

УДК 535.376; 535-15; 628.9.038; 628.9.037

ОПТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТОНКОПЛЕНОЧНОГО ИК-СВЕТОДИОДА НА ОСНОВЕ КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

Туровец У.Е.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
Минск, Республика Беларусь, u.turovets@bsuir.by

Аннотация: В данной работе проведено моделирование оптических процессов в структуре тонкопленочного ИК-светодиода методом конечной разности во временной области. Исследованы такие параметры, как пропускание, эффективность распространения электромагнитных волн в диапазоне 1,25–1,35 мкм. Показано, что коэффициент пропускания уменьшается при прохождении функциональных слоев до 35%. В заключение предложены стратегии оптимизации функциональных слоев.

Ключевые слова: QLED, FDTD-моделирование, напряженность поля, пропускание, эффективность извлечения света.

I. ВВЕДЕНИЕ

Внешняя квантовая эффективность (ВКЭ) – один из важнейших параметров ИК-светодиодов (ИКС) на основе коллоидных квантовых точек (ККТ). Ограничение значений ВКЭ может быть связано с низким коэффициентом эффективности излучения света (ЭИС). Для не только качественного, но и количественного анализа данного параметра прибегают к оптическому моделированию, позволяющему рассчитывать рассеиваемую мощность и оценивать степень извлечения света из устройства [1, 2]. Эти параметры служат для первичной оценки эффективности работы функциональных слоев устройства. Для моделирования различных светоизлучающих элементов, как правило, используют 2D моделирование, так как оно выполняется значительно быстрее и требует меньших вычислительных мощностей [3].

II. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

а. Теоретическое обоснование

Для оценки распределения электромагнитных волн в структуре ИКС производили расчет распределения интенсивности дальнего поля, равное $(В \cdot м^{-1})^2$. Данные параметры служат для первичной оценки производительности ИКС. Все характеристики были рассчитаны путем решения уравнений Максвелла с использованием метода конечной разности во временной области (FDTD) на базе программного комплекса Ansys Lumerical.

Конструкция ИКС представляет собой полученные ранее [4] тонкопленочные функциональные слои. На рис. 1 приведена 3D модель структуры ИКС в соответствии с порядком слоев, их толщины приведены в табл. 1. Значения комплексного показателя преломления для ближнего ИК диапазона были взяты из открытых баз данных [5, 6].

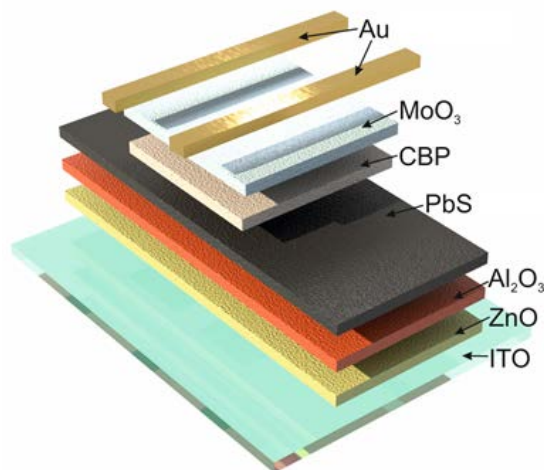


Рисунок 1. Схематическое представление конструкции ИКС на коллоидных квантовых точках PbS

Таблица 1. Параметры функциональных слоев ИКС

Функциональный слой	Материал	Толщина, нм
Катод	Au	100
Дырочно-инжекционный слой (ДИС)	MoO ₃	3
Дырочно-транспортный слой (ДТС)	4,4'-N,N'-дикарбазолил-бифенил (CBP)	60
Активный слой (ККТ)	PbS	47,5
Электронно-блокирующий слой (ЭБС)	Al ₂ O ₃	3
Электронно-транспортный слой (ЭТС)	ZnO	25
Анод	ITO	70
Подложка	SiO ₂	>1000

Для оценки характеристик сравнивали такие параметры, как эффективность излучения света (ЭИС), оптическое пропускание и распределение электромагнитных волн в структуре ИКС для предполагаемых функциональных слоев и их толщин. Параметр ЭИС выражается из значений внешней квантовой эффективности (ВКЭ) и внутренней квантовой эффективности (ВнКЭ) [1] и определяет отношение фотонов, испускаемых светодиодом, ко всем фотонам, испускаемых активной областью:

$$ВКЭ = ЭИС \cdot ВнКЭ, \quad (1)$$

где упрощенно $ЭИС = 1 - \sqrt{1 - \left(\frac{n_{ЭТС}^2}{n_{акт.сл.}^2}\right)}$ [2], сильно зависящая от коэффициента преломления активного слоя и ЭТС, т. е. в данном случае, ККТ PbS и ZnO. Учитывая значения n , с учетом ЭБС ЭИС = 0,34%, без ЭБС ЭИС = 0,64%. Таким образом, ЭБС будет препятствовать распространению света на выходе из устройства. Однако, по полученным экспериментальным данным, использование ЭБС необходимо для выравнивания неравномерной подвижности носителей заряда в активную область [4], что значительно улучшает выходные электрические характеристики. Стратегия выбора слоев для ИКС требует комплексного решения и компромисса при оптимизации слоев.

