

文章编号: 1000-7032(2009)05-0590-06

TPD/PBD 界面电致激基复合物几何结构和电子结构的理论

雷俊峰¹, 郝玉英^{1*}, 樊文浩¹, 房晓红², 许并社²

(1. 太原理工大学 理学院物理系, 山西 太原 030024;

2. 太原理工大学 教育部新材料界面与工程重点实验室, 山西 太原 030024)

摘要: 利用第一性原理对由 TPD⁺ 和 PBD⁻ 形成的电致激基复合物(TPD⁺PBD⁻) 进行基于密度泛函的能量、轨道等性质的计算。结果表明: 界面处离子态的 TPD⁺ 和 PBD⁻ 更易形成处于更低能量状态的电致激基复合物。几何结构的数据分析表明: 电致激基复合物(TPD⁺PBD⁻) 是电子从 PBD⁻ 转移至 TPD⁺ 形成的电荷转移态; 电致激基复合物的最低空轨道(LUMO) 定域在电致激基复合物 PBD⁻ 的一侧; 它的最高占据轨道(HOMO) 定域在电致激基复合物 TPD⁺ 的一侧; 且前线分子轨道无重叠。电致激基复合物的能隙为 1.3 eV, 与 PBD 的 LUMO 到 TPD 的 HOMO 的能级差 1.6 eV 相近。在理论上说明了电致激基复合物的发光是从 PBD 的 LUMO 到 TPD 的 HOMO 的电子跃迁。

关键词: 界面; 电致激基复合物; 模拟计算

中图分类号: O641.121; O482.31

PACS: 71.15.Mb

PACC: 3120J

文献标识码: A

1 引言

有机电致发光作为一门应用前景广阔的技术在最近几年得到了迅猛的发展, 特别是有机电致白光器件(WOELD) 在照明和显示领域凭借其能耗低、价格低廉、能满足各种曲面的灯光照明和装饰, 逐渐成为有机电致发光领域的研究热点^[1-5]。有机电致白光器件包括电致荧光、电致磷光或荧光和磷光混合发光, 实现电致白光有多种途径, 诸如多发射层白光器件、多掺杂单发射层器件、基于激基复合物或激基缔合物发射的白光器件等, 其中利用激基复合物或激基缔合物发射实现白光是一种简单而有效的途径。

1997年 Gebler 等^[6] 在双层结构 OLED 中首次观察到激基复合物发光, 他们用 PVK 作为空穴传输层, 聚合物 PPyVPV 作为发光层, 制备结构为 ITO/PVK/PPyVPV/Al 的 OLED。他们发现这种双层结构由于界面对电荷的约束、界面激基复合物的发射使器件的发光效率明显提高。冯晶等^[7] 报道了在蓝光材料 NPB 和(dppy)BF 界面处

形成的激基复合物使光谱变宽, 从而获得白光器件。

激基复合物是激发态的给体(受体)分子 D* (A*) 与基态的受体(给体)分子 A(D) 之间形成的一种瞬态络合物。如果 D 和 A 是同一种分子或是同一分子内部的不同生色团, 则形成的络合物称为激基缔合物; 如果 D 和 A 是不同分子, 则形成的络合物称为激基复合物。在实验中激基复(缔)合物可以通过光激发或者是电激发获得。然而, 人们发现在某些 OLED 中同样会产生一种复合物使器件的 EL 谱在长波方向上出现一个无精细结构的强而宽的新发射峰, 但是在相应的 PL 谱中却不显示这种性质, 也就是说这种复合物只能通过电激发才能形成, 人们称之为电致激基复合物。

电致激基复合物的概念是由瑞典 Thomas 等^[8] 首次提出, 之后由 Jan Kalinowski 等人^[9] 使用 N,N'-双-(3-甲基苯基)-N,N'-二苯基-[1,1'-二苯基]-4,4'-二胺(TPD) 和 2-(4-二苯基)-5-(4-叔丁苯基)-1,3,4-噁二唑(PBD) 分别制成单层掺杂

收稿日期: 2008-12-11; 修订日期: 2009-03-27

基金项目: 国家自然科学基金(20671068); 教育部科学技术重点项目(207015); 山西省自然科学基金(2008011008); 太原市科技局明星专项(07020401)资助项目

