

doi:10.3788/gzxb20134201.0001

一种改善红光顶发射 OLED 色纯度及角度依赖特性的方法研究

郭闰达, 王鹏, 陈宇, 岳守振, 赵毅, 刘式墉

(吉林大学 电子科学与工程学院 集成光电子学国家重点联合实验室吉林大学实验区, 长春 130012)

摘 要: 在 Si/SiO₂ 衬底上生长金属银作为阳极, 4,4,4-tris(3-methylphenylphenyl-amino)-triphenylamine(m-MTDATA); MoO_x/m-MTDATA/N, N-bis-(1-naphthyl)-N, N-diphenyl-1,1-biphenyl-4,4-diamine(NPB) 作为空穴注入及传输层, 发光层采用 4,4-N,N-dicarbazole-biphenyl(CBP) 掺杂磷光染料(1-(phenyl)isoquinoline)iridium(III) acetylanetonate(Ir(piq)₂(acac)) 的结构, 4,7-di-phenyl-1,10-phenanthroline(BPhen) 作为空穴阻挡层及电子传输层, 阴极为 LiF(1 nm)/Al(2 nm)/Ag(20 nm) 复合阴极结构. 通过在光取出的复合阴极上方生长一层 CBP 光学覆盖层, 有效地改善了复合阴极膜系的透射率, 从而改善了顶发射结构的光学耦合输出特性, 在提高器件的正向发光效率的同时还使色坐标往深红光区移动. 并且生长光学覆盖层结构的器件角度依赖特性明显得到改善, 这对于制作高显示质量的显示器件具有重要意义. 在原有结构的基础上增加 20 nm 的 NPB 掺杂磷光染料 Ir(piq)₂(acac) 作发光层, 从而得到双发光层结构为 NPB:Ir(piq)₂(acac)(1%, 20 nm)/CBP:Ir(piq)₂(acac)(1%, 20 nm). 由于 NPB 具有较高的空穴迁移率, 避免了由于光学厚度的增加而引起器件工作电压的大幅升高, 而双发光层的结构有利于增大激子复合区域, 提高辐射复合几率, 减少非辐射损耗, 实现主客体之间高效的三线态能量传递, 相对单发光层顶发射结构, 双发光层结构不仅提高了器件的发光效率, 而且改善了器件的色坐标.

关键词: 红光顶发射有机电致发光器件; CBP 覆盖层; 双发光层; 色纯度; 角度依赖特性

中图分类号: TN383.1

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2013)01-0001-6

A Method for Improving the Color Purity and Angle-dependent Character of Red Top-emitting Organic Light-emitting Device

GUO Run-da, WANG Peng, CHEN Yu, YUE Shou-zhen, ZHAO Yi, LIU Shi-yong

(State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics, College of Electronic Science and Engineering, Jilin University, Changchun 130012, China)

Abstract: Ag was deposited onto Si/SiO₂ substrate as anode, 4,4,4-tris(3-methylphenylphenyl-amino)-triphenylamine (m-MTDATA); MoO_x/m-MTDATA/N, N-bis-(1-naphthyl)-N, N-diphenyl-1,1-biphenyl-4,4-diamine(NPB) were used as hole-injected layer and hole-transporting layer, respectively. 4,4-N,N-dicarbazole-biphenyl(CBP) doped with (1-(phenyl)isoquinoline)iridium(III) acetylanetonate(Ir(piq)₂(acac)) was chosen as emitting layer. 4,7-di-phenyl-1,10-phenanthroline(BPhen) worked as hole-blocking layer and electronic-transporting layer. LiF(1 nm)/Al(2 nm)/Ag(20 nm) were composite cathode. In order to improve the outcoupling character of the top-emitting device, an organic CBP layer was introduced above the cathode. Appropriate use of the optical outcoupling layer is helpful for improving the transmittance of the

基金项目: 国家重点基础研究发展计划(No. 2010CB327701)和国家自然科学基金(No. 60977024)资助

第一作者: 郭闰达(1988-), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为有机电致发光器件. Email: guorunda0000@163.com

