

포로히-블루머(Forouhi-Bloomer) 분산식을 이용한 유기발광물질 Alq₃의 광학 상수 결정

정부영 · 우석훈 · 이석목 · 황보창권[†]

인하대학교 이과대학 물리학과

Ⓣ 402-751 인천광역시 남구 용현동 253번지

(2002년 11월 8일 받음, 2003년 2월 7일 수정본 받음)

유기발광물질 Alq₃의 복소굴절률을 양자역학적 흡수이론이 바탕인 포로히-블루머(Forouhi-Bloomer) 분산식[Phys. Rev. B 34, 7018(1986)]을 이용하여 1.5~6 eV의 영역에서 계산하였다. 분광광도계를 이용하여 측정된 Alq₃ 박막의 흡수 스펙트럼에서 흡수 피크의 위치와 폭으로부터 포로히-블루머 분산식의 변수 A, B, C의 초기 근사값을 결정하였다. 기판으로 사용한 비정질실리카(fused silica)의 굴절률은 분광광도계로부터 측정된 투과율과 반사율 스펙트럼으로부터 셀마이어(Sellmeier) 분산식을 적용하여 계산하였다. 기판의 굴절률과 분광광도계에서 측정된 Alq₃ 박막의 투과율과 반사율 스펙트럼에 포로히-블루머 분산식을 이용한 비선형 최소자승법 곡선맞춤을 하여 Alq₃의 복소굴절률을 계산할 수 있었다.

주제어 : optical constants, Forouhi-Bloomer dispersion relations, light emitting materials, Alq₃.

I. 서 론

광학 박막은 광·전자 산업의 성장과 함께 디스플레이, 광통신, 레이저 반사경, 간섭필터, 의료 기기, 태양광 조절막 등에 폭넓게 이용되고 있다.^[1] 이와 같은 광학 박막을 각각의 광학기기 특성에 맞게 설계하고 제작하거나, 물질의 전기적 특징들을 이해하기 위해서는 증착하는 물질의 광학상수를 정확히 계산할 수 있어야 한다.

물질의 광학 상수는 물질의 원자 구조를 거시적으로 나타내는 물리량으로 $N = n - ik$, 또는 복소유전함수의 형태인 $\epsilon = \epsilon_1 - i\epsilon_2$ 와 같이 나타낼 수 있으며, 두 식 사이에는 $\epsilon = N^2$ 의 관계가 있다. 따라서, $\epsilon_1 = n^2 - k^2$, $\epsilon_2 = 2nk$ 와 같이 쓸 수 있다. 이와 같은 광학 상수는 증착 조건에 따라 변화되기 때문에 광학상수를 정확히 결정하기 위한 다양한 방법이 연구되어지고 있다.^[2,3] 흡수가 없거나 적은 경우에 측정된 투과율과 반사율 스펙트럼을 이용하는 포락선 방법,^[4] 빛의 편광상태 변화를 이용하는 타원법,^[5,6] 표면 플라즈몬 공명을 이용한 방법,^[3,7] 광정보통신 분야에서 광학 소자로 널리 사용하고 있는 광학 도파로를 이용하는 방법,^[8] 넓은 파장 영역에서 측정된 반사율로부터 광학 상수를 결정하는 크라머스-크로니히 분산을 이용하는 방법과 양자역학적 흡수이론을 바탕으로 한 포로히-블루머 방법이 있다.^[3,6,9,10,20]

원자 또는 분자에 존재하는 낮은 에너지 상태의 원자가 외부로부터 에너지(E)를 공급받게 되면 높은 에너지 준위로 여기된다. 이렇게 여기된 원자들은 일정한 시간동안 높은 에너지 준위 상태에 머무르다가 열이나 빛 에너지를 발산하면서 바닥상태로 천이하게 된다. 원자가 광자를 흡수할 확률로부터

단위 시간 당 흡수 에너지를 계산하고 이를 입사한 빛의 세기로 나누면 입사한 빛의 흡수계수가 되며, 이로부터 소멸계수 $n(E)$ 를 계산할 수 있다. 이때 $n(E)$ 는 $k(E)$ 를 인과원리(principle of causality)에 의하여 물질의 선형 감수율의 실수부와 허수부를 연결하는 크라머스-크로니히 분산 관계에 대입하여 계산할 수 있다.

본 연구에 사용한 유기물인 8-hydroxyquinoline aluminum(Alq₃)는 1987년에 Tang과 VanSlyke에 의해 보고된 유기발광물질이며,^[11] 유기발광소자의 연구에 사용되는 대표적인 저분자 물질이다(그림 1). Alq₃는 낮은 인가전압, 높은 형광효율로 인해 실질적인 전기 발광소자에 대한 적용 가능성 및 대형 디스플레이에 대한 개발 잠재력^[12]을 시사하고 있으며, 현재 이미 상품화 단계에 이르고 있다. 디스플레이에 적용할 경우 소자의 구조에 대한 광학적 효율의 극대화^[13,14,15]나 단색광을 위한 미세공동구조의 광학적 연구도 병행되고 있으며,^[16,17,18] 이에 따른 유기발광물질의 복소굴절률에 대한 연구도 필요한 실정이다. 이에 따라 가변입사각 분광타원법(Variable Angle Spectroscopic Ellipsometry)이나 포로히-블루머 분산식을 이용한 유기발광물질의 광학상수 및 두께 결정이 보고되고 있다.^[18,19] 가변입사각 분광타원법을 이용한 분석에서는 표면거칠기층을 반영하기 위하여 공기/(박막+void)/박막/기층의 4상계 모델을 적용하였으며,^[18] Masenelli등은 분광타원법에 $J=1$ 인 경우의 포로히-블루머 분산식을 적용하여 가시광선 영역에서의 Alq₃ 박막에 대한 굴절률(2.2~3.3 eV)을 보고하고 있다.^[19]

