

第七届

## 全国大学生集成电路创新创业大赛

报告类型\*: 设计报告

参赛杯赛\*: 华大九天杯

作品名称\*: 高效快速准确的基于 XModel 工具的 OLED 建模  
及优化算法

队伍编号\*: CICC4039

团队名称\*: 想去重庆吃火锅的森刘刘

## 摘 要

有机半导体是近年来科学研究和产业开发方面最具有应用潜力的研究领域之一。有机电致发光器件 OLED 是一种利用多层有机薄膜结构产生电致发光的器件，它很容易制作，而且只需要低的驱动电压，这些主要的特征使得 OLED 在满足平面显示器的应用上显得非常突出。OLED 显示屏比 LCD 更轻薄、亮度高、功耗低、响应快、清晰度高、柔性好、发光效率高，能满足消费者对显示技术的新需求。全球越来越多的显示器厂家纷纷投入研发，大大的推动了 OLED 的产业化进程。

OLED 器件建模显得尤为重要，是各厂家设计制造新型性能优良的 OLED 屏幕的基础，也可以填补电路仿真中 OLED 器件的空缺。本设计是采用对 OLED 特性的分析，建立一种基于 TCLC 载流子传输模型的 OLED 的 I-V 特性的等效电路模型以及建立一种基于肖特基接触模型的 OLED 的 C-V 特性的物理模型。使用遗传算法和麻雀搜索算法相结合的混合优化算法对所构建的模型的表达式进行参数的提取与优化，进而构造出与实际 OLED 特性较为符合的模型。

# Abstract

Organic semiconductor is one of the most promising fields in scientific research and industrial development in recent years. Organic electroluminescent device (OLED) is a kind of device that generates electroluminescence by using multilayer organic thin film structure. It is easy to manufacture and only requires low driving voltage. These main characteristics make OLED stand out for planar display applications. Compared with LCD, OLED display is thinner and lighter, with high brightness, low power consumption, fast response, high resolution, good flexibility and high luminous efficiency, which can meet the new demand of consumers for display technology. More and more display manufacturers around the world have invested in research and development, greatly promoting the industrialization process of OLED.

OLED device modeling is particularly important, which is the basis for the design and manufacture of new OLED screens with good performance. It can also fill the vacancy of OLED devices in circuit simulation. Based on the analysis of OLED characteristics, this design establishes an equivalent circuit model of I-V characteristics of OLED based on TCLC carrier transmission model and a physical model of C-V characteristics of OLED based on Schottky contact model. A hybrid optimization algorithm combining genetic algorithm and sparrow search algorithm was used to extract and optimize the parameters of the constructed model expression, and then a model more consistent with the actual OLED characteristics was constructed.

## 目录

第一章 问题描述与算法概况 .....	1
1.1 问题描述 .....	1
1.1.1 问题背景 .....	1
1.1.2 基于赛题数据的说明 .....	1
1.1.3 研究目的 .....	3
1.2 算法概况 .....	3
第二章 OLED 器件的工作原理 .....	4
2.1 OLED 器件的基本工作原理 .....	4
2.1.1 OLED 的器件结构 .....	4
2.1.2 OLED 的基本发光机理 .....	6
第三章 OLED 器件模型设计 .....	8
3.1 基于 TCLC 载流子传输模型的 OLED 的 I-V 特性的等效电路模型 .....	8
3.1.1 OLED 的 TCLC 载流子传输模型 .....	8
3.1.2 OLED 的 I-V 特性的等效电路模型设计 .....	9
3.2 OLED 的 C-V 特性的物理模型的设计 .....	11
第四章 优化模型与算法实现 .....	15
4.1 IV 优化模型建立 .....	15
4.1.1 模型简化 .....	15
4.1.2 参数范围确定 .....	15
4.1.3 模型汇总 .....	16
4.2 CV 优化模型建立 .....	16
4.2.1 模型简化 .....	16
4.2.2 参数范围确定 .....	17
4.2.3 模型汇总 .....	17
4.3 算法实现 .....	18
4.3.1 数据预处理 .....	18
4.3.2 算法概述 .....	19
4.3.3 算法代码实现 .....	21
4.3.4 优化结果 .....	22
第五章 结果与分析 .....	25
5.1 拟合结果 .....	25
5.1.1 IV 的 case3 拟合结果 .....	25
5.1.2 CV 的 case3 拟合结果 .....	26
5.2 结果分析 .....	27
第六章 后续工作 .....	28
6.1 模型改进 .....	28
6.2 电容特性优化 .....	29
参考文献 .....	30

# 第一章 问题描述与算法概况

## 1.1 问题描述

### 1.1.1 问题背景

随着电子信息技术发展以及显示技术的革新，半导体显示器件在人们生活中逐渐变得更为重要。有机发光二极管 (Organic Light Emitting Diode, OLED)，又通常称为有机电致发光器件，是一种将电能直接转化为光能的半导体器件，它具有自发光、驱动电压低、显色域范围广、对比度高、宽视角、可柔性等独特的优势。正是由于这些独特的优势，OLED 在新型平板显示、面光源照明等领域有着极大的应用场景。

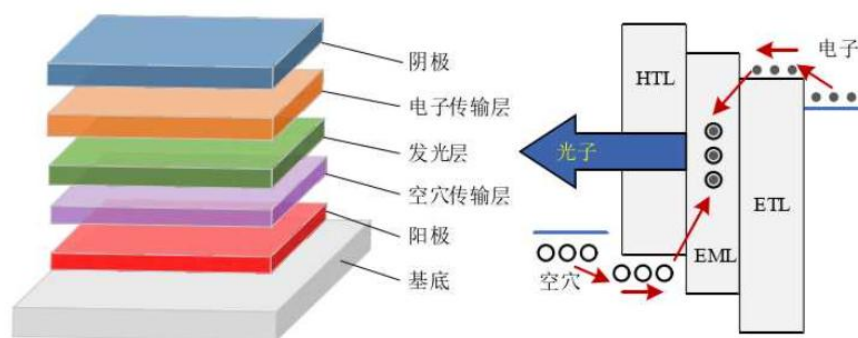


图 1.1 典型的堆叠膜层 OLED 器件结构及工作原理等效示意图

OLED 器件通常表现为由阳极、有机层以及金属阴极构成的三明治结构。典型 OLED 器件结构包含有阴极(Cathode)、电子传输层(ETL)、发光层(EML)、空穴传输层(HTL)、阳极(Anode)以及基底(Substrate)。在器件电极上施加偏置电压后，空穴将由阳极注入经空穴传输层传输至发光层最高占据分子轨道(HOMO)上，同时电子将由阴极注入经电子传输层传输至发光层最低未占据分子轨道(LUMO) [1]上，电子空穴在库仑力作用下形成激子，激子具有能量且通常不稳定，它将通过光能、热能的形式释放能量，使受激分子由激发态返回基态，激子跃迁回基态辐射发出光子也就实现了电能与光能之间的转化，以上也就是 OLED 器件的电致发光过程。

### 1.1.2 基于赛题数据的说明

本次赛题中的数据文件分为 case1、case2、case3，可以被划分为训练数据

和测试数据，其中 case3 为测试数据。

赛题所提供的数据为.meas 文件，其格式如图 1.2 所示。

```
condition{date=2020-03-30,type=Diode,ports=(p,n)}
page(name=Cj_Vpn,group=Diode,x=Vpn,y=Cj,ref_n=0){AREA=2000e-6,LEN=2000e-6,T=27}
curve{0}
-8      6.52e-10
-7.9    6.52e-10
-7.8    6.52e-10
...
7.9     8.86e-10
8       8.83e-10
```