导师(通讯作者): 赵毅(1968-), 男, 教授, 博士, 主要研究方向为有机光电器件. Email: zhao_yi@jlu.edu.cn

收稿日期: 2012-09-03; **录用日期:** 2012-10-18

composit cathode film system, and caused the color of the emitting light moved to deep-red region. The angle-dependent properties of the devices were also investigated and the ones with optical outcoupling layer show better performance. And it is very meaningful to the production of high-quality displays. In further study, another 20 nm NPB doped with $\text{Ir}(\text{piq})_2(\text{acac})$ was introduced to form dual emitting-layer structure, and while the driving voltage of the devices did not significant increase due to the relative high hole mobility of NPB. Meanwhile efficient triplet energy transfer between the host and guest is obtained, the recombination zone is broadened and the non-radiative losses is reduced, seen from the experimental, the current efficiency and color purity are both improved for the dual emitting-layer devices compared with the single emitting-layer structures.

Key words: Top-emitting organic light-emitting device; CBP capping layer; Dual emitting layer; Color purity; Angle-dependent character

0 引言

有机电致发光器件(Organic Light-Emitting Diode, OLED)以其驱动电压低、工作电流小、发光效率高、功耗低等诸多优点被认为是最有潜力的平板显示技术之一^[1-3]. OLED 不仅能够适应制备大面积显示器的需要,而且在微型显示领域也有着非常广泛的应用前景^[4]. 与普通的底发射器件相比,顶发射有机电致发光器件(Top-Emitting Organic Light-Emitting Diode, TEOLED)由于其本身的结构特点,像素驱动电路、总线等可以制作在显示区域的下方,从而避免了驱动电路与显示区域互相竞争的问题,使得器件的开口率大大提高;并可以制作在硅基衬底上,从而可制成硅上微显示器等独特结构,在显示尤其是微显示领域占据了重要的位置. 同时顶发射器件制作的显示屏具有高分辨率下串扰低、信息含量高等优点,使得顶发射器件受到越来越多的关注^[5-8].

众所周知,顶发射器件中不可避免的存在微腔效应,虽然利用微腔效应可以在一定程度上提高器件的正向光取出效率,实现光谱窄化等^[9-10],但是在提高总的发光性能方面还面临许多问题. 同时,由于微腔效应导致顶发射器件出射光角度依赖特性严重,为了获得良好的显示效果,研究提高 TEOLED 器件发光性能的方法十分迫切. 本文立足于红光顶发射有机电致发光器件,在保证器件具有良好电学性能的前提下,寻找改善器件色纯度及改善角度依赖特性的方法.

本文利用红色磷光染料(1-(phenyl)isoquinoline) iridium(III) acetylanetonate($\text{Ir}(\text{piq})_2(\text{acac})$)作为发光材料制备了 A、B 两组红光顶发射有机电致发光器件,采用对比研究的实验方法,结合光学覆盖层结构及双发光层结构,最后得到优化的红光顶发射器件,实现了色纯度的改善、角度依赖特

性的改善,并且光取出效率和电流效率都有一定程度的提高.

1 实验

实验中首先将 ITO 衬底分别用丙酮、乙醇、去离子水反复擦洗,再用丙酮、乙醇、去离子水分别超声清洗 10 min,放入烘箱内烘干(约 10 min),然后放入紫外烘箱紫外臭氧处理 10 min. 将处理好的衬底送入真空镀膜机中. 将有机材料分别放在不同的蒸发源(石英坩埚)中,每个蒸发源的温度可以单独控制. 按设计的结构分别生长不同的有机材料层,并且在生长过程中,系统的真空度维持在 4.5×10^{-4} Pa 左右. 材料生长的厚度和生长速率由膜厚仪实时监控,生长速率控制在 0.1 nm/s 左右. 器件的电致发光光谱、色坐标与电压-电流-亮度曲线由美国 PR650 亮度、光谱测试仪和美国 Keithley-2400 测试仪组成的测试系统在大气环境下进行.