본 연구에서는 양자역학적 흡수이론을 바탕으로 한 포로히-블루머 분산식을 소개하고, UV를 포함하는 가시광선 영역인 200~800 nm(1.5~6 eV)의 넓은 분광영역에서 분광광도계로부터 유기발광물질 Alq₃의 투과율, 반사율을 측정하였다. 증착된 Alq₃ 박막은 포로히-블루머 분산식의 모델을 단순화하기 위하

[†]E-mail: hwangbo@inha.ac.kr

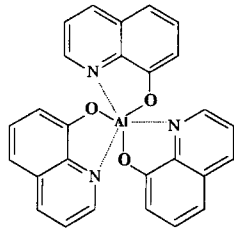


그림 1. Alq₃의 화학구조도.

여 균일한 단일층 박막으로 가정하였다. 측정된 투과율에 로 그를 취하여 흡수 스펙트럼(absorbance)을 구하고 이 흡수 스펙트럼으로부터 초기 포로히-블루머 계수들을 결정하였으며, 분광광도계로부터 측정된 투과율과 반사율 스펙트럼을 포로히-블루머 분산식에 대입하고 비선형 최소자승법 곡선맞춤으로 Alq₃의 광학상수를 구하였다.

II. 이 론

물질 내에서의 빛의 흡수와 방출은 전자가 에너지띠 사이에서 전이될 때 나타난다. E_c와 E_v를 각각 전도띠와 가전자띠에서의 에너지라고 하고 두 에너지띠 사이의 차이를 E_g라 할때, E_g는 가전자띠에서 전도띠로 전이가 일어날 최소 에너지이며, 보다 작은 에너지의 빛에 대해서는 물질내에서 흡수가 일어나 지 않고 투과한다. 소멸계수 k는 흡수계수 α와 다음과 같은 관계식을 가진다.

$$k = \alpha \frac{\lambda}{4\pi} = \frac{\Phi\Theta}{I_o} \frac{\lambda}{4\pi} \quad (1)$$

여기서 I_o는 입사한 빛의 세기이며, Φ와 Θ는 각각 전자가 낮은 에너지 준위 a에서 높은 에너지 준위 b로 ħω인 에너지를 흡수하여 전이할 때 단위시간당 방출하거나 흡수하는 확률인 황금률(golden rule)에 ħω인 광자를 곱한 단위시간당 에너지와 단위 부피당 전이할 수 있는 가지 수를 의미한다.^[6,20] 이로부터 다음과 같은 식을 구할 수 있다.

$$k(E) = \frac{A(E - E_g)^2}{E^2 - BE + C} \quad (2)$$

여기서

$$A = constxyalxb^2 \quad (2-a)$$

$$B = 2(E_b - E_a) \quad (2-b)$$

$$C = (E_b - E_a)^2 + \left(\frac{\hbar\gamma}{2}\right)^2 \quad (2-c)$$

이며, γ의 역수는 여기상태에서 전자의 수명(life time)에 해당 하고, alxb는 두 에너지 상태의 분극 행렬 요소(dipole matrix element)가 된다. 그리고 E_a와 E_b는 각각 준위 a, b에서의 에너지를 의미한다.

이때 n(E)는 k(E)를 크라머스-크로니히 분산 관계에 대입함으로써 계산할 수 있으며 다음과 같다.

$$n(E) = n(\infty) + \frac{B_o E + C_o}{E^2 - BE + C} \quad (3)$$

여기서

$$B_o = \frac{A}{Q} \left(-\frac{B^2}{2} + E_g B - E_g^2 + C \right) \quad (3-a)$$

$$C_o = \frac{A}{Q} \left((E_g^2 + C) \frac{B}{2} - 2E_g C \right) \quad (3-b)$$

$$Q = \frac{1}{2} (4C - B^2)^{\frac{1}{2}} \quad (3-c)$$

이며, n(∞)는 높은 에너지에서 물질의 굴절률이다.

식 (2), (3)을 포로히-블루머(Forouhi-Bloomer) 분산식이라고 한다. 포로히-블루머 분산식은 비정질 반도체와 유전체 같이 흡수 피크가 하나인 물질에 적용할 수 있으며, 다결정 반도체, 결정반도체, 유전체와 금속과 같이 흡수 피크가 여러 개인 경우도 각 흡수 피크에 대해서 같은 방법을 사용할 수 있다. 각 흡수 피크는 에너지띠 사이에서 흡수 전이할 때 서로 독립이기 때문에 두 식은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$k(E) = \sum_{i=1}^J \frac{A_i (E - E_{g_i})^2}{E^2 - B_i E + C_i} \quad (4)$$

$$n(E) = n(\infty) + \sum_{i=1}^J \frac{B_{oi} E + C_{oi}}{E^2 - B_i E + C_i} \quad (5)$$

이때 n는 흡수 스펙트럼에서 흡수 피크의 수에 의해 결정되며, A_i, B_i, C_i (i=1, 2, 3, ..., J) 각각에 대한 값을 구해야 한다. Si, Ge, GaP, InAs 등과 같은 반도체의 경우에는 J=4인 4개의 항, 14개의 계수를 가지고 곡선맞춤하면 잘 맞는 것으로 알려져 있다.^[6,9,10]