图 1.2 数据格式样例

数据中包含了测试的日期、器件类型、端口、数据名称、组、坐标轴标签、面积、长度、温度等数据，使用 python 对数据进行读取，并绘制出 CV 和 IV 曲线。

对 case1\_IV.meas、case1\_IV.meas、case1\_IV.meas 的处理结果如图 1.3 所示。

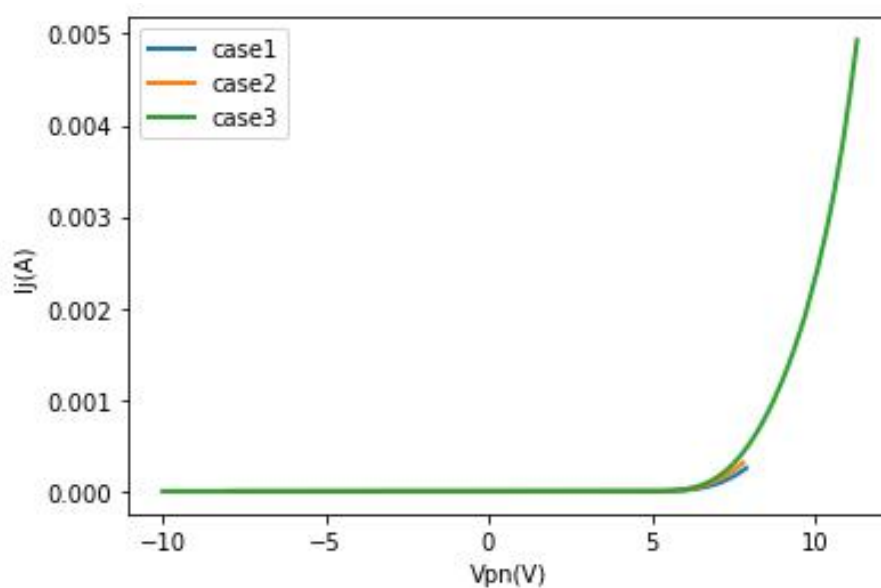


图 1.3 IV 数据曲线

对 case1\_CV.meas、case1\_CV.meas、case1\_CV.meas 的处理结果如图 1.4 所示。

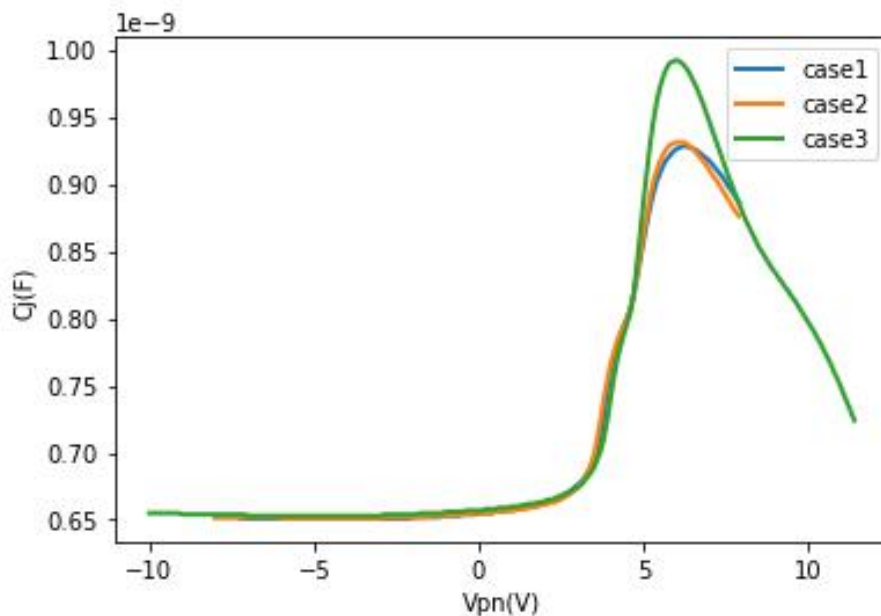


图 1.4 CV 数据曲线

### 1.1.3 研究目的

设计一套高效快速准确的基于 XModel 工具的 OLED 建模优化算法，建立包含器件基本 IV/CV 特性及基本器件效应、具有较好收敛性及扩展性的 OLED 模型。

## 1.2 算法概况

基于各种智能优化算法的优缺点，采用混合优化方式求解本赛题的优化问题。

遗传算法具有良好的全局搜索能力，可以快速地将解空间中的全体解搜索出，而不会陷入局部最优解的快速下降陷阱；并且利用它的内在并行性，可以方便地进行分布式计算，加快求解速度。但是遗传算法的局部搜索能力较差，导致单纯的遗传算法比较费时，在进化后期搜索效率较低。在实际应用中，遗传算法容易产生早熟收敛的问题。

麻雀搜索算法的局部搜索能力极强，收敛速度较快，但全局搜索能力较弱且跳出局部最优的操作较弱，易陷入局部最优。整体结构上看，是一个弱化的人工蜂群算法。

所以结合两种优化算法各自的特点，进行混合优化，先利用遗传算法优秀的全局搜索能力进行初步参数确定，在遗传算法得到的最优解附近再进行麻雀搜索算法，利用其极强的局部搜索能力快速收敛到最优解。由此，避免了遗传算法进化后期搜索效率较低，和麻雀搜索算法全局搜索能力较弱且跳出局部最优的操作较弱，易陷入局部最优的问题。

## 第二章 OLED 器件的工作原理

### 2.1 OLED 器件的基本工作原理

#### 2.1.1 OLED 的器件结构

根据材料的不同,可以将有机发光二极管分成有机小分子发光二极管和有机聚合物发光二极管。有机发光二极管的结构直接影响着有机发光二极管的性能,设计合理的有机发光二极管结构,对于提高它的寿命和发光效率非常重要。如图 2.1 所示为有机发光二极管的常见结构图,目前有机发光二极管结构可以分成单层结构、双层结构、三层结构以及多层结构。

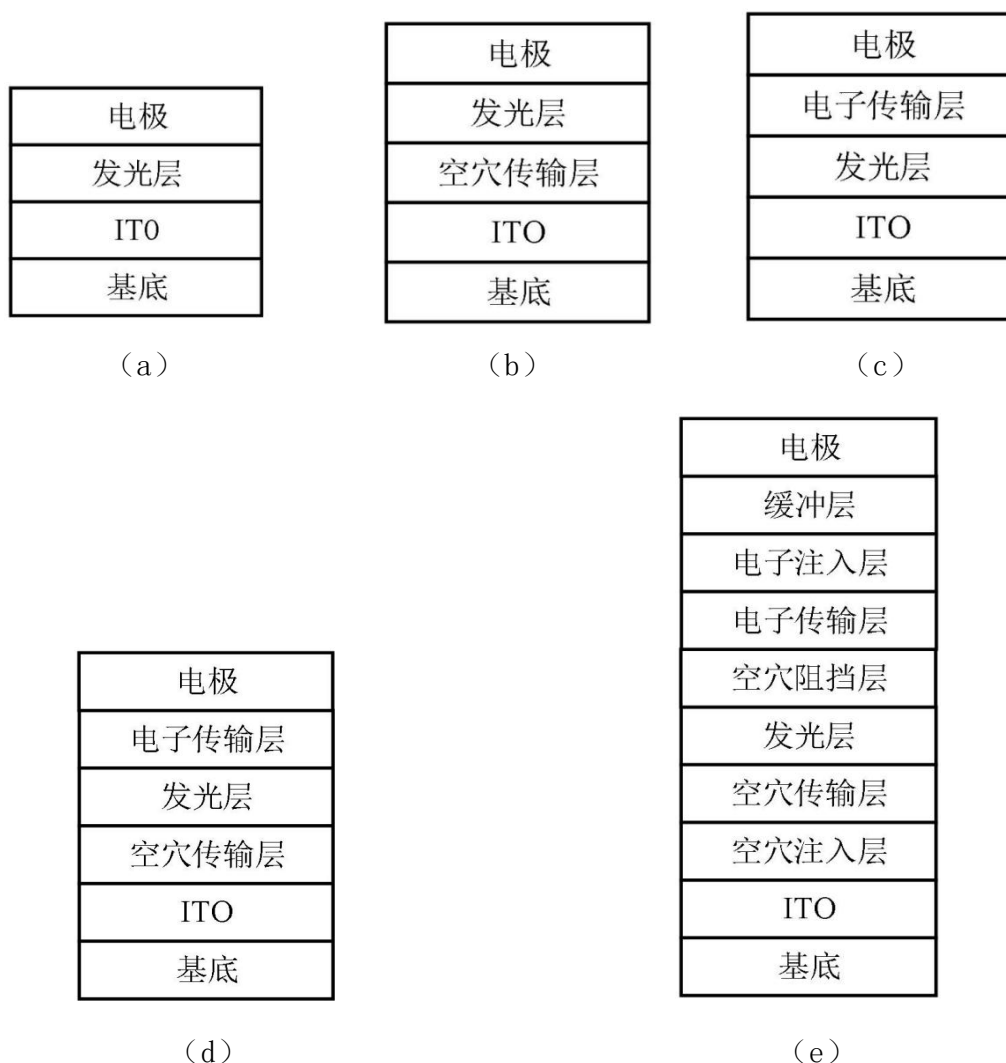


图 2.1 OLED 的常见结构: (a) 单层结构; (b)、(c) 双层结构; (d) 三层结构; (e) 多层结构



有机聚合物发光二极管一般采用的是单层结构，因为聚合物分子量大，制备双层或者多层薄膜比较困难，所以采用单层结构。单层结构虽然制备简单，但是它只有一个有机层，电子传输、空穴传输以及载流子复合发光的功能都在同一个有机层里实现，由于大多数有机材料是利于一种载流子传输的，因此导致了载流子注入不平衡，降低了有机发光二极管的发光效率；而且如果辐射复合发光区域接近金属电极，会导致电极发光淬灭，降低了器件的性能。

双层结构是由美籍华裔科学家邓青云等人提出来的，这种结构大大的降低了 OLED 的驱动电压。双层结构有效的解决了电子和空穴注入、传输和辐射复合的问题。它由一层有机层作为 ETL（电子传输层）或 HTL（空穴传输层），另外一层兼做 EML（发光层）和 HTL 或 EML 和 ETL，这样就解决了载流子注入不平衡的问题，大大提高了器件的性能。它的缺点是复合发光区的位置不固定，主要取决于 ETL 和 HTL 有机材料的能带匹配关系。

三层结构是由 Adachi 在 1988 年提出的，使有机发光二极管有了独立的 ETL、HTL、EML，把电子和空穴限制在 EML 中，可以精确的控制复合发光区的位置；并且可以有效改善载流子的注入平衡，提高有机发光二极管的性能和效率。目前 OLED 器件中最常用的结构是三层结构。