实验中选用 Si/SiO₂ 衬底上生长金属银作为阳极, 4, 4, 4-tris(3-methylphenylphenyl-lamino)-triphenylamine (m-MTDATA); MoO_x/m-MTDATA/N, N-bis-(1-naphthyl)-N, N-diphenyl-1,1-biphenyl-4,4-diamine (NPB) 作为空穴注入及传输层,发光层采用 4,4-N,N-dicarbazole-biphenyl (CBP)母体掺杂磷光染料 $\text{Ir}(\text{piq})_2(\text{acac})$ 的结构, 4,7-di-phenyl-1,10-phenanthroline (BPhen) 作为电子传输层以及空穴阻挡层材料,阴极为 LiF/Al/Ag 复合阴极结构,在阴极生长的光学覆盖层材料选择为 CBP. 设计了一组双发光层结构的器件,在靠近空穴传输层一侧生长了 NPB 作为母体掺杂磷光染料 $\text{Ir}(\text{piq})_2(\text{acac})$ 的发光层,器件结构为

Si/SiO₂/Ag (50 nm)/m-MTDATA : MoO_x (3 : 1, 10 nm)/ m-MTDATA (35 nm)/NPB (5 nm)/CBP; $\text{Ir}(\text{piq})_2(\text{acac})$ (1%, 20 nm)/BPhen

(40 nm)/LiF(1 nm)/Al(2 nm)/Ag(20 nm)/
Device A without
 Si/SiO₂/Ag(50 nm)/m-MTDATA : MoO_x
 (3 : 1, 10 nm)/ m-MTDATA (35 nm)/NPB
 (5 nm)/CBP;Ir(piq)₂(acac)(1%, 20 nm)/BPhen
 (40 nm)/LiF(1 nm)/Al(2 nm)/Ag(20 nm)/CBP
 (50 nm) Device A with
 Si/SiO₂/Ag(50 nm)/m-MTDATA : MoO_x
 (3 : 1, 10nm)/ m-MTDATA (35 nm)/NPB
 (5 nm)/NPB;Ir(piq)₂(acac)(1%, 20 nm)/CBP;Ir
 (piq)₂(acac)(1%, 20 nm)/BPhen(40 nm)/LiF
 (1 nm)/Al(2 nm)/Ag(20 nm)/
 Device B without
 Si/SiO₂/Ag(50 nm)/m-MTDATA : MoO_x
 (3 : 1, 10 nm)/ m-MTDATA (35 nm)/NPB
 (5 nm)/NPB;Ir(piq)₂(acac)(1%, 20 nm)/CBP;Ir
 (piq)₂(acac)(1%, 20 nm)/BPhen(40 nm)/LiF
 (1 nm)/Al(2 nm)/Ag(20 nm)/CBP(50 nm)
 Device B with

2 结果与讨论

实验中制备的 A 组顶发射红光器件,空穴注入、传输层,发光层及电子传输层的设计借鉴了一般的底发射 OLED 器件的结构,但对于顶发射器件,由于底部的高反射电极和顶部的半透明电极(阳极金属银电极,阴极则采用了铝银复合电极)形成一个谐振腔,谐振腔厚度的变化对于出光颜色具有一定的限制作用.红光辐射波长较长,如果有机层厚度过薄会导致辐射波长特征模式受到限制而影响器件的色纯度^[11].但是器件厚度过厚又可能导致器件开启电压的升高^[12],这对于实际应用中制备显示器件(尤其是微显示器)十分不利,因此在综合考虑各方面的影响下设计了 B 组器件.

首先测试了器件的亮度、效率等性能参量,图 1 为亮度与电流密度关系、电流效率与亮度关系曲线.可以看出 Device B without 与 Device A without 相比、Device B with 与 Device A with 相比器件的亮度、效率等方面都有提高.这是因为 B 组器件在结构上采用了双发光层结构,可以实现主客体之间高效的三线态能量传递,同时双发光层的结构有利于增大激子复合区域,提高辐射复合几率,减少非辐射损耗,并且由于 NPB 具有较高的空穴迁移率,因此避免了由于光学厚度的增加而引起器件工作电压的大幅升高.