作者简介: 雷俊峰(1983-), 女, 山西大同人, 主要从事有机发光材料的模拟计算的研究。

*: 通讯联系人; E-mail: haoyuyinghy@sina.com, Tel: (0351)3312366

(40% TPD: 40% PBD: 20% PC) 器件和双层 (75% TPD: 25% PC/PBD) 器件。通过对比分析了载流子复合的动力学模型,研究了强电场对有机电致发光器件中载流子复合过程的影响,他们指出电致激基复合物(D^+A^-)在双层器件中产生率增加的原因是界面处($D^+\cdots A^-$)复合体偶极矩的取向一致性,并且电致激基复合物的产生率随着电压的升高而增加。

最近,杨盛谊等^[10]制备了基于 TPD/PBD 的双层器件,并测试了器件的 EL 谱,他们指出在界面处不但有激基复合物跃迁产生的发射峰,而且存在电致激基复合物的发射峰。本文对以 TPD 作为受体、PBD 作为给体形成的电致激基复合物进行了密度泛函理论 (DFT) 计算,从理论的角度分析了电致激基复合物(TPD^+PBD^-)的几何结构、前线轨道的电子云分布以及 TPD 与 PBD 界面处的电子转移现象。

2 计算模型和方法

本文采用 MS (Material Studio) 软件进行模拟计算。利用 Dmol3 模块分别搭建 TPD 和 PBD 分子的几何结构模型,并进行几何结构优化。为了对 TPD/PBD 界面形成的电致激基复合物进行理论模拟计算,我们给有空穴传输性能的电子给体 TPD 带一个单位的正电荷优化,即有一个空穴占据其最高占据轨道 HOMO 能级,相应地给具有电子传输性能的电子受体 PBD 带一个单位的负电荷优化,即有一个电子占据其最低空轨道 LUMO 能级,如图 1 所示,然后再把 TPD^+ 和 PBD^- 的几何结构放在一起进行进一步优化。

由于 TPD 和 PBD 两种分子都是平面共轭体系的分子,我们将优化后的 TPD^+ 和 PBD^- 平行放置,它们之间的平均垂直距离保持在 0.6 nm 左右 (芳香类分子一般具有平面结构,分子间常常平行堆积,当分子间的距离在 0.3 ~ 0.4 nm 范围内有利于激基复合物的形成,当分子间的距离在 0.4 ~ 0.7 nm 范围内有利于电致激基复合物的形成^[9])。然后利用分子动力学模块 Forcite 进行初级优化,再利用半经验的分子轨道模块 VAMP 进一步优化,最后利用 Dmol3 模块进行基于密度泛函的能量、轨道等性质的计算。函数选取 Perdew-Wang LDA 函数 (LDA-PWC), 基组选取 DND (double numerical plus d-function)^[11]。

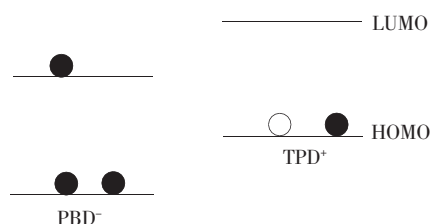


图 1 TPD^+ 、 PBD^- 的 HOMO 和 LUMO 能级图

Fig. 1 The HOMO and LUMO energy level sketch of TPD^+ and PBD^-

3 结果与讨论

3.1 电致激基复合物 (TPD^+PBD^-) 的稳定性与几何结构

图 2(a) 为 TPD 和 PBD 的分子结构式,图 2(b) 为优化后的 (TPD^+PBD^-) 的几何构型,两个分子总体上是平行分布的。图中所示的 TPD 的两 C 原子到 PBD 的 O、C 原子的距离分别为 0.6 nm 和 0.7 nm,两个分子之间的垂直距离大约在 0.6 nm 左右。电致激基复合物 (TPD^+PBD^-) 的

