

# 薄膜电致发光器件中电子的谷间分布\*

赵 辉 王永生 徐 征 徐叙

(北方交通大学光电子技术研究所 北京 100044)

**摘要** 基于对谷间散射过程的讨论,利用 Monte Carlo 方法研究了 ZnS 型薄膜电致发光器件中电子的谷间分布. 得出了谷间分布的瞬态过程,不同电场下的谷间分布. 这些结果可作为研究电致发光过程的基本数据. 同时,本文提出了高能谷的能量存储效应.

**PACC:** 7860, 7220

## 1 引言

薄膜电致发光显示技术是很有发展前途的平板显示技术之一. 以 ZnS:Mn 为发光层的单色的薄膜电致发光器件(TFELD)已发展成熟并已实现商业化. 目前,TFELD 的研究重点是蓝光亮度的提高,从而实现彩色及至全色 TFELD. 电致发光(EL)是利用高场加速电子,使其碰撞激发发光中心从而实现发光的物理过程. 电子在高场下的输运是 EL 的基本物理过程,它决定着电子能否达到引起发光中心激发(或离化)的能量,是 EL 过程的关键. 在输运过程中,电子会被各种散射机制散射,从而影响着电子加速的效果. ZnS 具有多能谷的能带结构,谷间散射(电子在不同能谷之间的转移)对电子加速过程有较大影响<sup>[1]</sup>. 同时,谷间散射伴随着电子动能和势能的转化,这将影响到电子的动能分布,从而影响 EL 过程. 不同能谷中的电子具有不同的物理性质,电子在各能谷间的分布会对 EL 过程产生较大的影响. 关于 TFELD 中电子的谷间分布,未见报道. 本文对 ZnS 型 TFELD 中电子的谷间分布进行了研究.

## 2 理论分析

ZnS 的导带具有 3 个能谷,分别为  $\Gamma$  能谷、L 能谷和 X 能谷. 采用非抛物多能谷模型,其谷间散射速率为<sup>[2]</sup>

$$S(E) = \frac{D_{if}^2 Z_f (m_{if}^*)^{3/2}}{\sqrt{2\pi\hbar^2 \rho E_{\text{phonon}}}} (1 + 2a_i \Delta E) \sqrt{\Delta E (1 + a_i \Delta E)} \begin{pmatrix} N_q \\ N_{q+1} \end{pmatrix}$$

式中  $D_{if}$  为谷间形变势;  $Z_f$  为等价谷数目;  $\rho$  为质量密度 ( $4.08\text{g/cm}^3$ ); 角标中  $i, f$  分别表示初态谷和末态谷;  $\Delta E = E \pm E_{\text{phonon}} - E_{if}$ ,  $E$  为电子能量;  $E_{\text{phonon}}$  为参与谷间散射的声子的能量;  $E_{if}$  为谷底能量差;  $N_q, N_{q+1}$  为声子数. 谷间散射过程中可能吸收声子,也可能发射声子. “+”

\* 国家“863”高技术计划资助项目

赵 辉 男,1971 年出生,博士生

1998-12-04 收到,1999-03-09 定稿

号及  $N_{q-}$  对应吸收声子过程,“-”号及  $N_{q+}$  对应发射声子过程

利用上述公式,我们计算了 300K 下 ZnS 中各种谷间散射的速率随电子能量变化 所用的参数见表 1 谷间散射速率大致在  $10^{12} \sim 10^{15}/s$  左右 随着电子能量的增加,谷间散射速率有较大的增长  $\Gamma$  谷的谷底低于 L 谷和 X 谷,由于能量守恒,从  $\Gamma$  谷向 X、L 谷的散射存在阈值能量,约 1.4eV 左右

表 1 谷间散射速率计算所用的参数值

参数	初态能谷	取值		
		$\Gamma$ 谷	L 谷	X 谷
$a_i/eV^{-1}$		0.690	0.650	0.360
$m_i^*/m_0$		0.28	0.222	0.40
$D_{ii}/(eV \cdot cm^{-1})$	$\Gamma$	0	$1 \times 10^9$	$1 \times 10^9$
	L	$1 \times 10^9$	$9 \times 10^8$	$9 \times 10^8$
	X	$1 \times 10^9$	$1 \times 10^9$	$9 \times 10^8$
$Z_f$		1	4	3
$E_{phonon}/eV$	$\Gamma$	0	0.0267	0.0279
	L	0.0279	0.0273	0.0279
	X	0.0267	0.0267	0.0273
$E_{ii}/eV$		---	1.449	1.454