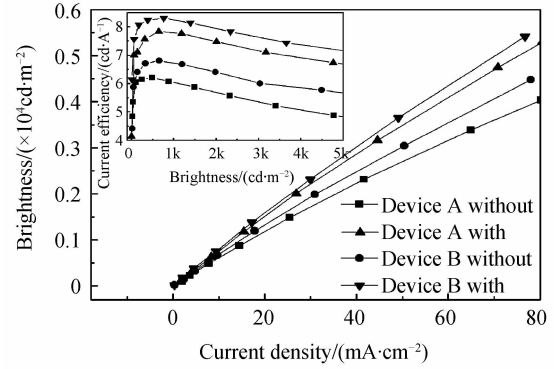


图 1 A、B 两组器件的亮度-电流密度关系曲线(左上角内部小图为电流效率-亮度关系曲线)
 Fig.1 Brightness-Current density characteristics of A, B two groups of devices, and the upper left-hand inset shows the Current efficiency-Brightness characteristics

从图 1 中也可以看出在相同电流密度下具有覆盖层的器件(Device A with, Device B with)亮度大于未生长覆盖层的器件(Device A without, Device B without),在相同亮度下具有覆盖层的器件电流效率大于未生长覆盖层的器件.这可能是因为一方面覆盖层材料 CBP 生长温度较低,不会对底部有机层退火而影响器件性能,并且对红光波段的光吸收很低^[13-14],另一方面生长光学覆盖层改变了阴极半透明复合电极的透射率使得光取出效率增大,利用式

$$I_{\text{cav}}(\lambda) \propto \frac{\left[1 + R_1 + 2\sqrt{R_1} \cos\left(\frac{4\pi L_1}{\lambda} + \phi_{\text{bm}}\right)\right]}{1 + R_1 R_2 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos\left(\frac{4\pi L_1}{\lambda} + \phi_{\text{bm}} + \phi_{\text{tm}}\right)} T_2$$

进行了计算^[15].A 组中 Device A with 与 Device A without 的 $I_{\text{cav}}(\lambda)$ 比值为 2.239 4,B 组中 Device B with 与 Device B without 的 $I_{\text{cav}}(\lambda)$ 比值为 2.2400.计算得到的结果与实验现象一致,即生长光学覆盖层的器件光取出效率增大,这可以解释图 1 中 A、B 两组器件各自的亮度-电流关系与效率-亮度关系(式中 L_1 是激子主要复合区到底反射电极的距离, L 是有机层光学长度, R_1 、 R_2 这里分别指底阳极与顶阴极的反射率, T_2 为顶阴极的透射率, ϕ_{tm} 、 ϕ_{bm} 分别为顶电极和底电极的反射相移.利用传输矩阵的基本方法及公式利用计算机进行计算^[16].计算结果为:A 组中 $L_1 = 28.9017$, $L = 64.1618$, $R_1 = 0.42$, $R_2 = 0.6497$ (Device A without); 0.4637 (Device A with), $\phi_{\text{tm}} = 0.8381$, $\phi_{\text{bm}} = 0.8381$, $T_2 = 0.1853$ (Device A without); 0.3721 (Device A with).B 组中 $L_1 = 40.4624$, $L = 75.7225$, $R_1 = 0.42$, $R_2 = 0.6497$ (Device B without); 0.4637 (Device B with), $\phi_{\text{tm}} = 0.8381$, $\phi_{\text{bm}} = 0.8381$, $T_2 = 0.1853$ (Device B without); 0.3721 (Device B with).

