

مطالعه عددی مدهای انتشاری در ساختار دیود نورگسیل پروسکایتی

مرتضی یاراحمدی^۱، الناز یزدانی^۲، محمدکاظم مروج فرشی^{۱*}

^۱ گروه الکترونیک، دانشکده مهندسی برق دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران

^۲ گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران

چکیده: در این مقاله، با استفاده از روش عددی عنصر متناهی، یک ساختار دیود نورگسیل تخت، مبتنی بر پروسکایت $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ در طول موج 530 nm شبیه‌سازی شده است. بررسی مدهای انتشاری ساختار، نشان می‌دهد که وجود اختلاف بین ضرایب شکست لایه‌های انتقال‌دهنده و الکترود شفاف، عاملی محدود کننده برای بازده کوانتومی خارجی است. نتایج عددی بدست آمده نمایان می‌سازد که محصورشدگی مدها در لایه‌های میانی قابل توجه است. همچنین، مقایسه مدهای مراتب بالاتر از جمله مدهای مرتبه دوم و چهارم با مد اصلی مشخص می‌کند که در مدهای دیگر نیز همچنان این اثر صورت می‌پذیرد.

کلید واژگان: پروسکایت؛ دیود نورگسیل؛ بازده کوانتومی خارجی

Numerical Investigation of the propagation modes in the perovskite light emitting diode

M. Yarahmady¹, E. Yazdani², M. K. Moravvej-Farshi¹

¹ Dept. of Electronics, Faculty of ECE, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran.

² Dept. of Physics, Faculty of Basic Sciences, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran.

Abstract- Using the finite element numerical method, we have simulated a planar light emitting diode (LED) based on $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ perovskite material at 530 nm wavelength. Analysis of the LED propagating modes shows that the difference between the refractive indices of the carrier transfer layer and the transparent electrode is a limiting factor for the external quantum efficiency. Moreover, the numerical results indicate that the modes are strongly confined in the middle layer. A further study reveals a similar observation for the second and fourth order modes.

Keywords: Perovskite; Light emitting diode (LED); External quantum efficiency

* moravvej@modres.ac.ir

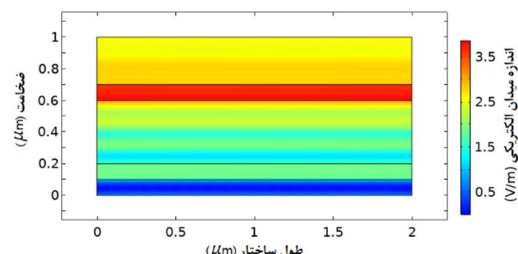
۱- مقدمه

پروسکایت های هالوژنی اولین بار در سال ۱۹۷۸ توسط وبر مطرح شدند. پژوهشگران آلمانی، میتزی و میورا در سال ۱۹۹۱ ویژگی های اپتوالکترونیکی پروسکایت ها را مورد بررسی قرار دادند [۱] و [۲]، و در سال ۱۹۹۷ توانستند اولین افزاره های پروسکایتی را بسازند [۳] و [۴]. در سال ۱۹۹۱ اولین دیودهای نورگسیل پروسکایتی با قابلیت الکترولومینسانس در دمای اتاق ساخته شدند. اما با بازدهی کوانتومی خارجی و خلوص نور کم، قابل مقایسه با دیودهای نورگسیل نقطه کوانتومی و دیودهای نورگسیل آلی نبودند [۵] که این امر باعث توقف آنها شد. اما در سال ۲۰۱۲ نانو ذرات $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ در آلومینای متخلخل به عنوان اولین پروسکایت توده ای گسیلنده نور گزارش شد [۶] تا ادامه تحقیقات بر روی دیودهای نورگسیل پروسکایتی از سر گرفته شود. تان و همکارانش، اولین دیود نورگسیل پروسکایتی را در محدوده ی فرسرخ با بازدهی کوانتومی خارجی $\% ۰/۷۶$ و بازدهی کوانتومی داخلی $\% ۳/۴$ ارائه دادند [۷]. در ادامه همین تیم تحقیقاتی، ترکیب هالوژن ماده ی پروسکایت را با هدف افزایش گاف انرژی تغییر دادند و توانستند نور سبز با خلوص بالایی با بازدهی کوانتومی خارجی و داخلی به ترتیب $\% ۰/۱$ و $\% ۰/۴$ گسیل کنند. در ادامه کار آنها، هوی و همکارانش با بررسی مشکلات ماده F8 و جایگزینی اکسید فلزی ZnO به جای آن در نقش انتقال دهنده ی الکترون موفق به بهبود کارایی افزاره شدند [۸]. از سال ۲۰۱۲ که نقطه عطفی در سیر پژوهش های دیودهای نورگسیل پروسکایتی بوده است تا کنون، مطالعات گسترده ای بر روی بهبود عملکرد افزاره، انجام شده است. با این حال، هنوز مطالعات کمی به عوامل کاهش استخراج نور از پیکربندی دیود نورگسیل پروسکایتی پرداخته اند. با وجود حجم مناسب تولید فوتون در ناحیه فعال دیودهای نورگسیل پروسکایتی، میزان بازده کوانتومی خارجی آنها راضی کننده نیست و نیاز دارد تا عوامل این هدر رفت نور تولیدی شناسایی و برطرف شوند.