III. 실험 결과 및 분석

3.1. 굴절률을 이용한 곡선맞춤

소멸계수 k에 대한 최대값은 전이확률이 가장 높은 경우인 ħω=E_b-E_a 일 때 발생하며 최대의 흡수 피크를 나타낸다. Aspnes등이 보고한 단결정 규소 Si의 경우 소멸계수(그림 2(a))로부터 4.2~4.3 eV 근처에서 가장 큰 흡수 피크를 보이고 있으며, 3.4, 3.7, 5.3 eV 근처에서 약한 흡수 어깨가 있음을 알 수 있다.^[21] 이들로부터 계수 B_i의 초기값을 결정할 수 있으며 식 (2-b)로부터 계수 B_i는 흡수 피크 에너지의 두 배가 되는 값이 된다. 계수 C_i는 전자가 윗 준위에서 유한한 수명을 가지기 때문에 결국 흡수 피크 에너지의 제곱으로 근사할 수 있으며, 4C-B²>0인 조건을 이용하여 C를 결정할 수 있다. 또한 A_i는 두 에너지 준위 사이에서 흡수 전이가 일어날 확률에 비례하므로 흡수 피크의 크기에 비례하게 된다. 이와 같은 특성을 이용하여 포로히-블루머는 단결정 규소에 대한 계수를 표 1과 같이 보고하였다.^[10]

그림 2는 표 1의 계수를 포로히-블루머 관계식인 식 (4)와 (5)에 대입하여 계산한 단결정 규소의 복소굴절률과 Aspnes등이 보고한 단결정 규소의 복소굴절률을 비교한 것이다. 또한 그림 2에서와 같이 식 (4)와 (5)를 사용하여 굴절률과 소멸계

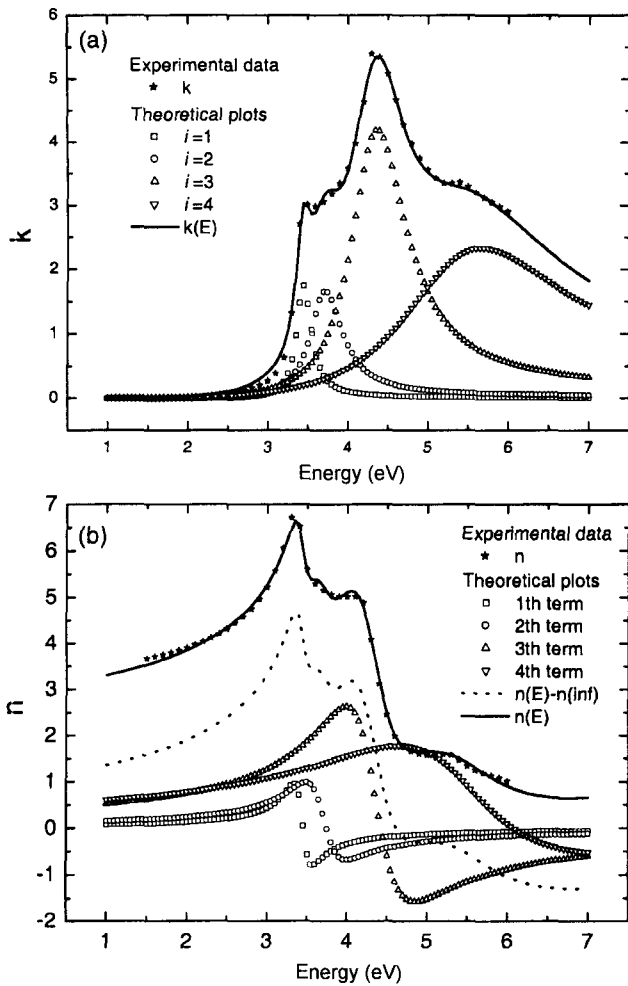


그림 2. Si의 복소굴절률 ★: 실험값(Aspnes et al. ref. 21), —: 표 1의 계수값을 이용하여 포로히-블루머 분산식으로 계산한 이론값, 표 1의 계수값에서 i 를 독립항으로 하여 식 (2)와 (3)에 대입하고 계산한 이론값, □: $i=1$, ○: $i=2$, △: $i=3$, ▽: $i=4$. (a) Si 소멸계수, (b) Si의 굴절률, ... : $\sum_{i=1}^J \frac{B_{oi}E + C_{oi}}{E^2 - B_iE + C_i}$ 식에서 $J=4$ 까지의 이론값.

Table 1. Si에 대한 포로히-블루머 분산식의 계수값(Forouhi et al. ref. 10.).

	i	A_i	B_i (eV)	C_i (eV ²)	$n(\infty)$	E_g (eV)
Si	1	0.00405	6.885	11.864	1.950	1.06
	2	0.01427	7.401	13.754		
	3	0.06830	8.634	18.812		
	4	0.17488	10.652	29.841		

수를 $J=1\sim 4$ 까지 네 개의 항에 해당하는 그래프로 독립적으로 분리시킬 수 있다. 각 항에 대하여 계수 A_i 의 값이 증가하거나 $C_i = B_i^2/4$ 가 될수록 $n(E)$ 와 $k(E)$ 가 증가하게 된다. $k(E)$ 에 대한 그래프에서 흡수 피크의 폭이 넓어지는 경우에는 B_i 의 값을 여러 개 사용할 수도 있으나 $i=4$ 의 경우처럼 계수 A_4 의 값을 다른 항의 계수(A_1, A_2, A_3)들에 비해 크게 하고 동시에 계수 C_4 의 값을 $B_4^2/4$ 의 값에 비해 크게 하여 비선형