图2为器件亮度在 $1\ 000\ \text{cd}/\text{m}^2$ 下正方向的出射光归一化光谱.从图中可以看出,生长了CBP覆盖层的器件(Device A with, Device B with)其出射光谱相对未生长覆盖层的器件(Device A without, Device B without)的出射光谱明显红移,同时光谱的半峰宽只有略微的变化,这可能是由于生长覆盖层对顶部阴极复合电极的反射相移及透射率产生影响^[17],削弱了器件的微腔效应导致的.在具有微腔结构的器件中,微腔的选模特性会严重影响器件出射光谱,而磷光染料 $\text{Ir}(\text{pic})_2(\text{acac})$ 的本征发光峰在 $624\ \text{nm}$ 处^[18].虽然所设计的器件半透明阴极只有 $20\ \text{nm}$,微腔效应较弱,但仍然会导致出射光峰值波长偏离染料发射光的本征峰值波长.而通过生长合适厚度的CBP覆盖层对顶部半透明复合阴极膜系进行调节,进一步削弱微腔效应的影响,使得出射光谱峰值波长明显红移,这对于提高器件的色纯度是有利的.

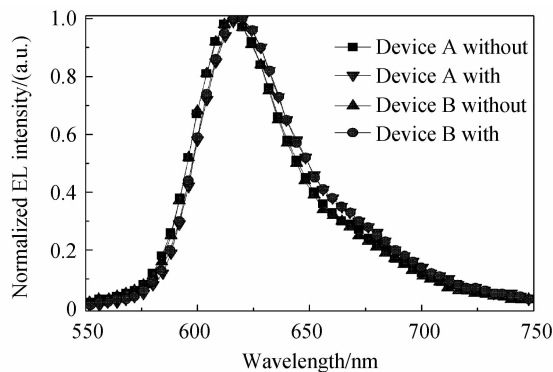


图2 亮度为 $1\ 000\ \text{cd}/\text{m}^2$ 时的归一化光谱

Fig. 2 The Normalized EL intensity under $1\ 000\ \text{cd}/\text{m}^2$

图3给出了A、B两组器件的CIE色坐标随亮度的变化曲线.可以看出两组器件都具有较好的色坐标稳定性,器件的CIE坐标值从起始亮度到亮度超过 $5\ 000\ \text{cd}/\text{m}^2$ 并未产生严重的漂移.

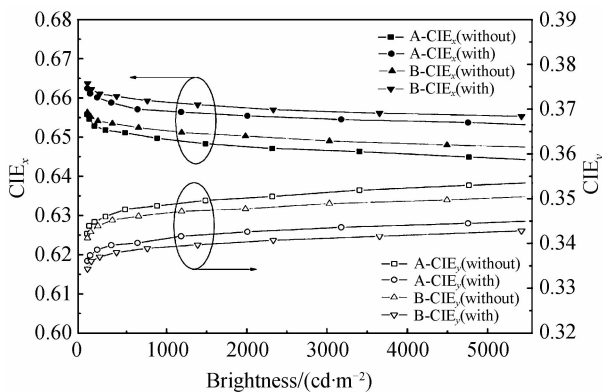


图3 色坐标随亮度变化关系

Fig. 3 The CIE coordinate-Brightness

为了进一步考察器件的色纯度的变化规律,给出了A、B两组器件在 $1\ 000\ \text{cd}/\text{m}^2$ 亮度下的CIE色坐标,如图4中右上角小图所示,在实际应用中,色纯度的考察一般采用NTSC标准.从图4中可以明显地看出具有光学覆盖层的器件其色坐标更靠近NTSC标准红光点,这说明采用合适的光学覆盖层可以有效地提高器件的色纯度.同时还发现具有双发光层结构的器件发射光相比单发光层结构的器件发射光更偏向深红光区,这是因为B组器件的光学厚度更接近微腔的谐振波长,有利于辐射光特征模式的出射.因此得到优化后的Device B with结构相对于一般结构出射光的色纯度有了一定程度的提高.