在实际的器件制备过程中，会加入一些不同的功能层来优化器件的性能，于是形成了多层结构。一般情况下，载流子的注入能力相差很大，空穴的注入比较容易，而电子的注入比较困难，为了解决电子和空穴注入能力差异很大的问题，一般会在电极和电子传输层之间加入一个缓冲层；载流子注入层可以降低电极与载流子传输层之间的势垒，降低工作电压；载流子阻挡层的作用是提高有机发光二极管的电流效率，增加有机发光二极管的寿命。多层结构的缺点是工艺比较复杂，器件制备起来比较困难。

OLED 主要由基底、电极、电子传输层、空穴传输层以及发光层组成。基底一般由玻璃或单晶硅构成，有源发光器件的基底都是硅，同时由透明金属做阴极形成顶发射。电极一般采用的是具有较小逸出功的金属，例如 Ca、Al、Mg 或它们的合金，金属逸出功越小，其电子注入效率越高。空穴传输层的材料需要具有较强的电子授予能力，大多数为芳香族三胺化合物。电子传输层的材料需要具有较强的电子接受能力，大多数都是具有大共轭结构的平面芳香族化合物。发光层

的材料分为小分子材料和聚合物材料两种。发光层的材料需要满足以下条件：较高的荧光量子效率；抑制薄膜中聚集体的形成；发光层位置要远离电极表面。

### 2.1.2 OLED 的基本发光机理

有机半导体材料遵循分子轨道理论，在分子轨道理论中，载流子不再是在导带和价带中，而是在最低未占有分子轨道（LUMO）和最高占有分子轨道（HOMO）中。在有机半导体中，当一个分子失去一个电子时，此分子的 HOMO 上就产生一个空穴，其他分子上的电子就可以跳跃（hopping）到这个分子上填充空穴，相当于空穴的跳跃；同理，当一个分子获得一个电子后，它的 LUMO 上就增加了一个电子，这个电子同样可以跳跃到其他分子的 LUMO 上。在没有外电场的情况下，电子和空穴的跳跃是随机的，不形成电流；当有外电场时，电子和空穴发生定向跳跃，形成电流。

如图 2.2 所示为双层 OLED 结构器件的发光过程，它由①载流子注入、②载流子传输、③产生激子和④激子辐射复合发光四个部分组成。

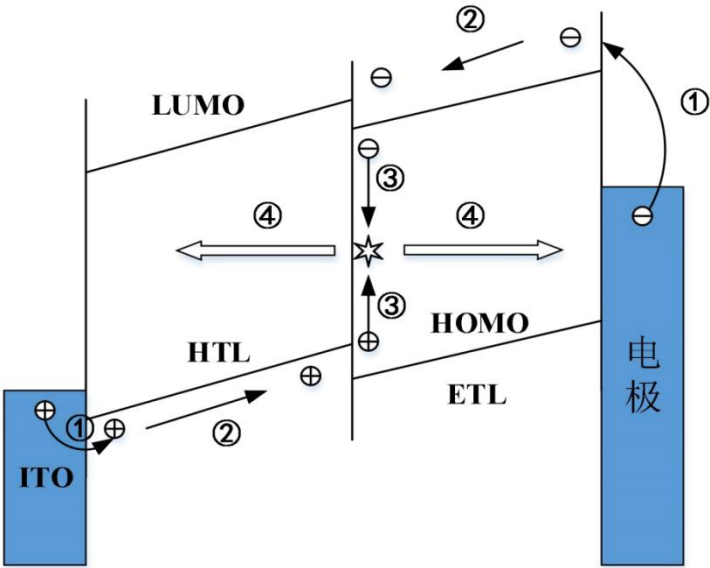


图 2.2 OLED 的发光过程

载流子注入过程指的是电子和空穴经过电极—有机物界面从电极进入有机物层的过程。在外界电压的驱动下，电子从金属电极注入到 ETL 中，空穴从 ITO 阳极注入到 HTL 中。

载流子传输指的是将注入到有机层的电子和空穴传输到复合界面的过程。进入 ETL 中的电子在 LUMO 中跳跃到复合界面，进入 HTL 中的空穴在外电压的驱动下在 HOMO 中也跳跃到复合界面。载流子的传输能力主要跟载流子在有机物中迁移率有关，迁移率越大，载流子的传输速度就越快，传输能力就越强。

当电子和空穴传输到复合界面后，电子和空穴所在的分子间相互距离很接近（Wannier 激子），甚至处于同一个分子上（Frankel 激子），由于电子和空穴相互之间的库仑力吸引作用，导致电子和空穴束缚在一起时的能量很低，进而形成激子。然后激子辐射退激发，形成光子，然后 OLED 发光。

## 第三章 OLED 器件模型设计

### 3.1 基于 TCLC 载流子传输模型的 OLED 的 I-V 特性的等效电路模型

#### 3.1.1 OLED 的 TCLC 载流子传输模型

因为分子的无周期性排列和杂质的存在，有机半导体中存在大量的陷阱能级，这些陷阱能级很容易俘获电子和空穴，使有机半导体内部产生大量的空间电荷，从而会影响电子和空穴在有机半导体中的传输特性。

通常认为，有机发光二极管的 V-I 特性分为体限制和注入限制两种，是由有机层的载流子迁移率和金属电极-有机层界面的肖特基势垒确定的，当肖特基势垒较小时，器件的电流主要受体限制影响，当肖特基势垒较大时，注入限制对器件电流的影响较大。TCLC 理论假设金属-有机层界面的肖特基势垒高度足够小，使得有机发光二极管的 V-I 特性只受体限制特性的影响。当驱动电压比较小时，由于注入到有机层的电荷很少，有机发光二极管的电流主要受低迁移率的热生载流子的欧姆传导影响，此时器件的电流密度为：

$$J = q\mu_n n_0 V/d \quad (3-1)$$

其中， $q$ 为电子电荷， $\mu_n$ 是电子迁移率， $n_0$ 是热生自由电荷密度， $V$ 是驱动电压， $d$ 是电子传输层的厚度。

随着驱动电压的升高，电子的注入密度增加，电子的准费米能级逐渐向 LUMO 能级移动，导致准费米能级以下的陷阱被载流子填充，使得空陷阱的密度减少和有效电子迁移率增高。此时，载流子的电流密度和电压表现为幂数较大的指数关系：

$$J = N_{LUMO} \mu_n q^{1-m} \times \left( \frac{\varepsilon m}{N_t(m+1)} \right)^m \left( \frac{2m+1}{m+1} \right)^{m+1} \frac{V^{m+1}}{d^{2m+1}} \quad (3-2)$$

其中， $m = Tt / T$ ， $Tt$  是陷阱能级分布的特征温度， $N_{LUMO}$  是 LUMO 能级的态密度， $N_t$  是每单位能级的陷阱密度。由式 (3-1) 和 (3-2) 可以知道，从欧姆传导到陷阱电流限制传输的临界电压为：

$$V_{\Omega-T} = \left( \frac{n_0}{N_{LUMO}} \right)^{1/m} \frac{(qN_t d^2 / m\varepsilon)^{(m+1)(2+1/m)}}{(2m+1)^{(1+1/m)}} \approx \left( \frac{n_0}{N_{LUMO}} \right)^{1/m} \left( \frac{qNd^2}{\varepsilon} \right) \quad (3-3)$$

随着电压的继续升高，所有的陷阱都被载流子填充了，使得有机发光二极管里面存在着大量的空间电荷，载流子传输不再受陷阱的影响，而是受到空间电荷的限制，此时载流子的电流密度符合空间电荷限制电流（Space Charge Limit Current, SCLC）理论，载流子的电流密度为：

$$J = \frac{9}{8} \mu_n \epsilon V^2 / d^3 \quad (3-4)$$

其中， $\epsilon$ 为有机层材料的相对介电常数。从陷阱电流限制传输到空间电荷限制传输的临界电压为：

$$V_{TFF-SCL} = \frac{en_0 L^2}{\epsilon} \left( \frac{n_0}{N_{LUMO}} \right) \left( \frac{N_t}{n_0} \right)^m \times \left[ \frac{9}{8} \left( \frac{m+1}{m} \right)^m \left( \frac{m+1}{2m+1} \right)^{m+1} \right]^{1/(m-1)} \quad (3-5)$$

### 3.1.2 OLED 的 I-V 特性的等效电路模型设计

由 TCLC 模型可知，OLED 的载流子电流密度和驱动电压的关系由三个部分组成：在低电压时，载流子电流密度和驱动电压成线性关系，即  $J \propto V$ ；当驱动电压升高时，载流子电流密度和驱动电压成指数关系，即  $J \propto V^{m+1}$ ；继续升高电压，载流子电流密度和驱动电压成平方关系，即  $J \propto V^2$ 。基于 OLED 等效电路[2]的电路模型如图 3.1。

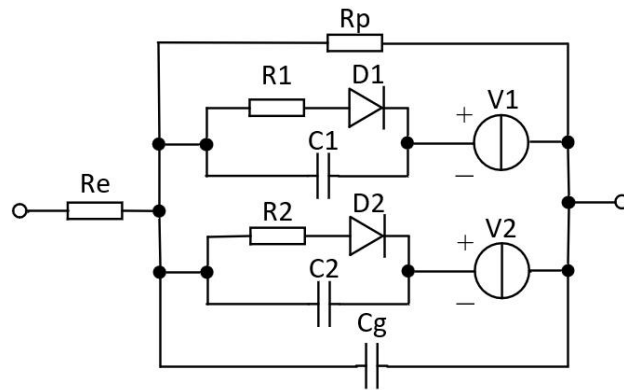


图 3.1 OLED 等效电路模型

等效电路模型由电极电阻  $R_e$ 、并联电阻  $R_p$ 、几何电容  $C_g$ 、虚线框内的整流电路和电压源  $V_1$ 、 $V_2$  构成。可以看到该模型主要由两个部分组成，对应着 TCLC 的三个阶段：

