplay based on luminance decay model [J]. Acta Optica Sinica, 2021, 41(19): 1923003.
- [20] Darzinezhad K, Amini M M, Mohajerani E, et al. Architecture of new rare earth metal complexes as precursors for the fabrication of a new class of OLEDs with blue shift fluorescence [J]. Zeitschrift Für Anorganische Und Allgemeine Chemie, 2021,

647(5): 456-462.

- [21] 卫炳铄. 纳米银对蓝光 OLED 器件性能及色稳定性的影响 [D]. 上海: 华东理工大学, 2018: 30-45.  
Wei B S. Effects of the Ag nanoparticles on the efficiency and color stability of the blue light phosphorescent organic light emitting diodes [D]. Shanghai: East China University of Science and

Technology, 2018: 30-45.

- [22] 卫庆庆. 基于表面等离子体共振的 OLED 器件研究 [D]. 合肥: 合肥工业大学, 2018: 25-36.  
Wei Q Q. Research on performance of OLED devices based on surface plasmon resonance [D]. Hefei: Hefei University of Technology, 2018: 25-36.