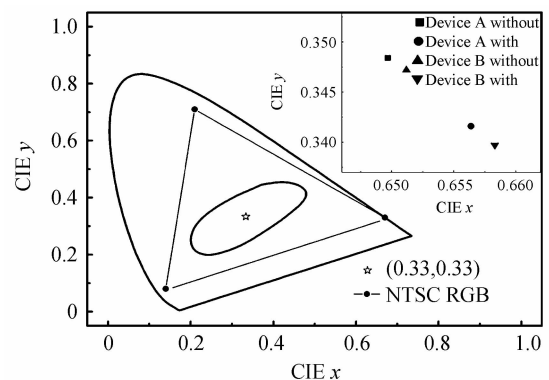


图4 NTSC标准及CIE1931色度图,右上角内部小图
为亮度 $1\ 000\ \text{cd}/\text{m}^2$ 时A、B两组器件色坐标

Fig. 4 NTSC standard and CIE 1931 chromaticity, upper right-hand inset show the CIE coordinates under $1\ 000\ \text{cd}/\text{m}^2$ of A、B two groups of devices

A、B两组器件在不同角度下的光谱如图5.从图中可以明显地看出具有覆盖层结构的器件,发射光角度依赖特性明显被削弱了,而不具有光学覆盖层结构的器件,其发光光谱具有明显的随角度变化的特点.这是由于在较薄的半透明阴极上方生长非电学性质的覆盖层,可以实现抑制多光束干涉从而达到调节光出射性质的目的.已经有文献报道,顶发射器件光取出特性可以受覆盖层材料折射率、光吸收特性及覆盖层厚度的调控^[19].出射光空间光谱强烈的依赖于器件的光学结构,尤其是有有机层的厚度和电极的反射率,从实验中看出对于没有覆盖层的器件,发射光谱的半峰宽随角度增大而增大,并且光谱的峰值波长也有略微的漂移,而生长了光学覆盖层的器件,发射光谱的角度依赖特性明显改善,随着角度的变化,出射光半峰宽改变不大,同时峰值波长也没有出现明显的漂移现象.这对于显示应用领域,尤其是在微显示、柔性显示等方面有着很重要的意义.