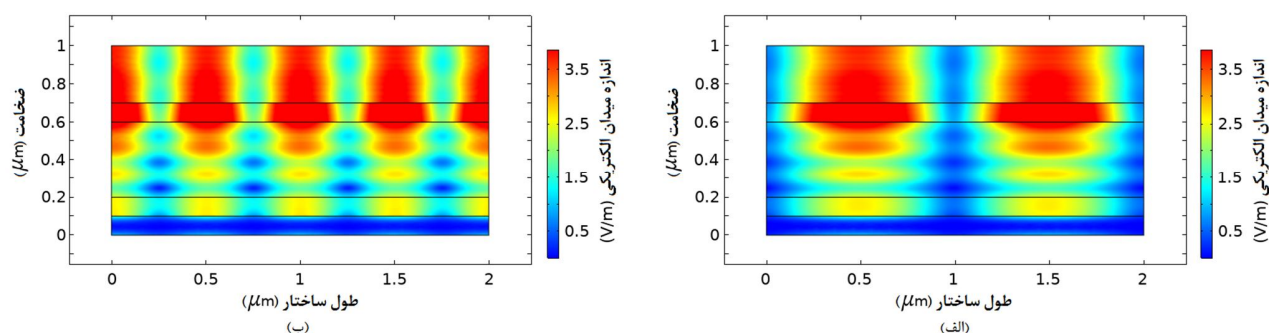
۲- نتایج

در این مقاله، ساختار دیود نورگسیل تخت با ساختار اکسید قلع ایندیوم/ پلی استایرن سولفونات/ متیل آمونیوم برمید/ پلی دی اکلیل فلورن/ نقره (Ag/F8/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ / PEDOT:PSS/ ITO) را با استفاده از روش عددی عنصر متناهی شبیه سازی کرده و سپس، به بررسی مدهای انتشاری در این ساختار پرداخته ایم. Ag و ITO به ترتیب الکترودهای کاتد و آند، و F8 و PEDOT:PSS به ترتیب انتقال دهنده های الکترون و حفره هستند. همچنین، پروسکایت $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ ، بعنوان ناحیه فعال این دیود نورگسیل در نظر گرفته شده است. مد انتشاری اصلی در طول موج ۵۳۰ نانومتر، در شکل ۱ نمایش داده شده است. همانگونه که در شکل مشاهده می شود، قسمت قابل توجهی از مد انتشاری در بخش های میانی ساختار محصور می شود. در واقع، مطلوب این است که مدها بتوانند به خروجی دیود نورگسیل جفت شوند اما آنچه که از شکل استنباط می شود این است که این اتفاق رخ نمی دهد. یکی از مهمترین دلایل این رخداد می تواند اختلاف بین ضرایب شکست لایه انتقال دهنده حفره (PEDOT:PSS) و الکترود شفاف (ITO) باشد. اختلاف موجود، سبب می شود که لایه انتقال دهنده حفره، بین ناحیه فعال و الکترود شفاف، همانند یک موجبر طولی عمل کند و با به دام انداختن موج، از انتشار عرضی آن به سمت الکترود شفاف جلوگیری نماید. بنابراین، این اتفاق باعث کاهش بازده کوانتومی خارجی می شود. بازده کوانتومی خارجی، نسبت تعداد فوتون خارج شده از خروجی دیود (الکترود شفاف) به تعداد فوتون تولید شده در ناحیه فعال (پروسکایت)، تعریف می شود. در شکل ۲ (الف) و (ب) به ترتیب پروفایل مدهای انتشاری مرتبه دوم و چهارم ساختار دیود نورگسیل پروسکایتی، نمایش داده شده است. همانطور که در شکل مشاهده می شود، در مراتب بالاتر مدهای انتشاری نیز محصورشدگی میدان در لایه های میانی ساختار رخ می دهد و خروج کامل فوتون ها میسر نمی شود. کاهش اختلاف

