همایش نانوفوتونیک ایران ۱۳۹۹- ۱ و ۲ آبان
Iranian Nano-Photonic Conference 2020
October 23 and 24

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 $CH_3NH_3PbBr_3$ در طول موج ۵۳۰nm 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. Yarahmady[1], E. Yazdani[2], M. K. Moravvej-Farshi[1]

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 $CH_3NH_3PbBr_3$ 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

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-04]

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 پروسکایت‌ها را مورد بررسی قرار دادند [۱] و [۲] ، و در سال ۱۹۹۷ توانستند اولین افزاره‌های 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 $CH_3NH_3PbBr_3$ در آلومینای متخلخل به عنوان اولین پروسکایت توده ای گسیلنده نورگزارش شد [۶] تا ادامه تحقیقات بر روی دیودهای نورگسیل پروسکایتی از سر گرفته شود. تان و همکارانش، اولین دیود نورگسیل پروسکایتی را در محدوده‌ی فروسرخ با بازدهی کوانتومی خارجی ٪ ۰/۷۶ و بازدهی کوانتومی داخلی ٪ ۳/۴ ارائه دادند [۷]. در ادامه همین تیم تحقیقاتی، ترکیب هالوژن ماده‌ی 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 دهنده‌ی الکترون موفق به بهبود کارآیی افزاره شدند [۸]. از سال ۲۰۱۲ که نقطه عطفی در سیر پژوهش های دیودهای نورگسیل پروسکایتی بوده است تا کنون، مطالعات گسترده‌ای 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.

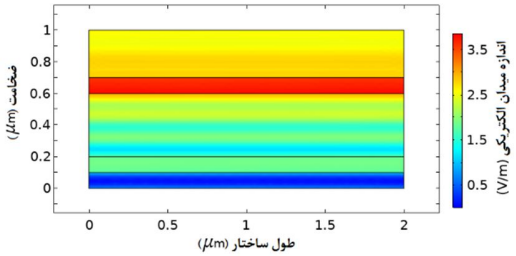
۲- نتایج

در این مقاله، ساختار دیود نورگسیل تخت با ساختار اکسید قلع ایندیوم/ پلی استایرن سولفونات/ متیل آمونیوم برمید/ پلی‌دی‌اکتیل‌فلورن/ نقره ($Ag/ F8/ CH_3NH_3PbBr_3/ PEDOT:PSS/ ITO$) را با استفاده از روش عددی عنصر متناهی شبیه‌سازی کرده و سپس، به بررسی مدهای انتشاری در این ساختار پرداخته‌ایم. Ag و ITO به ترتیب الکترودهای کاتد و آند، و F8 و PEDOT:PSS به ترتیب انتقال دهنده‌های الکترون و حفره هستند. همچنین، پروسکایت $CH_3NH_3PbBr_3$، 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 می‌شود، قسمت قابل‌توجهی از مد انتشاری در بخش‌های میانی ساختار محصور می‌شود. در واقع، مطلوب این است که مدها بتوانند به خروجی دیود نورگسیل جفت شوند اما آنچه که از شکل استنباط می‌شود این است که این اتفاق رخ نمی‌دهد. یکی از مهمترین دلایل این رخداد می‌تواند اختلاف بین ضرایب شکست لایه انتقال دهنده حفره (PEDOT:PSS) و الکترود شفاف (ITO) باشد. اختلاف موجود، سبب می‌شود که لایه انتقال‌دهنده 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 می‌شود. بازده کوانتومی خارجی، نسبت تعداد فوتون خارج شده از خروجی دیود (الکترود شفاف) به تعداد فوتون تولید شده در ناحیه فعال (پروسکایت)، تعریف می‌شود. 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 می‌شود، در مراتب بالاتر مدهای انتشاری نیز محصورشدگی میدان در لایه‌های میانی ساختار رخ می‌دهد و خروج کامل فوتون‌ها میسر نمی‌شود. کاهش اختلاف

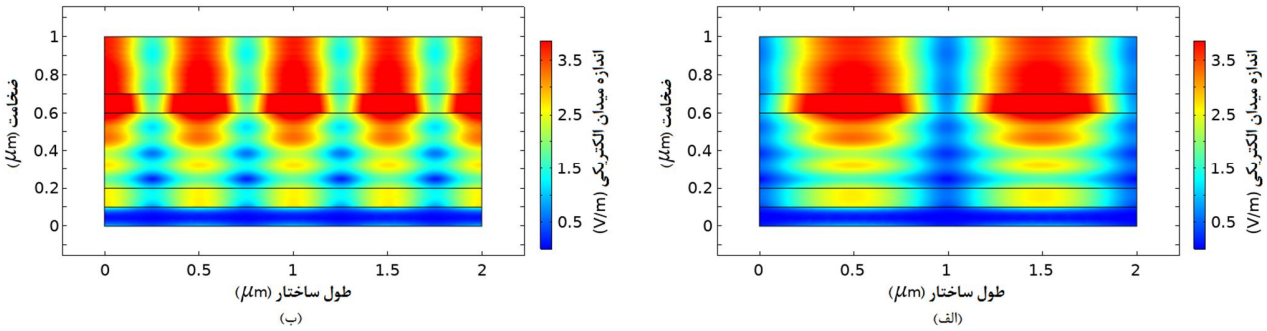
این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-04]

ضریب شکست بین الکترود شفاف و انتقال دهنده الکترون (حفره) با جایگزینی مواد دیگر، و یا تغییرات هندسی به نحوی‌که بتواند میزان پراکندگی مد در ساختار را افزایش دهد، می‌تواند 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 شبیه‌سازی ساختار دیود نورگسیل مبتنی بر پروسکایت $CH_3NH_3PbBr_3$ انجام شده است. نتایج حاصل از تحلیل و بررسی مدهای انتشاری در ساختار نشان می‌دهند که میزان محصورشدگی مدها در لایه‌های میانی قابل توجه است. در واقع، بخشی از مدهای انتشاری در انتقال‌دهنده‌ها به دام می‌افتد. این امر موجب می‌شود که انرژی کمتری به لایه الکترود شفاف ITO جفت شود. بنابراین، این پدیده که بخشی از آن ناشی از اختلاف بین ضرایب شکست لایه‌های انتقال‌دهنده و الکترود شفاف است موجب کاهش چشمگیر بازده کوانتومی خارجی می‌شود. برای دست‌یابی به میزان مناسب از بازده کوانتومی در دیودهای نورگسیل پروسکایتی تخت لازم است این نقص برطرف شود. شبیه‌سازی‌های ارائه شده می‌تواند قدمی مؤثر برای تحقیقات و بهینه‌سازی 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. Hoye *et. al*. **Advanced Materials**, vol. 27, no. 8, pp. 1414-1419, 2015.

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-04]