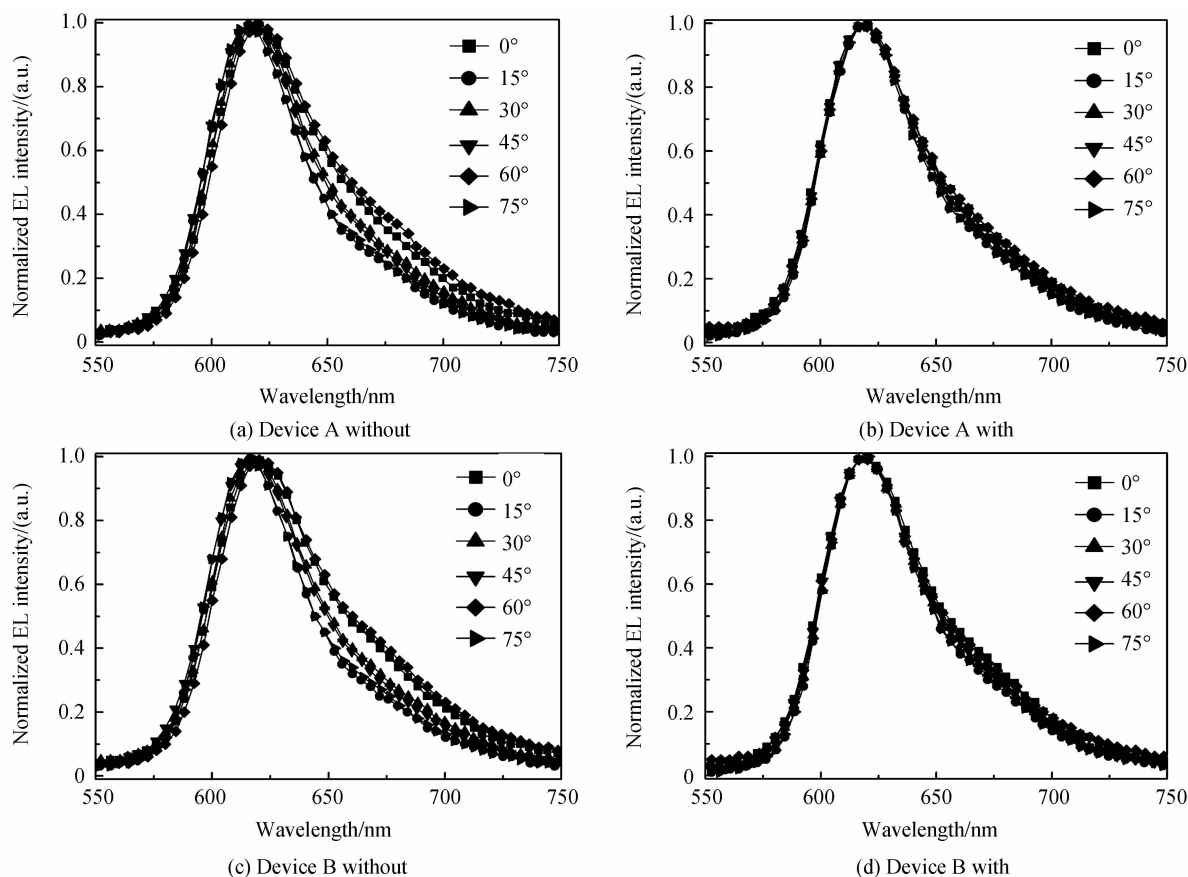


图 5 光谱的角度变化特性

Fig. 5 The EL spectra with viewing angle

3 结论

通过理论分析和实验研究,得到了能够提高正向光耦合输出效率及改善出射光色纯度的具体方法,而且也在实验中证明了通过生长合适的覆盖层可以改善顶发射器件的角度依赖特性,得到了基本不随角度变化的出射光光谱。通过光学覆盖层结合双发光层结构的设计,得到的优化的 Device B with 器件在 $1\ 000\ \text{cd}/\text{m}^2$ 亮度下电流效率为 $8.3\ \text{cd}/\text{A}$, 色坐标位于 $(0.658, 0.378)$, 并且实现了发射光光谱基本不随观察角度变化的良好结果。

参考文献

[1] BERNARD G, PHILIPPE LE R, CHRISTOPHE P. Organic light-emitting diode (OLED) technology: materials, devices and display technologies[J]. *Polymer International*, 2006, **55**(6): 572-582.

[2] SIMONE C, OLIVIER R, DAE-GYU M, *et al.* High-efficiency organic electroluminescent devices using an organoterbiem emitter[J]. *Advanced Materials*, 2000, **12**(21): 1591-1594.

[3] RIEL H, KARG S, BEIERLEIN T, *et al.* Phosphorescent top-emitting organic light-emitting devices with improved light outcoupling[J]. *Applied Physics Letters*, 2003, **82**(3): 466-468.

[4] XIE G H, ZHANG Z S, XUE Q, *et al.* Highly efficient top-emitting white organic light-emitting diodes with improved contrast and reduced angular dependence for active matrix

displays[J]. *Organic Electronics*, 2010, **11**(12): 2055-2059.

[5] HAN S, FENG X, LU Z H, *et al.* Transparent-cathode for top-emission organic light-emitting diodes [J]. *Applied Physics Letters*, 2003, **82**(16): 2715-2717.

[6] KIM H K, LEE K S, KWON J H, *et al.* Transparent indium zinc oxide top cathode prepared by plasma damage-free sputtering for top-emitting organic light-emitting diodes[J]. *Applied Physics Letters*, 2006, **88**(1): 12103-12105.

[7] HAN S, HUANG C, LU Z H, *et al.* Color tunable metal-cavity organic light-emitting diodes with fullerene layer[J]. *Journal of Applied Physics*, 2005, **97**(9): 317-322.

[8] MA J, PIAO X C, LIU J, *et al.* Optical simulation and optimization of ITO-free top-emitting white organic light-emitting devices for lighting or display [J]. *Organic Electronics*, 2011, **12**(6): 923-935.

[9] CHEN S F, ZHAO Z Y, JIE Z H, *et al.* A green top-emitting organic light-emitting device with improved luminance and efficiency[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2006, **39**(17): 3738-3741.