研究 TFELD 的输运问题有两种方法: 幸运漂移模型<sup>[3,4]</sup>和蒙特卡罗方法<sup>[5,6]</sup> 前者通过唯象的方法研究宏观量之间的关系,后者则是通过模拟电子在材料中的微观过程,通过统计得出相应的宏观值 由于电子的谷间分布需要通过微观的角度研究,蒙特卡罗方法是唯一有效的方法

我们利用蒙特卡罗方法研究了 ZnS 型 TFELD 中电子的谷间分布 考虑的散射机制包括声学声子散射、极化光学声子散射、电离杂质散射及谷间散射 模拟的电子数目为 50000 这一电子数目经过检验,能保证统计结果的精确性和重复性

### 3 结果与讨论

在 TFELD 上加电压后,发光层与绝缘层界面处能级束缚的电子在电场作用下隧穿发射至发光层 发射出的电子能量较低,绝大部分在  $\Gamma$  谷 这些电子在发光层中电场的加速下能量增大,并开始向 L、X 谷转移, $\Gamma$  谷中的电子数目逐渐减少,如图 1 所示 经过约 0.2~0.3ps,谷间分布达到动态平衡 图 1 中同时给出了电子平均动能随时间的变化过程,其瞬态时间与谷间分布一致

我们研究了在不同场强下的瞬态过程(0.5~5.0MV/cm),它们大体相似 但谷间分布的稳态值却因场强而异 图 2 给

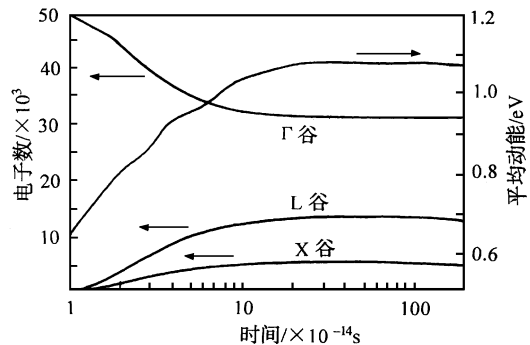


图 1 2.0MV/cm 电场下电子平均动能及谷间分布的瞬态过程

出了不同场强下稳态的谷间分布情况 随着场强的增大,  $\Gamma$  谷中电子数目逐渐减少, L、X 谷中的电子逐渐增多, 表明在总体上, 电子向高能谷转移 值得注意的是, 电子的谷间分布在电场较低时随电场变化明显, 当电场达到  $4 \sim 5 \text{ MV/cm}$  时, 趋于稳定 与此同时, 电子的平均动能随场强的增加而不断增大, 在  $4 \sim 5 \text{ MV/cm}$  处也未见饱和 这一现象可如下理解: 饱和现象是电场的加速作用与散射作用达到平衡的结果 当电场增大到可同谷间散射相平衡时, 谷间分布达到饱和; 而电子平均动能的饱和则需电场与各种散射速率的总和达到饱和, 因而需更高的电场

谷间散射过程伴随着电子动能与势能的转化 当电子由低能谷向高能谷转移时, 一部分动能转化为势能 在稳态分布下, 去掉电场, 动态平衡被破坏, 高能谷的电子向低能谷转移, 势能又转化为动能 因此, 高能谷对电子能量具有存储效应 图 3 给出了在  $2.0 \text{ MV/cm}$  电场作用下达到稳态分布的系统, 当电场消失时向新的稳态转化的过程 由图 3 可见, 当电场消失时, L、X 谷的电子减少,  $\Gamma$  谷的电子增多. 到  $0.25 \text{ ps}$  时, 谷间分布达到无电场时的稳态值 图中同时给出了电子动能随时间的变化过程(有谷曲线). 为表明高能谷对能量的存储效应, 我们计算了不存在高能谷电子分布情况下电子平均动能的衰减过程, 结果见图 3 中的“无谷曲线”. 比较两条曲线可知, 高能谷的能量存储效应使电子平均动能的衰减时间增加了 1 倍左右 我们没有见到过关于这一效应的报道, 对于如何利用这一效应改进 TFELD 的材料结构及操作条件, 还需进一步的研究