최소자승법 곡선맞춤을 할 수도 있다. 또한 $n(\infty)$ 는 $n(\infty) \geq 1$ 이므로, $n(E)$ 의 값을 증가시키거나 감소시키는 역할을 한다. 이와 같은 특징을 이용한 포로히-블루머 분산식에서 복소굴절률의 비선형 곡선맞춤은 일반적으로 $J=4$ 인 4개의 항, 14개의 계수를 가지고 포로히-블루머 분산식에 대입한 후 계산하게 된다. 곡선맞춤시에는 포로히-블루머 분산식이 독립된 항들의 선형 합으로 나타내어지는 특징을 이용하여 장파장쪽에 위치한 흡수 피크부터 곡선맞춤을 하며 단파장쪽으로 이동하는 것이 좋다. 따라서 흡수스펙트럼에서 흡수 피크의 수가 4개 이상이 존재하게 되면, 비선형 곡선맞춤이 단파장쪽에서 잘 맞지 않게 된다. 또한 흡수 피크와 피크 사이에 흡수 어깨의 존재로 인해서도 이와 같은 결과가 발생한다. 이때는 흡수 스펙트럼에서 흡수 피크나 흡수 어깨의 존재를 확인하고 J 의 항의 수를 증가시키면서 비선형 곡선맞춤을 해야한다. 이와 같은 특성을 이용하여 초기 계수 값들을 결정할 수 있으며, 포로히-블루머 분산식에 비선형 최소자승법 곡선맞춤을 이용하면 $n(E)$ 와 $k(E)$ 의 값이 주어져 있을 경우 포로히-블루머 분산식의 계수를 구할 수 있다.

3.2. 스펙트럼을 이용한 곡선맞춤

물질의 유전상수나 굴절률을 알면 아래의 식 (6)과 (7)을 이용하여 기판 위에 증착된 박막의 투과율과 반사율을 계산할 수 있다.

$$T_f = \frac{\text{Re}(Y_{sub})}{Y_o} |\tau|^2 = \frac{4Y_o \text{Re}(Y_{sub})}{(Y_o B' + C')(Y_o B' + C')^*} \quad (6)$$

$$R_f = |\rho|^2 = \left| \frac{Y_o - C'/B'}{Y_o + C'/B'} \right|^2 \quad (7)$$

여기서 τ 와 ρ 는 각각 박막의 투과계수와 반사계수이며, Y_o 와 Y_{sub} 는 각각 공기와 기판에서의 광학 어드미턴스로 공기와 기판에서의 자기장 H 와 전기장 E 의 비를 의미한다. 또한 규격화된 전기장 B' 와 규격화된 자기장 C' 는 행렬식으로부터 계산할 수 있으며 아래와 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{bmatrix} B' \\ C' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\delta & i \frac{\sin\delta}{Y_f} \\ i Y_f \sin\delta & \cos\delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ Y_{sub} \end{bmatrix} \quad (8)$$

이때 Y_f 는 박막에서의 어드미턴스이며, $\delta = \frac{2\pi}{\lambda}(n-ik)d\cos\theta$ 이고, d 와 θ 는 각각 박막의 두께와 빛의 입사각이다.^[20,22]

따라서 분광광도계로부터 측정된 투과 및 반사 스펙트럼과 포로히-블루머 분산식 (4), (5)를 이용하여 곡선맞춤하게 되면 물질의 복소굴절률을 계산할 수 있다. 분광광도계에서 측정된 흡수 스펙트럼에서 흡수 피크의 위치와 폭으로부터 변수 B_i 와 A_i, C_i 의 초기값을 근사시킬 수 있다. 투과율과 반사율 스펙트럼을 이용하여 식 (4)과 (5)에서의 변수 $A_i, B_i, C_i, n(\infty), E_g$ 를 계산할 수 있으므로, 물질의 굴절률과 소멸계수 및 박막의 두께를 계산할 수 있다. 하지만, 이 경우에는 기판의 뒷면 효과도 고려하여야 한다. 유리, 플라스틱, Si 웨이퍼 등의 기판은 사용하는 빛의 파장에 비해 두께가 매우 두꺼우므로 두

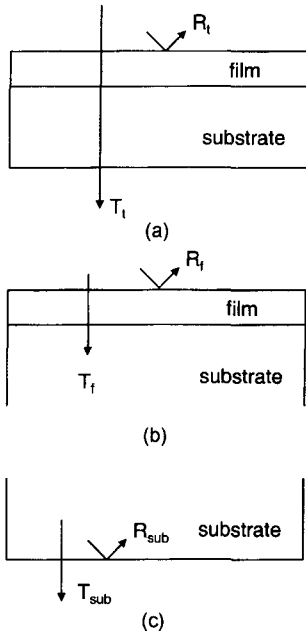


그림 3. 공기중에서 기관의 뒷면 효과를 고려한 반사율과 투과율. (a) 입사매질이 공기이며, 박막과 경계면이 두 개인 기관의 반사율(T_f)과 투과율(R_f) (b) 입사매질이 공기이며, 박막과 경계면이 1개인 기관의 반사율(R_f)과 투과율(T_f) (c) 입사매질이 기관(유리)이며, 경계면이 한 개인 기관의 반사율(R_{sub})과 투과율(T_{sub}).

경계면 사이에서 단지 비간섭성 다중 반사만이 일어나며, 기관의 흡수가 없는 경우 분광광도계를 통하여 측정된 투과율 T 와 반사율 R 는 그림 3의 기호들을 이용하여 다음과 같이 표현할 수 있다.^[20]

$$T_f = \frac{T_f T_{sub}}{1 - R_f R_{sub}} \quad (9)$$

$$R_f = \frac{R_f - R_{sub}(R_f^2 - T_f^2)}{1 - R_f R_{sub}} \quad (10)$$

여기서 T_{sub} 와 R_{sub} 는 기관과 공기의 경계면에서의 투과율과 반사율이다. 분광광도계로부터 측정된 비정질실리카(fused silica) 기관의 투과율 및 반사율 스펙트럼과 셀마이어(Sellmeier) 분산식을 이용하여 기관의 굴절률을 계산할 수 있다. 굴절률을 이용하여 T_{sub} 와 R_{sub} 를 계산하며, 이때 입사매질이 기관이고 기관에 해당하는 것이 공기가 된다. 그림 4(a)는 비정질실리카 기관의 투과율과 반사율 스펙트럼이며 그림 4(b)는 측정된 투과율과 반사율 스펙트럼으로부터 셀마이어 분산식을 적용하여 구한 비정질실리카의 굴절률이다.