第一段主要是由  $R_e$ 、 $R_p$  和  $C_g$  构成，其中  $R_e$  代表阴极和阳极的总电阻； $R_p$  表示低注入电压下欧姆传导时 OLED 的体电阻，由于  $R_p$  非常大，所以  $R_p$  主要在低注入电压下起作用，在高注入情况下可以忽略，相当于开路，不影响高注入情况； $C_g$  表示 OLED 的几何电容，因为 OLED 的有机层厚度很小，一般为几百埃左右，而有机层面积相对于厚度来说很大，为平方厘米量级，所以 OLED 的几何电容  $C_g$  比较大，不可以忽略。所以该部分的 V-I 关系为：

$$V = I \times (R_e + R_p) \quad (3-6)$$

第二段和第三段由虚线框内的两个整流电路、 $V_1$ 、 $V_2$ 、 $R_e$  和  $C_g$  构成。整流电路代表着在高注入情况下 OLED 陷阱和空间电荷等体特性起决定性作用时 OLED 的 V-I 特性，其中  $R_1$ 、 $R_2$  表示体电阻， $C_1$ 、 $C_2$  表示扩散电容， $D_1$ 、 $D_2$  表示 OLED 有机层的整流特性； $n$  为理想参数因子，可以用来表示 OLED 中陷阱和空间电荷起决定性作用的 V-I 特性，因此 OLED 等效电路模型采用虚线框内的整流电路来代表 TCLC 模型中的陷阱电荷限制阶段和空间电荷限制阶段；电压源  $V_1$  和  $V_2$  是一个临界电压开关，表示 OLED 的载流子传输从欧姆传导过渡到陷阱电荷限制阶段的临界电压，当驱动电压超过临界电压时，整流电路才起作用； $R_e$  和  $C_g$  表示电极总电阻和几何电容，在整个驱动电压作用过程中都起作用。该部分的 V-I 关系可以表示为：

$$\text{第二段: } V = I \times (R_e + R_1) + V_T n \ln \left( \frac{I}{I_s} + 1 \right) + V_1 \quad (3-7)$$

$$\text{第三段: } V = I \times (R_e + R_2) + V_T n \ln \left( \frac{I}{I_s} + 1 \right) + V_2 \quad (3-8)$$

其中  $I_s$  为二极管的反向饱和电流， $n$  为二极管的非理想因子， $V_T$  为二极管温度的电压当量，常温下为 0.0258V。

### 3.2 OLED 的 C-V 特性的物理模型的设计

金属与半导体接触大致可分为不具有整流特性的欧姆接触和具有整流特性的肖特基接触。对于欧姆接触，无论接触两端所加电压极性如何，结上的电阻都是可以忽略不计的。而对于肖特基接触来说，其结上只允许单一方向的电流通过，而另一方向呈高阻态，电流无法流过。本节基于肖特基接触的特性建立 OLED[3] 的 C-V 特性的物理模型。

金属与半导体接触之间有着一层介质层，所以结构界面处的能带图如图所示。在模型中，电容被分为耗尽电容和扩散电容。其中耗尽电容是由于肖特基接触界面在外加偏压时会形成耗尽区而引起的。它的公式是：

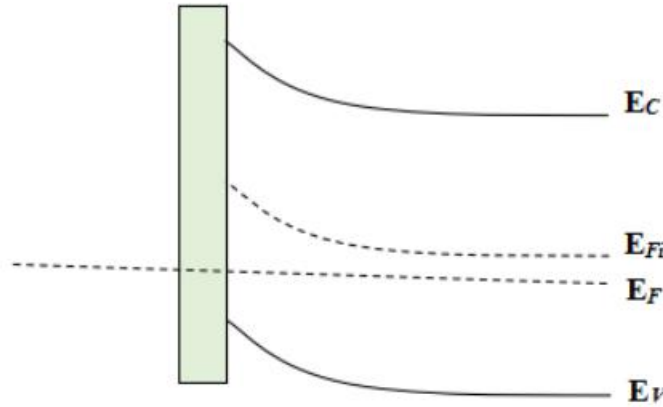


图 3.2 肖特基接触的能带图

$$C_T = \sqrt{\frac{\epsilon_s q N_A A^2}{2(V_{bi} - V)}} \quad (3-9)$$

式中， $V_{bi}$ 是内建电势差， $q$ 是电荷量， $N_A$ 是 HTL 中空穴浓度， $\epsilon_s$ 是 PVK 材料的介电常数， $A$ 是器件的面积。

扩散电容是因为界面态和串联电阻的存在而引起的。为了简化模型，先只考虑界面态的存在。当载流子进入金属与半导体界面时，它们将在界面态的作用下进行俘获-发射周期运动。有效载流子密度 $n_d$ 被定义为：

$$n_d(V) = \frac{N_{ss}}{1 + \exp\left(\frac{\alpha(E_g - E_{ss} + E_v - qV)}{kT}\right)} \quad (3-10)$$

式中， $E_{ss}$ 是界面态，代表着在禁带宽度离价带边缘的距离， $N_{ss}$ 是界面态密度，参数  $\alpha$  可由下面公式计算得来：

$$\alpha = \frac{qN_{ss}\delta}{\varepsilon_i} \quad (3-11)$$

式中， $\delta$ 是 PVK 与 Alq3 界面之间的介质层厚度， $\varepsilon_i$ 是介质层材料的介电常数。

$E_{ss}$ 的值与频率有关系，公式是：

$$\frac{E_{ss}}{q} = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{v_{th}\sigma_n N_A}{f}\right) \quad (3-12)$$

式中， $v_{th}$ 是载流子的热发射速度， $\sigma_n$ 是界面的俘获面积。扩散电容可表示为：

$$C_D = q \frac{dn_d(V)}{dV} \quad (3-13)$$

将公式（3-10）带入公式（3-13），则可得：

$$C_D = \frac{q^2 N_{ss} \alpha}{kT} \left(1 + \exp\left(\frac{\alpha(E_g - E_{ss} + E_v - qV)}{kT}\right)\right)^{-2} \times \exp\left(\frac{\alpha(E_g - E_{ss} + E_v - qV)}{kT}\right) \quad (3-14)$$

电容变为：

$$C = C_T + C_D \quad (3-15)$$

必须考虑模型中串联电阻对电容的影响。串联电阻的值是随着电压与频率的变化而改变，在模型中，用参数  $\beta$  来反应串联电阻对电容的影响。则  $n$  重新定义为：

$$n_d(V) = \frac{N_{ss}}{1 + \exp\left(\frac{(\alpha + \beta)(E_g - E_{ss} + E_v - qV)}{kT}\right)} \quad (3-16)$$

扩散电容变为：



$$C_D = \frac{q^2 N_{ss}(\alpha+\beta)}{kT} \left( 1 + \exp \left( \frac{(\alpha+\beta)(E_g - E_{ss} + E_V - qV)}{kT} \right) \right)^{-2} \times \exp \left( \frac{(\alpha+\beta)(E_g - E_{ss} + E_V - qV)}{kT} \right) \quad (3-17)$$

在低电压情况下，界面态在载流子的发射-俘获过程中扮演着主要角色，这时候可以忽略串联电阻的影响；但是随着电压增加，串联电阻对电容的影响是不能忽略，且开始起着主要作用，结合物理机制与数学模型，公式（3-17）变换为：

$$C_D = \frac{q^2 N_{ss}(\alpha+\beta)}{kT} \left( 1 + \exp \left( \frac{\alpha(E_g - E_{ss} + E_y - qV)}{kT} \right) \right)^{-2} \times \exp \left( \frac{\beta(E_g - E_s + E_F - qV)}{kT} \right) \quad (3-18)$$

为了简化模型，忽略缺陷的影响，同时也为计算方便。根据器件的一些物理参数，由泊松方程可得：

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} = -\frac{eN_d}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} + \frac{en_d}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \delta(x - L) \quad (3-19)$$

$$\varphi(x) = 0 \quad (3-20)$$

$$\frac{d\varphi}{dx} \Big|_{x=w} = 0 \quad (3-21)$$

式中， $L$ 是本征层的厚度， $w$ 是耗尽区宽度， $N_d$ 是Alq3中少数载流子（电子）的浓度， $n_d$ 是堆积在势阱中的载流子的浓度， $e$ 是电子的电荷量。参考边界条件公式（3-20）和（3-21），公式（3-19）可变为：

$$\varphi(x) = -\frac{eN_d}{2\varepsilon_0 \varepsilon_r} (x - w)^2 + \begin{cases} 0, x > L \\ \frac{en_d}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} (L - x), x < L \end{cases} \quad (3-22)$$

在较大的反向偏压时，势阱所在的能级不会被载流子占据。也就是说，在反向偏压下  $nd$  的值近似为零，此时的能级几乎不会分裂。

从产生电容的物理机制上看，可将总电容分成耗尽电容和扩散电容。耗尽电容（ $C_T$ ）是因为耗尽区的存在引起的，它的表达式如下：

$$C_T = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r}{w} \quad (3-23)$$

$$w = \left[ \frac{2\varepsilon_0\varepsilon_r(V_{bi}-V)}{eN_d} \right]^{1/2} \quad (3-24)$$