б. Параметры моделирования

Область симуляции составляла 4×1 мкм² в плоскости $x - y$ (длина – ширина) и 0,5 мкм в направлении z – координаты (толщина). В качестве граничных условий области симуляции по $x - y$ координатам выбраны идеально сочетающиеся слои (perfectly matched layers – PML). Количество слоев PML – 24. По координате z для верхнего слоя катода были установлены граничные условия металла (для отражения излучения обратно в область симуляции), а для нижнего слоя анода – стандартные PML. Границы PML поглощают почти все входящее излучение с минимальными отражениями, и, поскольку в реальной жизни свет выходит за пределы этих границ, было важно, чтобы излучение не отражалось обратно в область симуляции. Границы симуляции по координате z были установлены по середине слоев ITO и Au. Для моделирования люминесцирования в активном слое использовался точечный источник излучения (dipole source) [2], излучающий на длине волны 1300 нм, что соответствует длине волны излучения ККТ PbS. Чтобы смоделировать угловое распределение волн, а также оценить изменение коэффициента пропускания, был задан минимальный диапазон для длин волн ИК излучения 1,25–1,35 мкм. Чтобы создать эффект произвольного направления излучения (т. к. процессы рекомбинации с последующим направлением излучения носят случайный характер), точечный источник имел случайную ориентацию в пространстве активного слоя. Для упрощения вычисления и оптимизации использовался доступный официальный скрипт (sweep width and position) [3], суммирующий результаты для каждого положения точечного источника в пространстве активного слоя и направления его излучения. Шаг вычисления составил 0,25 нм, время симуляции 1200 фс. Для увеличения точности вычислений ультратонких слоев ЭБС и ДИС установлен индивидуальный шаг сетки с шагом 1 нм. Экран детектирования падающего излучения (пропускания) расположен по z – координате.

III. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Анализ углового распределения E (рис. 2) показывает, что распространение излучения происходит преимущественно в пределах 60° за его пределами в дальнем поле.

По характеру распределения поля E (рис. 3) можно заметить, что ультратонкий слой оксида алюминия (ЭБС) выступает как барьер, в некоторой степени препятствующий прохождению излучения. Ввиду стремления электромагнитного излучения к распространению в более плотных средах, происходит

частичная потеря излучения в активном слое, а также в ДТС и ЭТС. В конечном итоге, в результате отражения от золотого электрода, путем множественного переотражения волны распространяются преимущественно в направлении прозрачного проводящего электрода (ППЭ).

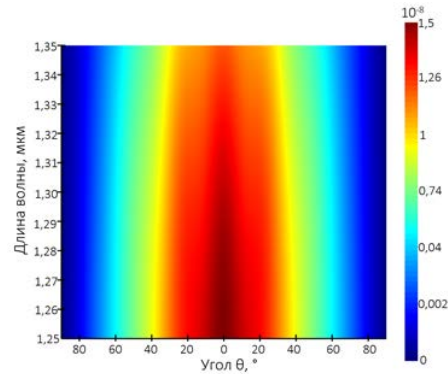


Рисунок 2. 2D представление углового распределения E от длины волны излучения с использованием заданного коэффициента преломления за пределами границы устройства в дальнем поле