[10] MA Feng-ying, ZHANG Chun-yu, LIU Xing-yuan, *et al.* Red emission from microcavity organic light-emitting diode [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2004, **33**(7): 835-837.

马凤英, 张春玉, 刘星元, 等. 有机微腔红光发射器件[J]. *光子学报*, 2004, **33**(7): 835-837.

[11] HO C L, WONG W Y, GAO Z Q, *et al.* Red-light-emitting iridium complexes with hole-transporting 9-arylcarbazole moieties for electrophosphorescence efficiency/ color purity trade-off optimization[J]. *Advanced Functional Materials*, 2008, **18**(2): 319-331.

[12] XIE G H, MENG Y L, WU F M, *et al.* Very low turn-on voltage and high brightness tris-(8-hydroxyquinoline)

- aluminum-based organic light-emitting diodes with a MoO_x p-doping layer[J]. *Applied Physics Letters*, 2008, **92**(9): 093305-1-3.
- [13] HE J, LIU H, DAI Y, *et al.* Nonconjugated carbazoles: A series of novel host materials for highly efficient blue electrophosphorescent OLEDs[J]. *Society*, 2009, **113**(16): 6761-6767.
- [14] LEI G, WANG L, QIU Y. Multilayer organic electrophosphorescent white light-emitting diodes without exciton-blocking layer Multilayer organic electrophosphorescent white light-emitting diodes without exciton-blocking layer[J]. *Applied Physic Letters*, 2006, **88**(10): 103508-1-3.
- [15] CHEN S, KWOK H S. Alleviate microcavity effects in top-emitting white organic light-emitting diodes for achieving broadband and high color rendition emission spectra [J]. *Organic Electronics*, 2011, **12**(12): 2065-2070.
- [16] CHEN S F, MEI Q B, TANG C, *et al.* Influence of BCP outcoupling layer on electroluminescent performances in top-emitting organic light-emitting devices [J]. *Journal of Nanjing University of Posts and Telecommunications (Natural Science)*, 2008, **28**(1): 35-40.
- 陈淑芬, 梅群波, 唐超, 等. BCP 增透膜对顶发射器件发光性能的影响[J]. 南京邮电大学学报(自然科学版), 2008, **28**(1): 35-40.
- [17] CHEN S, Li X, HUANG W. Blue top-emitting organic light-emitting devices using a 2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline outcoupling layer [J]. *Organic Electronics*, 2008, **9**(6): 1112-1117.
- [18] XIE W F, ZHAO Y, LI C, *et al.* High-efficiency electrophosphorescent white organic light-emitting devices with a double-doped emissive layer [J]. *Emicond Sci Technol*, 2005, **20**(12): 326-329.
- [19] WU C C, LIN C L, HSIEH P Y, *et al.* Methodology for optimizing viewing characteristics of top-emitting organic light-emitting devices[J]. *Applied Physics Letters*, 2004, **84**(20): 3966-3968.

• 下期预告 •

GaN 结构相变、电子结构和光学性质

李建华, 崔元顺, 陈贵宾

(淮阴师范学院 物理与电子电气工程学院, 江苏 淮安 223001)

摘要: 运用第一性原理平面波赝势和广义梯度近似方法, 对纤锌矿结构和氯化钠结构 GaN 的状态方程及其在高压下的相变进行计算研究, 分析相变点附近的电子态密度、能带结构和光学性质的变化机制. 通过状态方程和焓相等原理得到 GaN 从纤锌矿到氯化钠结构的相变压强分别为 43.9 Gpa 和 46.0 Gpa; 在相变的过程中, GaN 由典型的直接带隙半导体转变为间接带隙半导体材料; 氯化钠结构 GaN 相比于纤锌矿结构, 介电函数主峰值增强, 本征吸收边明显往高能方向移动, 氯化钠结构 GaN 在低能区域的光学性质差于纤锌矿结构.

关键词: 氯化镓; 相变; 电子结构; 光学性质