3.3. 박막의 제작 및 굴절률 계산

알루미늄이 코팅된 텅스텐 보트를 사용하였으며 기관으로는 비정질실리카를 사용하였다. 진공도 5×10^{-6} torr 이하에서 열저항법으로 1 \AA/s 의 증착률을 유지하면서 비정질실리카 기관 위에 Alq_3 를 증착하였다. 제작된 시료의 투과율과 반사율은 분광광도계(Varian, Cary500)를 이용하여 측정하였다. 또한 포로

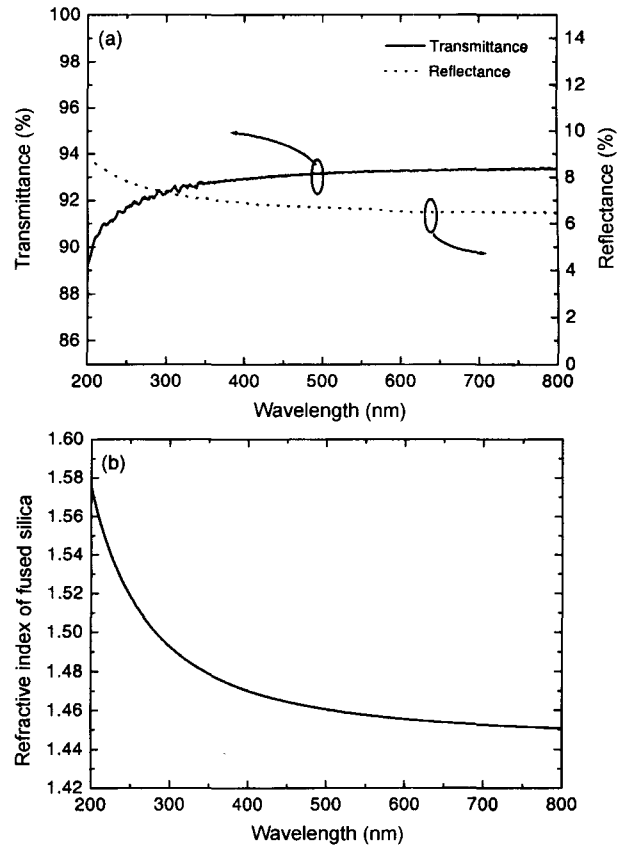


그림 4. (a) 분광광도계를 이용하여 측정된 비정질실리카 기관의 투과율과 반사율 (b) 측정된 스펙트럼을 이용하여 셀마이어 분산식에 대입하여 구한 기관의 굴절률.

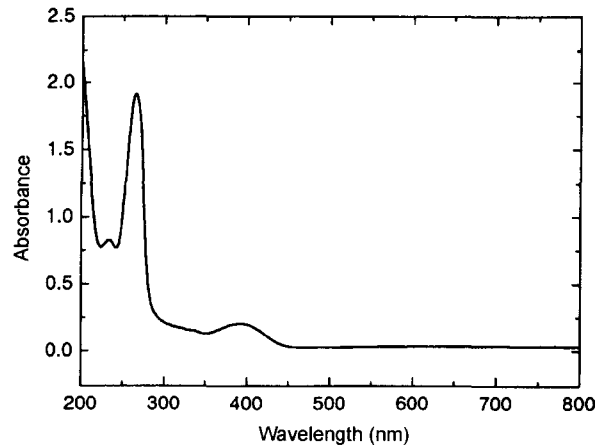


그림 5. 분광광도계로부터 측정된 Alq_3 박막의 흡수 스펙트럼 [$-\log(\%T/100)$].

히블루머 분산식을 바탕으로 한 비선형 최소자승법 곡선맞춤 프로그램을 짜서 측정된 스펙트럼으로부터의 광학상수 결정에 이용하였다.

그림 5는 분광광도계로부터 측정된 Alq_3 의 투과율에 $-\log(\%T/100)$ 을 취한 흡수 스펙트럼(absorbance)이다. 다중반사에 의한 간섭현상으로 인해 측정된 흡수 스펙트럼으로부터 소멸계수 k 를 구할 수 없으므로 흡수 스펙트럼으로부터는 흡수 피크의 위치만을 확인하였으며, Alq_3 의 경우 스펙트럼을 통해