式中， $V_{bi}$ 是界面的内建电势差。

扩散电容主要是因为界面态的存在引起的。在一定的电压下，积累在界面态中的载流子，在外加信号的影响下，有部分载流子在频率的影响下，越过界面，但还有一部分没有离开界面，所以额外的电容就产生了。

界面中载流子的俘获/发射时间小于  $1/f$  时，这些载流子不会受到外加的 AC 信号的影响。然而，那些寿命较长的载流子容易受到频率的影响，从而产生额外的电容。这个现象可以认为是由于限制效应导致载流子在输运过程中的延迟。所以在模型中考虑到了扩散电容：

$$C_D = e \frac{dn_d}{dV} \quad (3-25)$$

在界面态中的载流子浓度 $n_d$ 可被定义为：

$$n_d(V) = \frac{\eta}{1 + \exp(\alpha(E_F - E_d - eV)/kT)} \quad (3-26)$$

式中， $\eta$ 是基态 $E_d$ 中载流子有效状态密度， $\alpha$ 是延迟因子，它与 $E_d$ 的位置以及外加的频率有关。

因此，总电容的表达式为：

$$C = C_D + C_T = \frac{e^2\eta_2\alpha}{kT} \left( 1 + \exp\left(\frac{\alpha(E_F - E_d - eV)}{kT}\right) \right)^{-2} \times \exp\left(\frac{\alpha(E_F - E_d - eV)}{kT}\right) + \left[ \frac{e\varepsilon_0\varepsilon_rN_d}{2(V_{bi}-V)} \right]^{1/2} \quad (3-27)$$

## 第四章 优化模型与算法实现

### 4.1 IV 优化模型建立

#### 4.1.1 模型简化

根据 OLED 器件的物理模型，汇总得到如下化简表达式：

$$V = \begin{cases} I \times (R_e + R_p) & , I \in (-\infty, I_0] \\ I \times (R_e + R_1) + V_T n_1 \ln \left( \frac{I}{I_{s1}} + 1 \right) + V1 & , I \in (I_0, I_1] \\ I \times (R_e + R_2) + V_T n_2 \ln \left( \frac{I}{I_{s2}} + 1 \right) + V2 & , I \in (I_1, \infty) \end{cases}$$

对其中的物理参数进行替换化简：

$$\begin{cases} R_e + R_p & \Rightarrow A \\ R_e + R_1 & \Rightarrow B \\ V_T n_1 & \Rightarrow C \\ \frac{1}{I_{s1}} & \Rightarrow D \\ R_e + R_2 & \Rightarrow E \\ V_T n_2 & \Rightarrow F \\ \frac{1}{I_{s2}} & \Rightarrow G \end{cases}$$

即可将其表示为以电流和物理参数为自变量，电压为因变量的函数：

$$V = f(A, B, C, D, E, F, G, H, I_0, I_1, I)$$

$$V = \begin{cases} I \times A & , I \in (-\infty, I_0] \\ I \times B + C \ln (D \times I + 1) + V1 & , I \in (I_0, I_1] \\ I \times E + F \ln (G \times I + 1) + V2 & , I \in (I_1, \infty) \end{cases}$$

式中的两个开关电压可以表示为：

$$\begin{cases} V1 = f(A, B, C, D, E, F, G, H, I_0, I_1, I_0) \\ V2 = f(A, B, C, D, E, F, G, H, I_0, I_1, I_1) \end{cases}$$

#### 4.1.2 参数范围确定

参数 A 的取值主要由低注入电压下欧姆传导时 OLED 的体电阻， $R_p$  决定其数量级为  $10^{10}$  级别。

参数 B 和 E 均为体电阻和阴极和阳极的总电阻之和组成，为千欧级别。

参数 C 和 F 由二极管温度的电压当量  $V_T$  和二极管参数理想因子  $n$  组成， $V_T$  在常温下的取值为 0.0285V，理想因子取值范围为[0, 1]。

参数 D 和 G 为二极管反向饱和电流的倒数，二极管反向饱和电流的典型值一般为微安级别。

电流分段点参数显然在数据观测点范围内，故也可确定其范围。

#### 4.1.3 模型汇总

根据上述分析可以确定优化模型解的空间，得到如下完整优化模型。

$$(A, B, C, D, E, F, G, H, I_0, I_1) = \underset{A, B, C, D, E, F, G, H, I_0, I_1}{arg} \min \sum_{i=1}^N (f(I_i) - f^*(I_i))^2$$

$$s. t. \begin{cases} \text{机理模型: } V = f(I) \begin{cases} I \times A & , I \in (-\infty, I_0] \\ I \times B + C \ln(D \times I + 1) + V_1 & , I \in (I_0, I_1] \\ I \times E + F \ln(G \times I + 1) + V_2 & , I \in (I_1, \infty) \end{cases} \\ \text{边界控制} \begin{cases} V_1 = f(A, B, C, D, E, F, G, H, I_0, I_1, I_0) \\ V_2 = f(A, B, C, D, E, F, G, H, I_0, I_1, I_1) \end{cases} \\ \text{物理参数约束} \begin{cases} lb = [10^7, 10^2, 0, 0, 10^2, 0, 0, 0, 0] \\ ub = [10^9, 10^4, 1, 2 \times 10^5, 10^4, 1, 2 \times 10^5, 10^{-3}, 5 \times 10^{-3}] \\ [\tau_t, V_0, V_1, V_2, K_n, V_{SQ}, m] \in [lb, ub] \end{cases} \end{cases}$$

### 4.2 CV 优化模型建立

#### 4.2.1 模型简化

汇总电容的表达式

$$C = \frac{e^2 \eta_2 \alpha}{kT} \left( 1 + \exp \left( \frac{\alpha(E_F - E_d - eV)}{kT} \right) \right)^{-2} \times \exp \left( \frac{\alpha(E_F - E_d - eV)}{kT} \right) + \left[ \frac{e \epsilon_0 \epsilon_r N_d}{2(V_{bi} - V)} \right]^{1/2}$$

同理，对其进行参数替换

$$\begin{cases} \frac{\alpha e}{KT} & \Rightarrow A \\ \frac{E_F - E_d}{e} & \Rightarrow B \\ \frac{e\epsilon_0\epsilon_r N_d}{2} & \Rightarrow D \\ V_{bi} & \Rightarrow E \\ e \cdot \eta_2 & \Rightarrow F \\ b & \Rightarrow G \end{cases}$$

得

$$C = g(V) = A \times F \times \frac{e^{A(B-V)}}{[1 + e^{A(B-V)}]^2} + \sqrt{\frac{D}{E - V}} + G$$

#### 4.2.2 参数范围确定

基于物理模型能够得到优化模型的约束条件，由此能够建立一个以拟合残差最小为目标，器件物理特性为约束条件的优化模型。

$$\begin{cases} \text{文献用例参数} \begin{cases} T = 300 \text{ K} \\ E_F - E_d = 2.25 \text{ eV} \\ \alpha = 0.0936 \\ \eta_2 = 8 \times 10^8 \text{ cm}^{-2} \\ L = 1 \mu\text{m} \end{cases} \\ \text{半导体物理常量} \begin{cases} \epsilon_0 = 8.854187817 \times 10^{-12} \text{ F/m} \\ k = 1.38065 \times 10^{-23} \text{ J/K} \\ e = 1.602176634 \times 10^{-19} \text{ C} \end{cases} \end{cases}$$

首先根据文献用例和半导体物理基本知识确定部分参数的大概取值。

此外，一般半导体器件的载流子浓度一般为  $1 \times 10^{13} \sim 1 \times 10^{18} / \text{cm}^3$ ，内建电压  $V_{bi}$  与外加端电压同数量级，基于以上分析，可以确定 CV 函数的解的空间。

#### 4.2.3 模型汇总

$$\begin{aligned}
(A, B, D, E, F, G) = \arg \min_{\substack{A, B, D \\ E, F, G}} \sum_{i=1}^N (g(V_i) - g^*(V_i))^2 \\
\text{s.t.} \begin{cases} \text{机理模型: } C = g(V) = A \times F \times \frac{e^{A(B-V)}}{[1 + e^{A(B-V)}]^2} + \sqrt{\frac{D}{E-V}} + G \\ \text{物理参数约束} \begin{cases} lb = [0, 0, 10^{-9}, 10^{-26}, 0, 0, 10^{-10}] \\ ub = [10, 10, 10^{-7}, 10^{-24}, 10, 10^2, 10^{-8}] \\ [A, B, D, E, F, G] \in [lb, ub] \end{cases} \end{cases}
\end{aligned}$$

## 4.3 算法实现

### 4.3.1 数据预处理

首先，根据 mea 文件的数据格式，提取出 IV 和 CV 的观测点测试数据，发现数据内部存在噪声，有明显的锯齿状曲线，对其进行平滑滤波，以 CV 曲线为例，平滑效果如下。