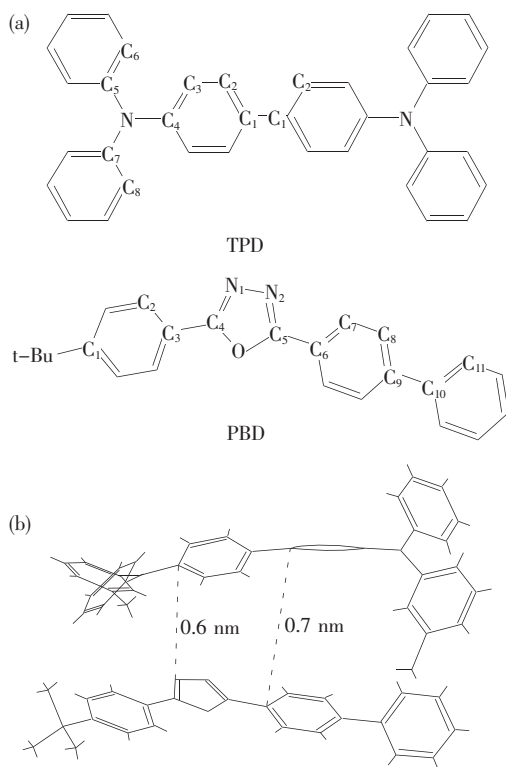


图 2 (a) TPD 和 PBD 的分子结构式; (b) 优化的电致激基复合物 (TPD^+PBD^-) 的几何结构

Fig. 2 (a) Molecular structures of TPD and PBD; (b) The optimized geometrical structure of the electroplex (TPD^+PBD^-)

表 1 TPD 和 PBD 的离子态、中性态、电致激基复合物 (TPD⁺PBD⁻) 中部分键长 (nm)、键角 (°)、扭曲角 (°)

Table 1 Relevant bond distances, bond angles and torsional angles of the optimized geometries of ionic, neutral and electroplex states of TPD and PBD

TPD	N—C ₄ /	N—C ₅ /	N—C ₇ /	C ₁ —C ₁ '/	C ₃ C ₄ NC ₅ /	C ₆ C ₅ NC ₄ /	C ₈ C ₇ NC ₄ /	C ₂ 'C ₁ 'C ₁ C ₂ /	∠C ₄ NC ₇ /	∠C ₇ NC ₅ /	∠C ₅ NC ₄ /
	nm	nm	nm	nm	(°)	(°)	(°)	(°)	(°)	(°)	(°)
离子态 TPD ⁺	0.138 2	0.140 6	0.140 4	0.144 1	-150.0	39.6	-144.0	-19.8	120.6	119.2	120.3
电致激基复合物 中的 TPD ⁺	0.140 7	0.141 0	0.142 0	0.145 9	-151.0	36.6	-139.2	-28.1	119.6	118.2	122.1
中性态 TPD	0.140 1	0.140 4	0.140 2	0.145 5	-145.3	37.0	-146.4	-28.3	120.1	120.0	119.9

PBD	t-Bu—C ₁ /nm	C ₃ —C ₄ /nm	C ₅ —C ₆ /nm	C ₉ —C ₁₀ /nm	C ₂ C ₃ C ₄ N ₁ / (°)	N ₂ C ₅ C ₆ C ₇ / (°)	C ₈ C ₉ C ₁₀ C ₁₁ / (°)
	离子态 PBD ⁻	0.151 1	0.141 5	0.140 8	0.144 2	0.7	0.3
电致激基复合物中的 PBD ⁻	0.151 6	0.143 1	0.143 1	0.146 4	-0.3	0.5	129.3
中性态 PBD	0.151 1	0.143 3	0.143 2	0.145 9	-3.7	-2.7	33.1

总能量为 -73 170.2 eV, 与 TPD⁺ (-42 895.2 eV) 和 PBD⁻ (-30 270.4 eV) 的总能量之和 -73 165.6 eV 相比, 能量降低 4.6 eV, 即电致激基复合物 (TPD⁺PBD⁻) 处于能量更低的状态, 界面处的 TPD⁺ 与 PBD⁻ 结合形成的复合体结构更稳定, 表明离子态 TPD⁺ 与 PBD⁻ 容易形成电致激基复合物。