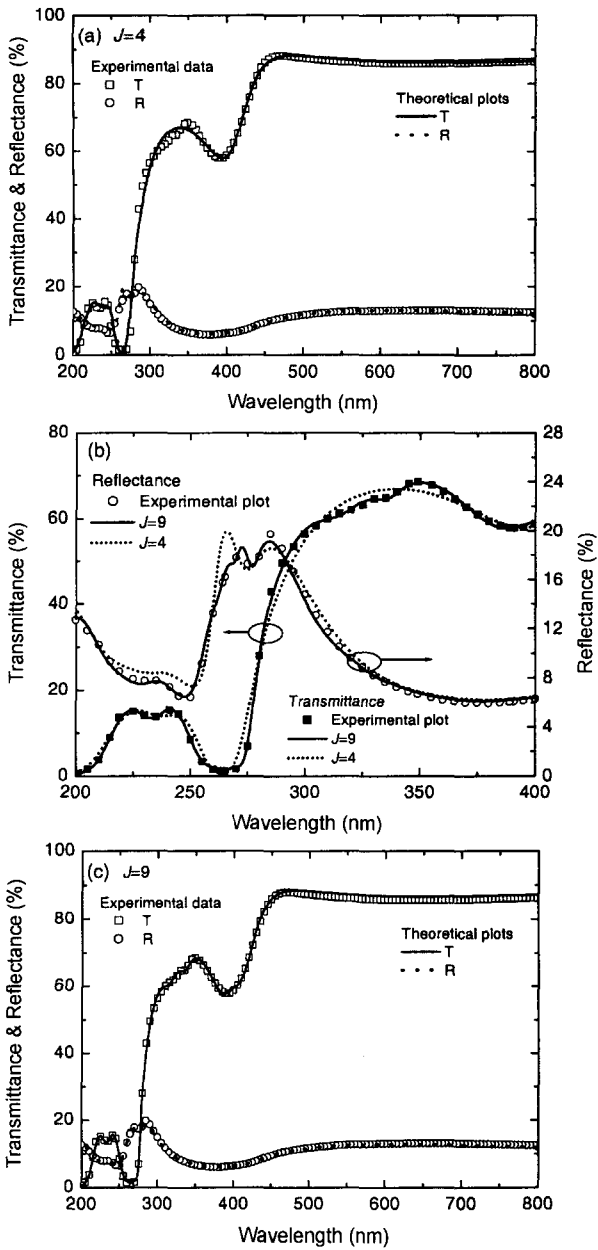


그림 6. (a) □: 분광광도계를 이용하여 측정된 Alq₃ 박막의 투과율, ○: 반사율 스펙트럼과 J=4의 경우에 포로히-블루머 분산식에 비선형 자승법을 이용한 곡선맞춤의 결과 계산된 Alq₃ 박막의 투과율(실선)과 반사율 스펙트럼(점선). (b) 자외선 영역에서 J=4, 9 일 때의 곡선맞춤 결과와 측정 스펙트럼의 비교 (실선: J=9일 경우의 투과율과 반사율 스펙트럼, 점선: J=4일 경우의 투과율과 반사율). (c) J=9일 경우에 포로히-블루머 분산식에 비선형 자승법을 이용한 곡선맞춤의 결과 계산된 Alq₃ 박막의 투과율(실선)과 반사율 스펙트럼(점선).

232, 265, 395 nm 근처에서 세 개의 흡수 피크가 있음을 알 수 있었다. 이로부터 B₁, B₂, B₃의 초기 값은 각각 6.278, 9.357, 10.688 eV이었다. J=4의 경우로 비선형 최소자승법을 이용한 곡선맞춤을 하기 위해서 하나의 흡수 피크를 더 결정해야 한다. 흡수 스펙트럼에서 보듯이 200 nm 근처에서의 강한 흡수

Table 2. J=4와 J=9의 경우에 대한 Alq₃ 박막의 포로히-블루머 분산식의 계수값.

	<i>i</i>	<i>A_i</i>	<i>B_i</i> (eV)	<i>C_i</i> (eV ²)	<i>n</i> (∞)	<i>E_g</i> (eV)
Alq ₃ (J=4)	1	0.02106	6.0236	9.1380	1.502	2.40
	2	0.00349	9.3847	22.0382		
	3	0.00163	10.3939	27.1020		
	4	0.01625	12.7437	40.9350		
Alq ₃ (J=9)	1	0.01009	5.9562	8.9053	1.502	2.40
	2	0.00314	6.4008	10.2765		
	3	0.00012	7.3718	13.5965		
	4	0.00043	7.8399	15.4019		
	5	0.00050	9.1130	20.7672		
	6	0.00051	9.3356	21.7961		
	7	0.00284	9.5825	22.9869		
	8	0.00108	10.5902	28.0962		
	9	0.00893	12.3747	38.4588		

로 인해 나머지 하나 B₄는 이 근처의 값으로 결정하는 것이 바람직해 보이며, 195 nm에 해당하는 에너지의 두배인 12.716 eV의 값을 이용하였다.

그림 6(a)는 분광광도계로부터 측정된 Alq₃의 투과율 및 반사율 스펙트럼과 J=4의 경우로 비선형 최소자승법 곡선맞춤을 한 후 전산시뮬된 스펙트럼이다. 이때 Alq₃에 대한 포로히-블루머 분산식의 계수는 표 2와 같으며 박막의 두께는 103.5 nm 이었다. J=4로 곡선맞춤한 결과 300~345 nm 사이의 투과율 스펙트럼에서 나타나는 약간의 불일치를 제외하고는 200~800 nm 사이의 투과율과 반사율 스펙트럼의 곡선 흐름과 비교적 잘 일치하는 결과를 얻었다. 그림 6(b)는 J=4로 곡선맞춤할 경우 측정 결과와 불일치하는 영역을 확대한 것이다. 300~345 nm에서의 투과율 불일치는 이 근처에서 나타나는 Alq₃의 약한 흡수 어깨에 의해 기인된 것이다. J=4인 경우 비선형 최소자승법을 이용한 곡선맞춤을 하면서 약한 흡수로 기인된 흡수 어깨에 대해선 고려되어지지 않았기 때문이다. 일반적으로 유기물들은 무기물에 비해 더 많은 에너지 준위가 존재하기 때문에 흡수 피크에 해당하는 J의 수를 증가시키면서 곡선맞춤을 하면 더욱 잘 일치하는 결과를 얻을 수 있을 것으로 기대어진다. 260 nm 영역에서 흡수 피크를 두 개 더 사용하여 이 영역에서 총 3개를 사용하였으며, 300~345 nm 까지의 영역에서 나타나는 흡수 어깨를 고려하여 두 개의 흡수 피크를 두었으며 350~400 nm 사이에서 투과율의 스펙트럼을 맞추기 위해 390 nm 영역에서 흡수 피크를 하나 더 넣음으로써 총 9개의 흡수 피크를 곡선맞춤시 사용하였다. 일반적으로 J의 수를 처음부터 많이 하여 곡선맞춤을 하면 계수의 수가 J×3+2가 되기 때문에 곡선맞춤하기가 어렵지만 이처럼 물질의 주요 흡수 피크에 해당하는 개수를 먼저 선택하여 곡선맞춤을 하고 곡선맞춤이 잘 맞지 않는 곳에서는 J의 개수를 증가시키면서 곡선맞춤 하면 측정 스펙트럼과 잘 일치하는 결과를 얻을 수 있다. 따라서 J=4의 경우보다 J=9의 경우가 자외선 영역에서 더 잘 일치하는 결과를 얻을 수 있었다(그림 6(b)). 또한 그림 6(c)에서처럼 J=9의 경우로 곡선맞춤한 결과는 자외선 영역뿐만 아니라 가시광선 영역에서 분광광도계로부터 측정된 Alq₃의 스펙트럼과 잘