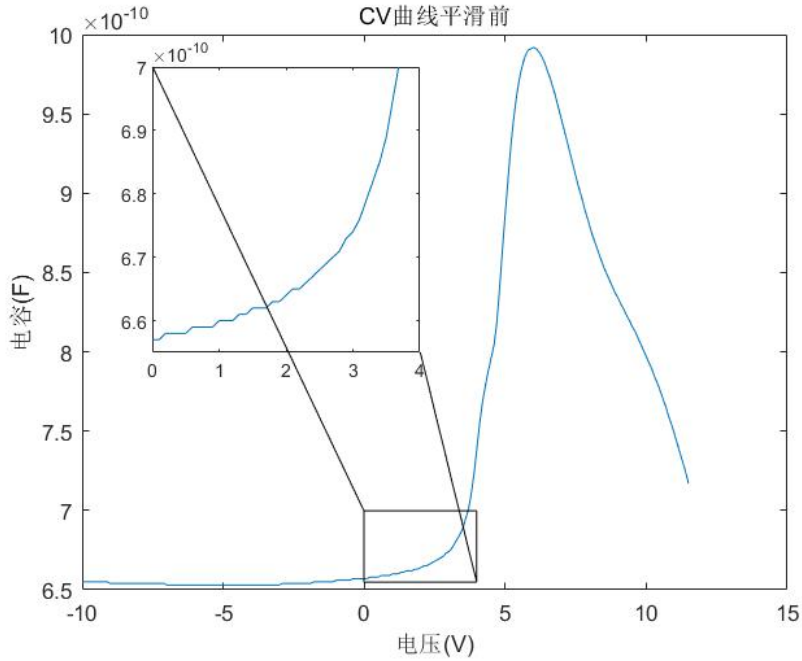


图 4.1 CV 曲线平滑前

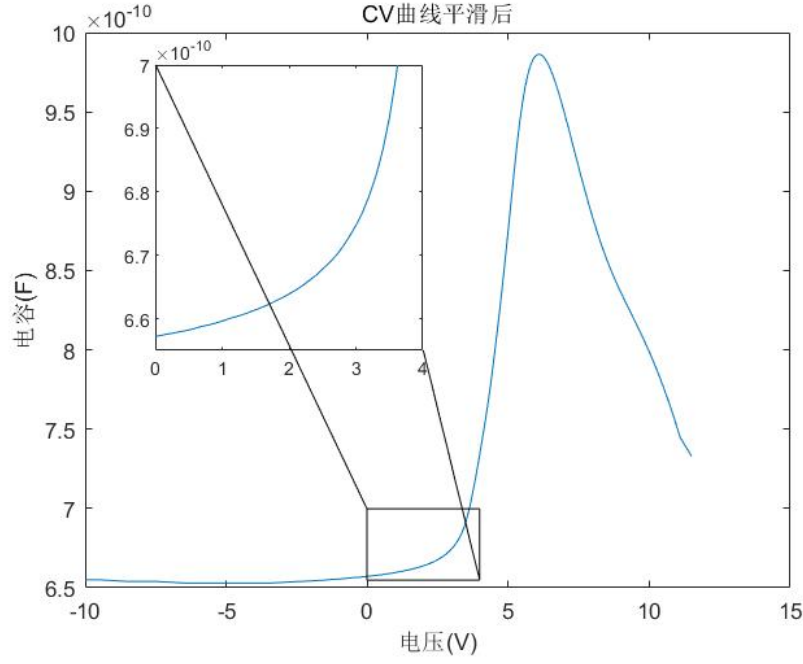


图 4.2 CV 曲线平滑后

#### 4.3.2 算法概述

算法采用混合优化[4]算法，先后采用遗传算法（GA）和麻雀搜索算法（SSA）进行寻优。遗传算法具有良好的全局搜索能力，可以快速地将解空间中的全体解搜索出，而不会陷入局部最优解的快速下降陷阱；并且利用它的内在并行性，可以方便地进行分布式计算，加快求解速度。但是遗传算法的局部搜索能力较差，导致单纯的遗传算法比较费时，在进化后期搜索效率较低。在实际应用中，遗传算法容易产生早熟收敛的问题。

雀搜索算法采用搜索、追随和侦查预警进行寻优。

搜索行为：

$$X_{ij}^{t+1} = \begin{cases} X_{ij}^t \cdot \exp\left(\frac{-i}{\alpha \cdot \text{iter}_{\max}}\right) & \text{if } R_2 < ST \\ X_{ij}^t + Q \cdot L & \text{if } R_2 \geq ST \end{cases}$$

追随行为：

$$X_{ij}^{t+1} = \begin{cases} Q \cdot \exp\left(\frac{X_{\text{worst}}^t - X_{ij}^t}{i^2}\right) & \text{if } i > n/2 \\ X_P^{t+1} + |X_{ij}^t - X_P^{t+1}| \cdot A^+ \cdot L & \text{otherwise} \end{cases}$$

侦查预警行为:

$$X_{ij}^{t+1} = \begin{cases} X_{\text{best}}^t + \beta \cdot |X_{ij}^t - X_{\text{best}}^t| & \text{if } f_i > f_g \\ X_{ij}^t + K \cdot \left( \frac{|X_{ij}^t - X_{\text{worst}}^t|}{(f_i - f_w) + \varepsilon} \right) & \text{if } f_i = f_g \end{cases}$$

麻雀搜索算法的局部搜索能力极强, 收敛速度较快, 但全局搜索能力较弱且跳出局部最优的操作较弱, 易陷入局部最优。整体结构上看, 是一个弱化的人工蜂群算法。

所以结合两种优化算法各自的特点, 进行混合优化, 先利用遗传算法优秀的全局搜索能力进行初步参数确定, 在遗传算法得到的最优解附近再进行麻雀搜索算法, 利用其极强的局部搜索能力快速收敛到最优解。由此, 避免了遗传算法进化后期搜索效率较低, 和麻雀搜索算法全局搜索能力较弱且跳出局部最优的操作较弱, 易陷入局部最优的问题。



### 4.3.3 算法代码实现

```
1  #!/usr/bin/env python3
2  # -*- coding: utf-8 -*-
3  # @Time : 2019/8/20
4  # @Author : github.com/guofei9987
5
6
7  import numpy as np
8  from .base import SkoBase
9  from sko.tools import func_transformer
10 from abc import ABCMeta, abstractmethod
11 from .operators import crossover, mutation, ranking, selection
12
13
14 class GeneticAlgorithmBase(SkoBase, metaclass=ABCMeta):
15     def __init__(self, func, n_dim,
16                  size_pop=50, max_iter=200, prob_mut=0.001,
17                  constraint_eq=tuple(), constraint_ueq=tuple(), early_stop=None):
18         self.func = func_transformer(func)
19         assert size_pop % 2 == 0, 'size_pop must be even integer'
20         self.size_pop = size_pop # size of population
21         self.max_iter = max_iter
22         self.prob_mut = prob_mut # probability of mutation
23         self.n_dim = n_dim
24         self.early_stop = early_stop
25
26         # constraint:
27         self.has_constraint = len(constraint_eq) > 0 or len(constraint_ueq) > 0
28         self.constraint_eq = list(constraint_eq) # a list of equal functions with
29         self.constraint_ueq = list(constraint_ueq) # a list of unequal constraints
30
31         self.Chrom = None
32         self.X = None # shape = (size_pop, n_dim)
33         self.Y_raw = None # shape = (size_pop,) , value is f(x)
34         self.Y = None # shape = (size_pop,) , value is f(x) + penalty for constraints
35         self.FitV = None # shape = (size_pop,)
```

图 4.3 遗传算法代码示意图

```
1  import copy
2  import random
3  import numpy as np
4
5  ''' Tent 种群初始化函数 '''
6  def initial(pop, dim, ub, lb):
7      X = np.zeros([pop, dim])
8      for i in range(pop):
9          for j in range(dim):
10             X[i, j] = np.random.rand() * (ub[j] - lb[j]) + lb[j]
11     return X, lb, ub
12
13     ''' 边界检查函数 '''
14     def BorderCheck(X, ub, lb, pop, dim):
15         for i in range(pop):
16             for j in range(dim):
17                 if X[i, j] > ub[j]:
18                     X[i, j] = np.random.rand() * (ub[j] - lb[j]) + lb[j]
19                 elif X[i, j] < lb[j]:
20                     X[i, j] = np.random.rand() * (ub[j] - lb[j]) + lb[j]
21         return X
22
23     ''' 计算适应度函数 '''
24     def CaculateFitness(X, fun):
25         pop = X.shape[0]
26         fitness = np.zeros([pop, 1])
27         for i in range(pop):
28             fitness[i] = fun(X[i, :])
29         return fitness
30
```