表 1 中列举了 TPD 和 PBD 的离子态、中性态、电致激基复合物 (TPD⁺PBD⁻) 中部分键长、键角以及扭曲角。电致激基复合物中 TPD⁺ 的结构和离子态 TPD⁺ 相比, 所有环与环之间的键长都伸长了, N—C₄、C₁—C₁'、N—C₇ 和 N—C₅ 分别伸长了 0.002 5, 0.001 8, 0.001 6, 0.000 4 nm, 而与中性态 TPD 相比, 它们分别伸长 0.000 6, 0.000 4, 0.000 8, 0.000 6 nm。扭曲角除了 C₈C₇NC₄ 和 C₃C₄NC₅ 外, C₆C₅NC₄、C₂'C₁'C₁C₂ 都和中性态的结构接近。除此之外, 在电致激基复合物、离子态、中性态中 TPD 的三个 C—N—C 键角的总和分别为 359.9°, 360.1°, 360.0°, 可见 N 周围的平面结构基本不变。总的来说, 激基复合物中 TPD⁺ 的结构更接近中性态 TPD, 但是 N 周围的扭曲角 C₈C₇NC₄ 和 C₃C₄NC₅ 没有表现出这一趋势, 主要是由于空间位阻所致。电致激基复合物中的 PBD⁻ 与离子态 PBD⁻ 相比, 环间的键长分别伸长了 0.000 5, 0.001 6, 0.002 3, 0.002 2 nm, 而与中性态相比, 相应的环间的键长都分别变化了 0.000 5, 0.000 2, 0.000 1, 0.000 5 nm。扭曲角 C₂C₃C₄N₁、N₂C₅C₆C₇ 的扭曲程度不大, 反映出 PBD 的结构具有很强的刚性。无论与离子态

还是中性态的 PBD 相比, C₈C₉C₁₀C₁₁ 的变化显著, 即几何扭曲主要发生在 PBD 末端的苯环上, 这也是空间位阻影响的结果。与离子态、中性态的 PBD 的结构相比, 电致激基复合物中 PBD⁻ 的结构更趋于中性态 PBD 的结构。以上分析表明, 电致激基复合物中存在着从 PBD⁻ 到 TPD⁺ 的电子转移。

3.2 电致激基复合物 (TPD⁺PBD⁻) 的电子结构

关于两种分子在界面处的状态, 除了单分子的激发和跃迁外, 还存在由这两种分子复合产生的分子间的激发态。分子间的复合物分为局部激发态激基复合物 (即激基复合物) 和电荷转移激基复合物 (即电致激基复合物)。

$$|DA\rangle^* = c_1 |DA\rangle_{loc}^* + c_2 |DA\rangle_{CT}^* \quad (1)$$

在式(1)中 c_1, c_2 反映了局部激发态激基复合物和电荷转移激基复合物分别在激基复合物中所占的比例。局部激发态激基复合物又由两个分量组成 $|DA\rangle_{loc}^* = a_1 |D^*A\rangle + a_2 |DA^*\rangle$, a_1, a_2 共同作用的结果反映了局部激发态激基复合物在 $|D^*A\rangle$ 和 $|DA^*\rangle$ 两个态之间的激子共振幅度。同样电荷转移的激基复合物也由两个分量组成 $|DA\rangle_{CT}^* = b_1 |D^+A^-\rangle + b_2 |DA^+\rangle$, b_1, b_2 共同作用的结果反映了电荷转移激基复合物在 $|D^+A^-\rangle$ 和 $|D^-A^+\rangle$ 两个态之间的激子共振幅度^[12]。在界面处具体产生怎样的复合态, 取决于施主和受主的亲和势和电离势的大小以及施主和受主的亲和势和电离势的差值。电子和空穴在电场的作用下分别沿相反的方向迁移, 在空穴传输层/电子传输层界面处积累, 形成电子-空穴对 $D^+ \cdots A^-$, 即分子激子; 当 D 和 A 的电离势 (HOMO) 的能量差

较大,即空穴注入势垒高,电子从 A⁻ 的 LUMO 跃迁到 D⁺ 的 HOMO 产生电子转移态 |A⁻D⁺> 的荧光发射,如图 3(a)过程,在这种相对得电子能力强的 D⁺ 和失电子能力强的 A⁻ 间形成的复合物表现出 |A⁻D⁺> 态,即形成电致激基复合物的电子转移。这样的跃迁比单分子跃迁释放的能量小,所以电致激基复合物的发射谱相对于单个分子的发射谱红移。如图 3(b)过程,如果 D 和 A 的电子亲和势(LUMO)的差比他们的电离势(HOMO)的差小,即电子注入势垒不是太高,那么大量的电子从 A⁻ 的 LUMO 转移到 D⁺ 的 LUMO 形成 D*, D* 和 A 两个分子逐渐靠近时,基态势能面是逐渐上升的,但是激发态势能面是先下降后上升的,存在一个最小值,这就是激基复合物形成的地方,所以激基复合物的形成必然伴随着 D 和 A 的 LUMO 的重叠。这样由分子激子形成的