ضریب شکست بین الکتروود شفاف و انتقال دهنده الکترون (حفره) با جایگزینی مواد دیگر، و یا تغییرات هندسی به نحوی که بتواند میزان پراکندگی مد در ساختار را افزایش دهد، می تواند به بهبود بازده کوانتومی خارجی کمک نماید.



شکل ۱- مد انتشاری مرتبه اول ساختار دیود نورگسیل مبتنی بر پروسکایت.



شکل ۲- (الف) مد انتشاری مرتبه دوم ، (ب) مد انتشاری مرتبه چهارم ساختار دیود نورگسیل مبتنی بر پروسکایت.

۳- نتیجه گیری

در این مقاله با استفاده از روش عنصر متناهی، طراحی و شبیه سازی ساختار دیود نورگسیل مبتنی بر پروسکایت $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ انجام شده است. نتایج حاصل از تحلیل و بررسی مدهای انتشاری در ساختار نشان می دهند که میزان محصورشدگی مدها در لایه های میانی قابل توجه است. در واقع، بخشی از مدهای انتشاری در انتقال دهنده ها به دام می افتد. این امر موجب می شود که انرژی کمتری به لایه الکتروود شفاف ITO جفت شود. بنابراین، این پدیده که بخشی از آن ناشی از اختلاف بین ضرایب شکست لایه های انتقال دهنده و الکتروود شفاف است موجب کاهش چشمگیر بازده کوانتومی خارجی می شود. برای دستیابی به میزان مناسب از بازده کوانتومی در دیودهای نورگسیل پروسکایتی تخت لازم است این نقص برطرف شود. شبیه سازی های ارائه شده می تواند قدمی مؤثر برای تحقیقات و بهینه سازی های آینده در این زمینه باشد.

مراجع

1. D. B. Mitzi *et al.* **Nature**, vol. 369, no. 6480, p. 467, 1994.
2. K. Tanaka *et al.* **Japanese journal of applied physics**, vol. 44, no. 8R, p. 5923, 2005.
3. C. Kagan *et al.* **Science**, vol. 286, no. 5441, pp. 945-947, 1999.
4. K. Liang *et al.* **Chemistry of materials**, vol. 10, no. 1, pp. 403-411, 1998.
5. K. Chondroudis and D. B. Mitzi. **Chemistry of materials**, vol. 11, no. 11, pp. 3028-3030, 1999.
6. A. Kojima *et al.* **Chemistry Letters**, vol. 41, no. 4, pp. 397-399, 2012.
7. Z.-K. Tan *et al.* **Nature nanotechnology**, vol. 9, no. 9, p. 687, 2014.
8. R. L. Hoyer *et al.* **Advanced Materials**, vol. 27, no. 8, pp. 1414-1419, 2015.