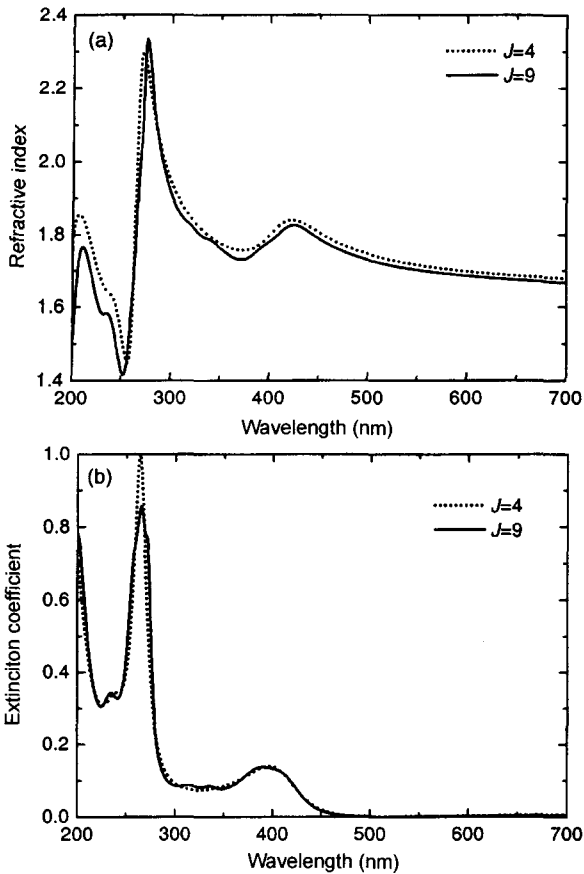


그림 7. $J=4$ (점선)와 $J=9$ (실선)인 경우 포로히-블루머 분산식을 이용하여 곡선맞춤된 Alq_3 의 복소굴절률.

일치하는 것을 확인할 수 있었다. 그림 6에서의 이론적인 스펙트럼은 포로히-블루머 분산식으로부터 구해진 Alq_3 의 굴절률을 현재 광학박막 디자인용 상용 프로그램인 Essential Macleod 프로그램에 입력하여 계산된 스펙트럼이며 실험적으로 측정된 스펙트럼과 거의 일치하는 결과를 얻을 수 있었다.

$J=9$ 의 경우 200~500 nm 사이에서의 이론치와 측정 스펙트럼 사이의 차이는 1% 이내였으며, 가시광선 영역에서는 1.5% 이내의 차이를 보이고 있다. 가시광선쪽의 차이가 다소 커지는 것은 기판으로 사용된 비정질실리카 기판의 투과율과 반사율의 합이 완벽하게 100%가 되지 않기 때문이며 이에 따라 기판에 셀마이며 분산식을 적용하여 구한 계수들을 포로히 블루머 분산식에 적용하여 계산할 때 유도된 오차로 생각되어진다. 포로히 블루머 분산식으로부터 계산된 Alq_3 의 복소굴절률은 그림 7과 같으며, 가시광선 영역에서 1.715 (@550 nm)의 굴절률을 얻을 수 있었다.

IV. 결 론

알루미늄이 코팅된 텅스텐 보트를 사용하여 열저항법으로 유기발광물질 Alq_3 를 증착하였다. 분광광도계를 이용하여 Alq_3 의 투과, 반사 스펙트럼을 측정하였으며, 측정된 스펙트럼과 양자역학적 흡수이론을 바탕으로 한 포로히-블루머 분산식에

비선형 최소자승법을 적용하여 곡선맞춤한 결과 200~800 nm(1.5~6 eV)의 영역에서 유기발광 물질 Alq_3 의 광학상수를 계산할 수 있었다. $J=4$ 로 곡선맞춤을 한 경우 200~800 nm 영역에서 충분히 Alq_3 의 분광학적 특성에 근접하는 결과를 얻을 수 있었으나, $J=9$ 인 포로히-블루머 분산식이 Alq_3 의 분광학적 특성에 더욱 잘 맞는 것을 확인할 수 있었다. 이로부터 구해진 Alq_3 의 복소굴절률은 가시광선 영역에서 1.715(@550 nm)이었다. 포로히-블루머 분산식은 비결정질 실리콘과 같은 반도체 및 유전체 뿐만 아니라 유기발광물질에서도 잘 맞는 것을 알 수 있었다.