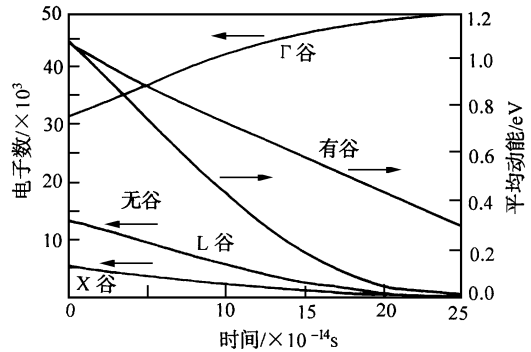
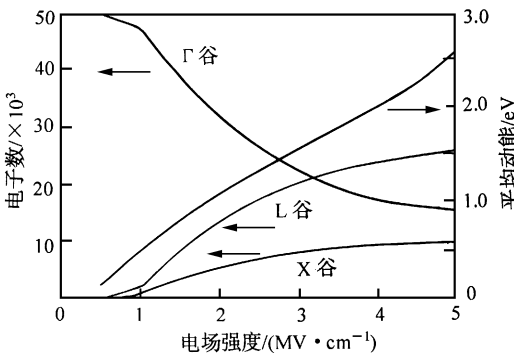


图 2 谷间分布及电子平均动能与场强的关系

图 3 高能谷的能量存储效应(初始电场  $2.0 \text{ MV/cm}$ )

上述结果为研究 TFELD 中的物理过程提供了基本的数据 例如, 在用解析的方法研究电子加速、碰撞激发、电子倍增等过程时, 一般认为大部分电子处在  $\Gamma$  谷而采用  $\Gamma$  谷中的参数进行计算, 如有效质量、非抛物因子等<sup>[7,8]</sup> 事实上, 根据我们的计算结果, 电子在其它能谷有相当的分布(如图 2, 当场强为  $2.0 \text{ MV/cm}$  时 L、X 两谷中约有 40% 的电子). 因此, 仅仅采用  $\Gamma$  谷中的参数会引入较大的误差 在这些研究中, 应当依据谷间分布的实际情况, 对有关参数进行加权平均 从而更好的描述实际物理过程

## 参 考 文 献

- [ 1 ] K. Bhattacharyya, S. M. Goodnick and J. F. Wager, *J. Appl Phys* , 1993, **73**: 3390
- [ 2 ] C. Jacoboni and R. Lugli, *The Monte Carlo method for semiconductor device simulation*, New York: Springer-Verlag Wien, 1989, 38,
- [ 3 ] B. K. Ridley, *J. Phys C: Solid State Phys* , 1983, **16**: 3373
- [ 4 ] E. Bringuier, *J. Appl Phys* , 1991, **70**: 4505
- [ 5 ] K. Brennan, *J. Appl Phys* , 1994, **75**: 628
- [ 6 ] R. Mach, *J. Cryst Growth*, 1990, **101**: 967.
- [ 7 ] E. Bringuier, *J. Appl Phys* , 1991, **70**: 4505
- [ 8 ] E. Bringuier, *Phys Rev. B*, 1994, **49**: 7974

## Intervalley Distribution of Electrons in Thin Film Electroluminescent Devices

Zhao Hui, Wang Yongsheng, Xu Zheng, Xu Xurong

*(Institute of Optoelectronic Technology, Northern Jiaotong University, Beijing 100044)*

Received 4 December 1998, revised manuscript received 9 March 1999

**Abstract** Based on the discussion about intervalley scattering process, intervalley distribution in ZnS-type thin film electroluminescent devices is investigated through Monte Carlo simulation. The transient process of intervalley transfer and the intervalley distribution under different electric fields are gained. These results could be used as the basic data on the study of electroluminescent process. Furthermore, we have proposed the energy storage effect of high valleys based on our calculations.

**PACC:** 7860, 7220