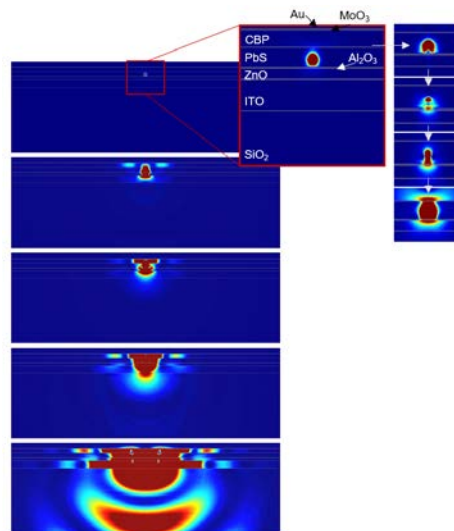


Рисунок 3. 2D срез распределения поля E во временной области с 15 до 60 фс

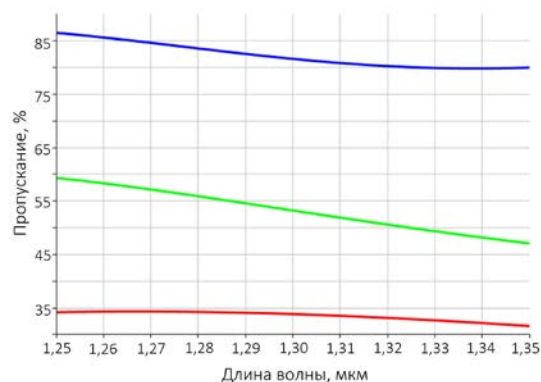


Рисунок 4. Оптическое пропускание излучения в различных слоях устройства: ЭТС (синий), ИТО (зеленый) и на границе стекло-воздух (красный)

Из рис. 4 видно, что коэффициент пропускания значительно уменьшается после прохождения функциональных слоев на выходе из устройства. Это может быть связано с тем, что в ближней ИК области происходит значительное поглощение излучения слоем ИТО. ИТО по-прежнему занимает

лидирующие позиции в качестве ППЭ ввиду низкого поверхностного сопротивления и высокой прозрачности в видимом диапазоне, однако в ИК области происходит заметное ухудшение пропускания [7].

IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате моделирования и первичной оценки параметров ЭИС выявлены несовершенства устройства, которые предлагается решать с помощью оптимизации функциональных слоев. Основные выводы по результатам моделирования: ИТО непрозрачен в ИК области, за счет чего блокирует прохождение излучения; в качестве ППЭ предлагается использование FTO как более подходящего материала, сохраняющего прозрачность в ИК области на уровне 70%, в сравнении с ИТО, пропускание которого находится в пределах 35% [8]. Кроме того, материал FTO показывает не сильное ухудшение проводимости, что играет существенную роль при выборе материала ППЭ; в качестве решения проблемы блокирования излучения на границе уровня ЭБС предлагается замена Al_2O_3 на Ta_2O_5 [5], обладающий более высокой диэлектрической проницаемостью, и, в свою очередь, более высоким показателем преломления.

БЛАГОДАРНОСТЬ

Исследование проведено при поддержке Белорусского фонда фундаментальных исследований (БРФФИ) по теме гранта №Т23М-040 «Неорганические инфракрасные светодиоды на коллоидных квантовых точках PbS с улучшенными характеристиками».

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Optical Tunneling to Improve Light Extraction in Quantum Dot and Perovskite Light-Emitting Diodes / G. Mei [et. al.] // IEEE Photonics Journal. 2020. Vol. 12, No 6. P. 1–14. Art No 1600314.
- [2] Photonics design theory enhancing light extraction efficiency in quantum dot light emitting diodes / Diyar D. Othman [et al.] // Journal of Physics: Materials. 2022. Vol. 5, No 4. Art No 044009.
- [3] OLED (2D) [Electronic Resource] // Ansys Optics. Mode of access : <https://optics.ansys.com/hc/en-us/articles/360042225934-OLED-2D>. Date of access : 17.09.2024.
- [4] Bright infra-red quantum dot light-emitting diodes through efficient suppressing of electrons / M. Marus [et al.] // Appl. Phys. Lett., 2020. Vol. 116, No 19. Art No 191103.
- [5] Refractive index [Electronic Resource] // Mode of access: <https://refractiveindex.info>. Date of access : 26.09.2024.
- [6] Filmmetrics [Electronic Resource] // Mode of access: <https://www.filmmetrics.com>. Date of access : 29.09.2024.
- [7] Pasquarelli, R. M. Solution processing of transparent conductors: from flask to film / R. M. Pasquarelli, D. S. Ginley, R. O'Hayre // Chemical Society Reviews, 2011. Vol. 40, No 11. P. 5406–5441.
- [8] Effect of transparent conductive layers on the functionality of liquid crystal devices: Comparison of AZO, FTO and ITO / V. Marinova [et al.] // Optical Materials: X. 2024. Vol. 22. Art No 100330.

OPTICAL MODELING OF THIN FILM IR QUANTUM DOT LIGHT EMITTING DIODE

U. Turavets

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,
u.turovets@bsuir.by

Abstract: In this work, optical processes in the structure of a thin-film IR QLED were modeled using the FDTD method. Parameters such as transmission and propagation efficiency of electromagnetic waves in the range of 1.25–1.35 microns have been studied. It is shown that the transmission coefficient decreases with the passage of functional layers up to 35%. In conclusion, strategies for optimizing functional layers are proposed.

Keywords: QLED, FDTD modeling, E-field, transmission, light extraction efficiency.