图 4.4 麻雀搜索算法代码示意图

#### 4.3.4 优化结果

以 CV 曲线为例

遗传算法迭代图：

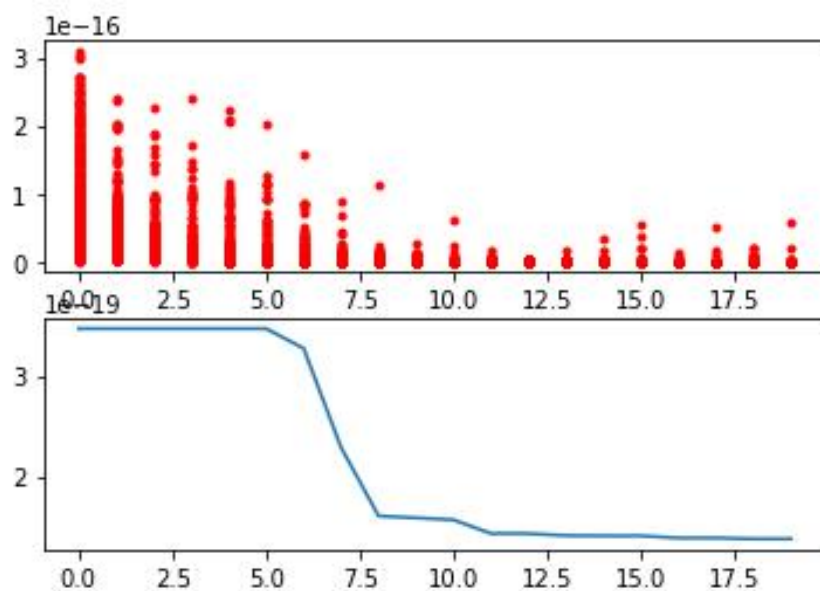


图 4.5 CV 曲线遗传算法迭代图

麻雀搜索算法迭代图：

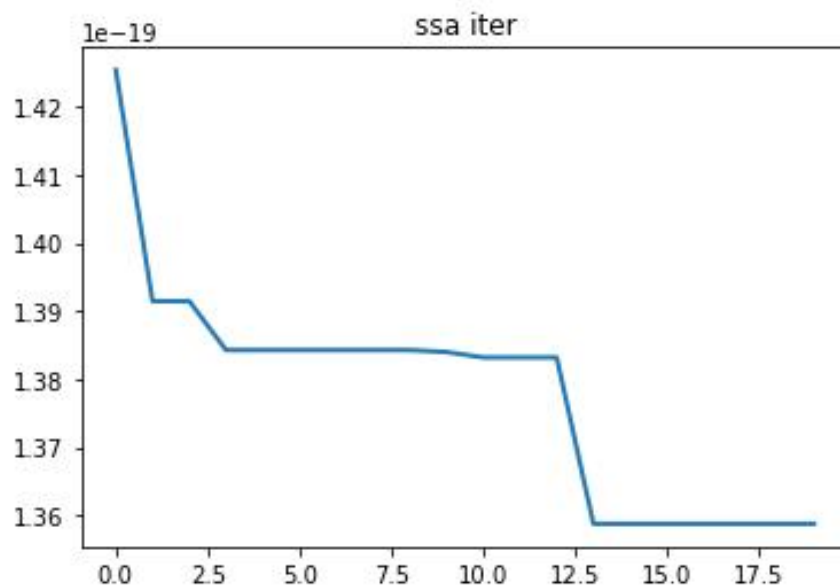


图 4.6 CV 曲线麻雀搜索算法迭代图

拟合所得迭代图效果类似，在此不再过多赘述，此处直接给出六组数据用时的结果，RMS 误差及仿真收敛时间见结果分析章节。

Case1\_IV 优化输出:

ga 优化用时: 10.722065925598145s

ssa 优化用时: 10.910829305648804s

共计优化用时: 21.63289523124695s

Case2\_IV 优化输出:

ga 优化用时: 10.478495121002197s

ssa 优化用时: 11.206282138824463s

共计优化用时: 21.68477725982666s

Case3\_IV 优化输出:

ga 优化用时: 10.988324165344238s

ssa 优化用时: 12.530059814453125s

共计优化用时: 23.518383979797363s

Case1\_CV 优化输出:

ga 优化用时: 5.501979351043701s

ssa 优化用时: 24.199997663497925s

共计优化用时: 29.701977014541626s

Case2\_CV 优化输出:

ga 优化用时: 5.495172739028931s

ssa 优化用时: 24.22357678413391s

共计优化用时: 29.718749523162842s

Case3\_CV 优化输出:

ga 优化用时: 7.43787956237793s

ssa 优化用时: 31.432250261306763s

共计优化用时: 38.87012982368469s

## 第五章 结果与分析

### 5.1 拟合结果

#### 5.1.1 IV 的 case3 拟合结果

通过对 IV 数据的预处理及通过对 case1、case2 进行对模型函数中参数的取值预估，提取出能够较好拟合与预判 case3 的一组参数，最终得到的对 case3 的拟合效果及误差与时间如下图：

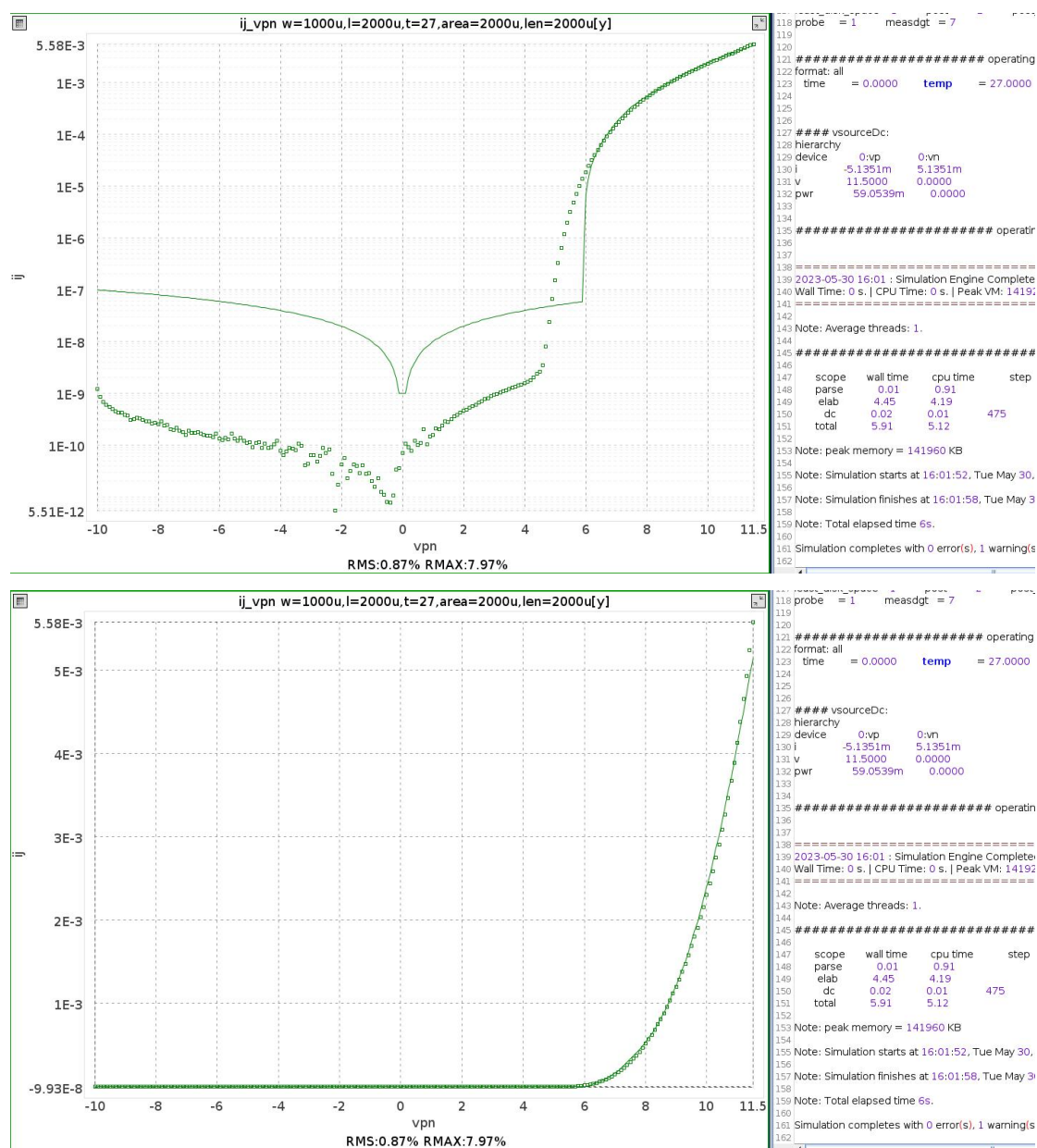


图 5.1 case3IV 拟合效果图与指标

5. 1. 2 CV 的 case3 拟合结果

通过对 CV 数据的预处理及通过对 case1、case2 进行对模型函数中参数的取值预估，提取出能够较好拟合与预判 case3 的一组参数，最终得到的对 case3 的拟合效果及误差与时间如下图：