감사의 글

본 연구는 2001년도 인하대학교 교수연구진흥비(인하-22093) 지원으로 수행되었으며, 지원에 감사드립니다.

참고문헌

- [1] 황보창권, "광학박막의 최근 설계, 제작 기술 및 응용," 광학과 기술, 2권 2호 pp. 57-75, 1998.
- [2] E. D. Palik Ed, *Handbook of Optical Constants of Solids*, (Academic Press, New York, 1985), Part I.
- [3] E. D. Palik Ed, *Handbook of Optical Constants of Solids II*, (Academic Press, New York, 1991), Part I.
- [4] 황보창권, 진권휘, 박대운, 이민희, "포락선 방법을 이용한 흡수가 작은 박막의 광학 상수 및 두께 결정," 한국광학회지, vol. 3, no.1, pp. 1-10. 1992.
- [5] 김상열, 타원법(아주대 출판부, 2000).
- [6] 안일신, 엘립소메트리(한양대학교 출판부, 2000).
- [7] 황보창권, 최철재, 최동철, "표면 플라즈몬 공명 측정에 의한 금속박막의 광학 상수와 두께 결정," 한국광학회지, vol. 2, no.2, pp.59-66. 1991.
- [8] P. K. Tien, and R. Ulrich, "Theory of prism-film coupler and thin-film light guides," *J. Opt. Soc. Am.* 60, pp. 1325-1337, 1970.
- [9] R. Forouhi, and I. Bloomer, "Optical dispersion relations for amorphous semiconductors and amorphous dielectrics," *Phys. Rev. B*, 34, pp. 7018-7026 1986.
- [10] R. Forouhi, and I. Bloomer, "Optical properties of crystalline semiconductors and dielectrics," *Phys. Rev. B*, 38, pp. 1865-1874, 1988.
- [11] C. W. Tang and S. A. VanSlyke, "Organic electroluminescent diodes," *Appl. Phys. Lett.*, 51, pp. 913-915, 1987.
- [12] J. R. Sheats, H. Antoniadis, M. Hueschen, W. Leonard, J. Miller, R. Moon, D. Roitman, and A. Stocking, "Organic electroluminescent devices," *Science* 273, pp. 884-888, 1996.
- [13] Ji-Seon Kim, Peter K. H. Ho, Neil C. Greenham, and Richard H. Friend, "Electroluminescence emission pattern of organic light-emitting diodes: Implications for device efficiency calculations," *J. Appl. Phys.* 88, pp. 1073-1081, 2000.
- [14] W. M. V. Wan, N. C. Greenham, and R. H. Friend, "Interference effects in anisotropic optoelectronic devices," *J. Appl. Phys.* 87, pp. 2542-2547 2000.
- [15] C. F. Madigan, M.-H. Lu, and J. C. Sturm, "Improvement of

- output coupling efficiency of organic light-emitting diodes by backside substrate modification,” *Appl. Phys. Lett.* 76, pp. 1650-1652, 2000.
- [16] B. Y. Jung, N. Y. Kim, C. H. Lee, C. K. Hwangbo, C. Seoul, “Control of resonant wavelength from organic, light-emitting materials by use of a Fabry-Perot microcavity structure,” *Appl. Opt.*, 41, pp. 3312-3318, 2002.
- [17] H. Becker, S. E. Burns, N. Tessler, and R. H. Friend, “Role of optical properties of metallic mirrors in microcavity structures,” *J. Appl. Phys.* 81, pp. 2825-2829 1997.
- [18] 김상열, 류장위, 김동현, 정혜인, “가변입사각 분광타원법을 이용한 유기 발광 박막의 광학상수 및 두께 결정,” 한국광학회지, vol. 12, no.6, pp.472-478. 2001.
- [19] B. Masenelli, S. Callard, A. Gagnaire, and J. Joseph, “Fabrication and characterization of organic semiconductor-based microcavities,” *Thin Solid Films*, vol. 364, no. 1-2, pp. 264-268, 2000.
- [20] 황보창권, 박막광학(다성출판사, 2001), Chapter 2, 10, 11.
- [21] D. E. Aspnes, and A. A. Studna, “Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, Gap, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV,” *Phys. Rev. B*, 27, pp. 985-1009, 1983.
- [22] H. A. Macleod, *Thin Film Optical Filters*, 3rd Ed, (Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, 2001), Chapter 2.

Determination of optical constants for organic light emitting material of Alq₃ using Forouhi-Bloomer dispersion relations

Boo Young Jung, Seouk-Hoon Woo, Sukmock Lee, and Chang Kwon Hwangbo[†]

Department of Physics, Inha University, Incheon 402-751, KOREA

[†]*E-mail: hwangbo@inha.ac.kr*

(Received November 8, 2002, Revised manuscript February 7, 2003)

We determined the optical constants of organic light emitting material of Alq₃ in a spectral range between 1.5 and 6 eV using the physical model introduced by Forouhi and Bloomer [Phys. Rev. B 34, pp. 7018-7026, 1986.]. The initial parameters of A_i , B_i , and C_i of Forouhi-Bloomer dispersion relations were determined from the absorption peaks and widths of absorption spectra of the Alq₃ film. The refractive index of substrate, a fused silica, is derived from the Sellmeier equation with the measured transmittance and reflectance spectra. Then, the complex refractive index and thickness of the Alq₃ film were calculated by use of a nonlinear least square fitting program with the Forouhi-Bloomer dispersion relation and the measured transmittance and reflectance spectra.

Classification codes : OS.010, OM.010, OM.020.