激发态 D* 和 A 相互作用从而产生激基复合物 |D*A> 态。当然激基复合物除了由分子激子激发而成,施主或者是受主吸收光子激发产生的 D*(A*)与 A(D)相互作用也产生 |D*A> 或 |DA*> 态。

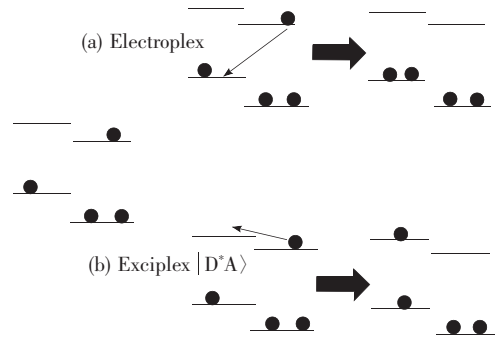


图3 OLED 中不同激发态产生步骤的示意图
Fig. 3 The generation process of different excited species in the OLED

表2 PBD 和 TPD 的 HOMO 和 LUMO 理论计算值

Table 2 Calculated energy levels of HOMO and LUMO for PBD and TPD

	PBD			TPD		
	HOMO	LUMO	E _g	HOMO	LUMO	E _g
实验值(Expt.)	-6.2 eV	-2.6 eV	3.6	-5.4 eV	-2.3 eV	3.1
理论值(Calc.)	-5.4 eV	-2.6 eV	2.8	-4.2 eV	-1.7 eV	2.5

PBD 和 TPD 的 LUMO 和 HOMO 理论计算值列于表 2, 可以看到 PBD 的 LUMO 值符合得很好, 而 HOMO 值却相差较大; TPD 的前线分子轨道的理论值和实验值也有较大差距; 比较它们的带隙发现, 理论计算值都小于实验值^[13]。我们在模拟计算中发现无论用局域密度近似(LDA)或者是用广义梯度近似(GGA)都使计算值小于实验值。虽然理论计算低估了 PBD 和 TPD 的能级及带隙, 但趋势是正确的, 所以它们的能级差的比较仍具有指导意义。

从图 4 可以看到, PBD 和 TPD 的 LUMO 之间的差值为 0.9 eV (2.6 - 1.7 = 0.9 eV) 小于它们 HOMO 之间的差值 1.2 eV (5.4 - 4.2 = 1.2 eV)。即在 TPD/PBD 界面处空穴注入的势垒高, 那么电子从 PBD 注入到 TPD 比空穴从 TPD 注入到 PBD 要容易得多, 因此在界面处空穴将被阻挡并累积。相反, 电子注入的势垒只有 0.9 eV, 因此电子一部分会累积在界面处, 一部分电子跃迁到了 TPD 上, 从而产生 TPD 的激子发射及激基复合物(PBD/TPD*)的发射。随着电压的增加, 界面

处的空穴累积到一定程度, PBD 上的电子就会与 TPD 上的空穴结合形成界面处的电子转移, 产生电致激基复合物的发射。计算得到 (PBD⁻TPD⁺) 的 HOMO 和 LUMO 之间的带隙是 1.3 eV, 这个结果和 PBD 的 LUMO 能级到 TPD 的 HOMO 能级差 1.6 eV (4.2 eV - 2.6 eV = 1.6 eV) 相近, 这个结果在分子轨道的水平上说明电致激基复合