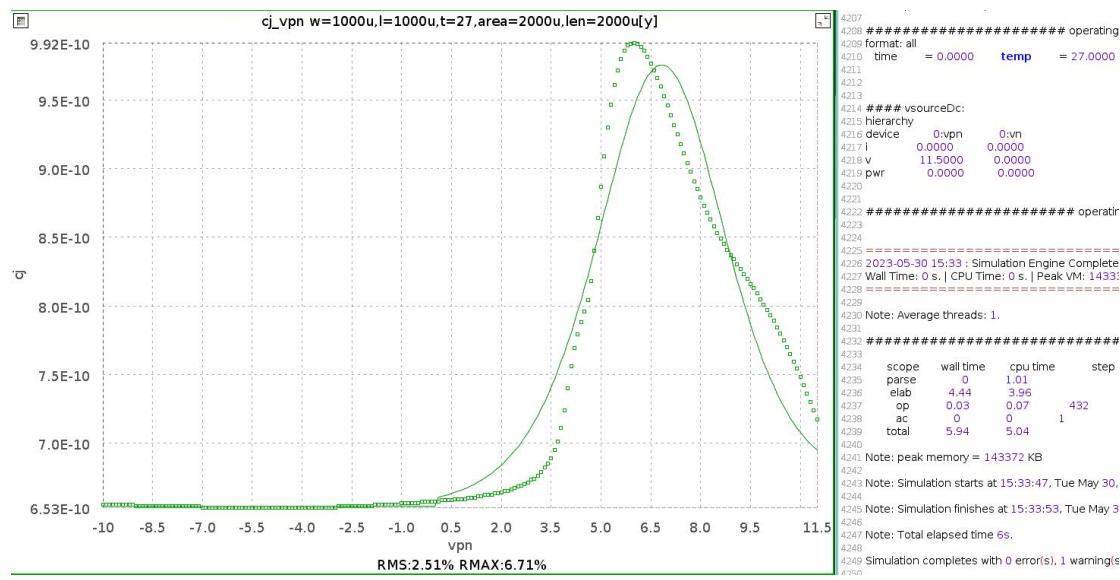


图 5.2 case3CV 拟合效果图与指标

## 5.2 结果分析

可见，所构造的模型能够很好的对 IV 和 CV 特性进行描述，通过对模型公式进行基于混合优化算法的参数提取，所得到的最终的曲线能够很好的拟合原 IV 和 CV 的实际的特性曲线。

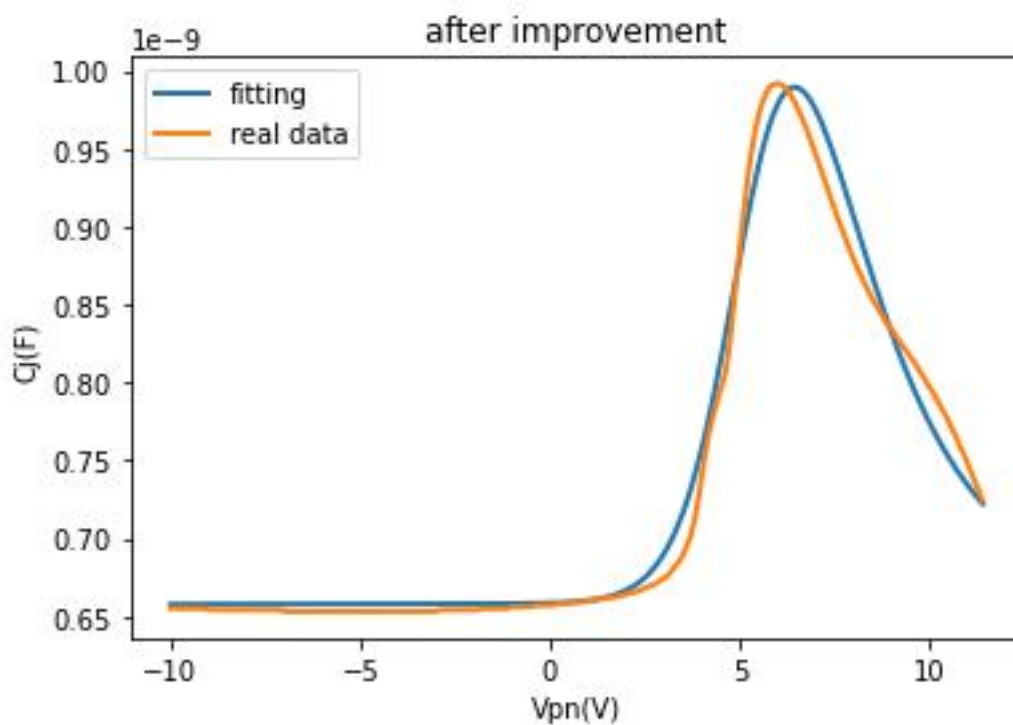
## 第六章 后续工作

### 6.1 模型改进

对模型增加 H、I 两个修正因子，使其更加接近有机发光二极管的特性，修正后的表达式如下。

$$C = g'(V) = AF \frac{e^{A(B-V)I}}{[1 + e^{A(B-V \cdot H)}]^2} + \sqrt{\frac{D}{E - V}} + G$$

优化结果如下；



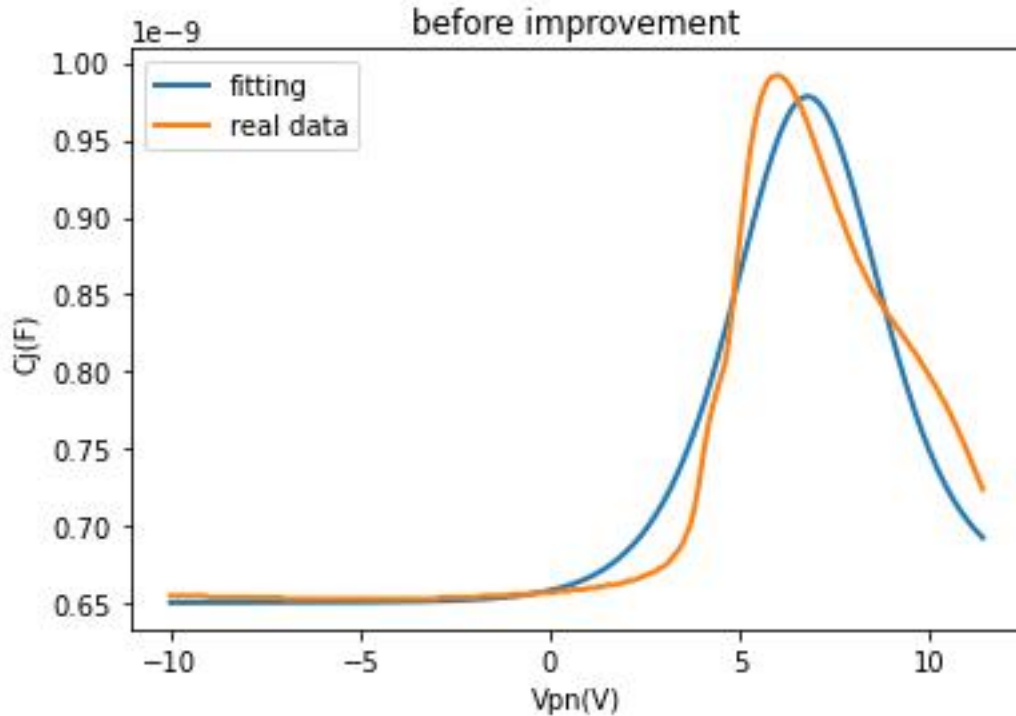
RMS\_ga 误差=1.1009196822634915%，优化用时：7.43787956237793s

RMS\_ssa 误差=0.910866745707445%，优化用时：31.432250261306763s

最终 RMS 误差=0.910866745707445%，共计优化用时：38.87012982368469s



与改进前的拟合效果对比



发现改进后的模型 RMS 误差显著减小，更加贴近 OLED 器件的实际特性。

## 6.2 电容特性优化

由于 OLED 的电容类似一个受端电压控制的压控电容，需要求取  $g(V)$  对于  $V$  的积分，改进后的电容表达式比较复杂时，积分求解难度较大，故可以采用符号积分工具来求解。

使用 Maple 工具，借助换元积分法得到积分表达式

```
IntegrationTools:-Change(int(A*C*exp(A*(B-V)*F)/(1+exp(A*(B-V)*H))^2,V),x=exp(A*(B-V)));
eval(% , x=exp(A*(B-V)));
```

$$-\frac{e^{A(B-V)} F C}{H(1+e^{A(B-V)H})} + \left( \frac{e^{\ln(x)F} \ln(x) F}{H(1+e^{\ln(x)H})} - \frac{e^{\ln(x)F} \ln(x)}{(1+e^{\ln(x)H})} \right) A C$$

$$-\frac{e^{A(B-V)} F C}{H(1+e^{A(B-V)H})} + \left( \frac{e^{\ln(e^{A(B-V)})F} \ln(e^{A(B-V)}) F}{H(1+e^{\ln(e^{A(B-V)})H})} - \frac{e^{\ln(e^{A(B-V)})F} \ln(e^{A(B-V)})}{(1+e^{\ln(e^{A(B-V)})H})} \right) A C$$

为 Matlab

```
cg = -0.1e1 / H * exp(A * (B - V) * F) / (0.1e1 + exp(A * (B - V) * H)) * C + (exp(log(exp(A * (B - V))) * F) / H / (0.1e1 + exp(log(exp(A * (B - V))) * H)) * log(exp(A * (B - V))) / A * F - exp(log(exp(A * (B - V))) * F) / (0.1e1 + exp(log(exp(A * (B - V))) * H)) * log(exp(A * (B - V))) / A) * A * C;
```

由此即可使用 verilog-A 描述电容模型。

## 参考文献

- [1] 吴敬, 仲飞, 刘彭义. 典型有机发光二极管中载流子传输和复合模型[J]. 发光学报, 2006(04):543-546.
- [2] 赖良德. 硅基 OLED 微显示器关键电路研究[D]. 东南大学, 2019.
- [3] 王一栋. InP 基器件 C-V 特性的研究[D]. 苏州大学, 2018.
- [4] 张九龙, 王晓峰, 芦磊等. 若干新型智能优化算法对比分析研究[J]. 计算机科学与探索, 2022, 16(01):88-105.