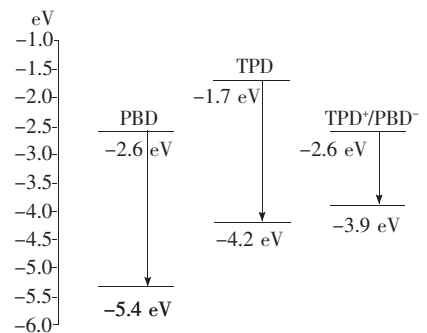


图4 PBD, TPD 和 (TPD⁺PBD⁻) 的 HOMO 和 LUMO 的能级图

Fig. 4 Calculated energy level structure of HOMO and LUMO of PBD, TPD, and (TPD⁺PBD⁻)

物的发光是电子从 PBD^- 的 LUMO 到 TPD^+ 的 HOMO 之间的辐射跃迁。

电致激基复合物 ($\text{TPD}^+ \text{PBD}^-$) 前线分子轨道如图 5 所示,从图中可以看到,电致激基复合物 ($\text{TPD}^+ \text{PBD}^-$) 的 HOMO 电子云定域在 TPD 上,而且主要集中在中间的联苯环上,两端与氮相连的苯环和甲基苯环上也有分布。电致激基复合物

($\text{TPD}^+ \text{PBD}^-$) 的 LUMO 电子云定域在 PBD 上,而且主要集中在中间的噁二唑环以及和它相连的苯环上,而叔丁基上没有电子云分布。从图中可以看到,它们之间的电子云并没有重叠,表明电致激基复合物 ($\text{TPD}^+ \text{PBD}^-$) 的发光即是由于电子从 PBD 的 LUMO 能级跃迁到 TPD 的 HOMO 能级所产生的。

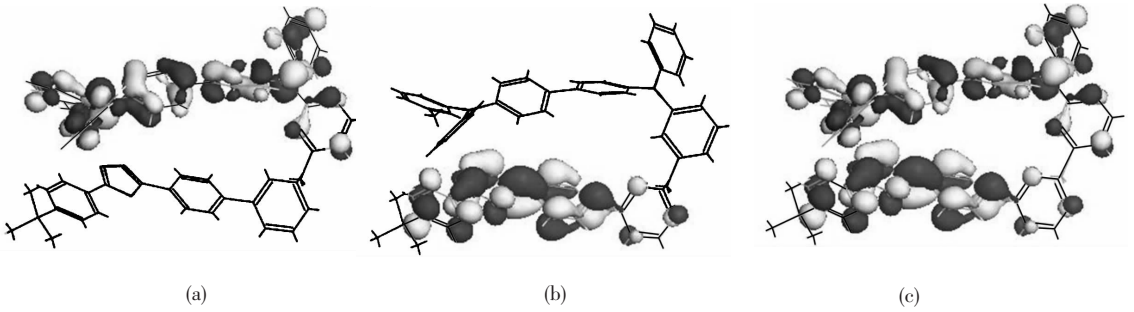


图 5 ($\text{TPD}^+ \text{PBD}^-$) 的 (a) HOMO; (b) LUMO; (c) HOMO 和 LUMO 的电子云分布

Fig. 5 The electron cloud distribution of electroplex ($\text{TPD}^+ \text{PBD}^-$) (a) HOMO; (b) LUMO; (c) HOMO and LUMO.

4 结 论

对 TPD^+ 和 PBD^- 形成的电致激基复合物的分子结构和轨道进行了理论研究。从能量的角度说明 TPD^+ 和 PBD^- 更容易形成电致激基复合物;通过对分子结构参数的研究发现当 PBD^- 和 TPD^+ 放置的位置合适的时候,电子是从 PBD^- 转

移到 TPD^+ ;通过前线分子轨道的分析,电致激基复合物的能隙是 1.3 eV,与 PBD 的 LUMO 到 TPD 的 HOMO 的能级差 1.6 eV 近似;轨道电子云的分布没有重叠,从理论上证明了电致激基复合物的电子转移即是从定域于 PBD 的 LUMO 轨道到定域于 TPD 的 HOMO 轨道的跃迁,从而产生新的红移的发射峰,拓宽了电致发光光谱。

参 考 文 献:

- [1] D'Andrade B W, Holmes R J, Forrest S R. Efficient organic electrophosphorescent white-light-emitting device with a triple doped emissive layer [J]. *Adv. Mater.*, 2004, **16**(7):624-628.
- [2] Deshpande R S, Bulovi V, Forrest S R. White-light-emitting organic electroluminescent devices based on interlayer sequential energy transfer [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1999, **75**(7):888-890.
- [3] Wang Guangde, Wang Li, Jiang Wenlong, et al. The impact of different DPVBi thickness and position on the organic light-emitting devices [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2007, **28**(2):189-192 (in Chinese).
- [4] Ding Guiying, Wang Jin, Wang Guangde, et al. High luminance white organic light-emitting devices based on rubrene dopant [J]. *Chin. J. Liquid Cryst. Disp.* (液晶与显示), 2008, **23**(1):5-11 (in Chinese).
- [5] Jin Yong, Deng Zhenbo, Xiao Jing, et al. The effect of PBD as electron-transporting layer in Alq_3 :DCJTb organic light emitting devices [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2008, **29**(1):23-26 (in English).
- [6] Gebler D D, Wang Y Z, Blatchford J W, et al. Exciplex emission in bilayer polymer light-emitting devices [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1997, **70**(13):1644-1646.
- [7] Feng J, Li F, Gao W, et al. White light emission from exciplex using tris-(8-hydroxyquinoline) aluminum as chromaticity-tuning layer [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2001, **78**(25):3947-3949.
- [8] Granlund T, Pettersson L A A, Anderson M R, et al. Interference phenomenon determines the color in an organic light emitting diode [J]. *J. Appl. Phys.*, 1997, **81**(12):8097-8104.
- [9] Kalinowski J, Cocchi M, Marco P D, et al. Impact of high electric fields on the charge recombination process in organic

- light-emitting diodes [J]. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2000, **33**(19):2379-2387.
- [10] Yang S Y, Zhang X L, Hou Y B, *et al.* Charge carriers at organic heterojunction interface: Exciplex emission or electroplex emission [J]. *J. Appl. Phys.*, 2007, **101**(9):096101-1-3.
- [11] Yu G, Yin S W, Liu Y Q, *et al.* Structures, electronic states, and electroluminescent properties of a zinc(II) 2-(2-hydroxyphenyl)benzothiazolot complex [J]. *J. Am. Chem. Soc.*, 2003, **125**(48):14816-14824.
- [12] Cocchi M, Virgili D, Sabatini C, *et al.* Organic electroluminescence from singlet and triplet exciplexes: Exciplex electrophosphorescent diode [J]. *Chem. Phys. Lett.*, 2006, **421**(4-6):351-355.
- [13] Zhong Shouxian, Li Guangshan, Du Gonghe, *et al.* DFT study on the molecular spectra and excited state of pentathienoacene [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2008, **29**(5):821-826 (in Chinese).

Theory on Geometrical Structure and Electronic Configuration of Electroplex at the TPD/PBD Interface in Organic Light-emitting Diodes

LEI Jun-feng¹, HAO Yu-ying¹, FAN Wen-hao¹, FANG Xiao-hong², XU Bing-she²

(1. Department of Physics, The College of Science, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China;

2. The Key Laboratory of Interface Science and Engineering in Advanced Materials,

Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China)

Abstract: The studies of geometrical and electronic structure of electroplex(TPD^+PBD^-), which is formed by TPD^+ and PBD^- , were carried out by simulation calculation. The analysis of the geometrical structure data of electroplex (TPD^+PBD^-) suggests that the electron transfer occurs from PBD^- side to TPD^+ side and the electroplex between TPD^+ and PBD^- can be formed efficiently when the position of PBD^- and TPD^+ is appropriate. The electroplex (TPD^+PBD^-) is energetically favored comparing with isolated ions TPD^+ or PBD^- . This result implied that the ionic state TPD^+ and PBD^- at the interface TPD/PBD inside OLED tends to form electroplex. The lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) of (TPD^+PBD^-) is localized at PBD^- side and highest occupied molecular orbital (HOMO) of (TPD^+PBD^-) is localized at TPD^+ side. The energy gap of electroplex (TPD^+PBD^-) is 1.3 eV, which is approximately equal to the energy difference of 1.6 eV between LUMO of PBD and HOMO of TPD. The emission of electroplex is theoretically intermolecular radiation transition from LUMO of PBD to HOMO of TPD.

Key words: interface; electroplex; simulation calculation

CLC number: O641.121; O482.31

PACS: 71.15.Mb

PACC: 3120J

Document code: A