



<http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2025-23-3-19-25>

УДК 535.376; 535-15; 628.9.038; 628.9.037

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ТОНКОПЛЕНОЧНОМ ИК-СВЕТОДИОДЕ НА ОСНОВЕ КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК PbS

У. Е. ТУРОВЕЦ

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
(Минск, Республика Беларусь)*

Аннотация. 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 1,2–1,4 мкм. Смоделировано контрольное устройство со слоем оксида индия-олова (ИТО) в качестве прозрачного проводящего электрода. Рассмотрена замена слоя ИТО на слой оксида олова, легированного фтором (FTO). Установлено, что при такой замене коэффициент пропускания при прохождении ИК-излучением функциональных слоев FTO увеличивается до 70 %, а угловое распределение E^2 – на 10° в сравнении с устройством со слоем ИТО. В связи с чем целесообразно заменять слой прозрачного проводящего электрода ИТО на слой FTO.

Ключевые слова: моделирование, метод конечной разности во временной области, ИК-светодиод, напряженность поля, пропускание, эффективность извлечения света.

Конфликт интересов. Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Для цитирования. Туровец, У. Е. Моделирование оптических процессов в тонкопленочном ИК-светодиоде на основе коллоидных квантовых точек PbS / Доклады БГУИР. 2025. Т. 23, № 3. С. 19–25. <http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2025-23-3-19-25>.

MODELING OF OPTICAL PROCESSES IN THIN-FILM IR LIGHT-EMITTING DIODE BASED ON COLLOIDAL PbS QUANTUM DOTS

ULYANA Y. TURAVETS

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (Minsk, Republic of Belarus)

Abstract. The optical processes in the structure of a thin-film IR LED have been simulated using the finite difference method in the time domain. The parameters such as transmission and propagation efficiency of electromagnetic waves in the range of 1.2–1.4 μm have been investigated. A control device with an indium tin oxide (ITO) layer as a transparent conducting electrode has been simulated. The replacement of the ITO layer with a fluorine-doped tin oxide (FTO) layer has been considered. It has been found that with such a replacement, the transmittance of IR radiation passing through the FTO functional layers increases to 70 %, and the angular distribution of E^2 increases by 10° compared to a device with an ITO layer. Thus, it is advisable to replace the layer of the transparent conducting ITO electrode with the FTO layer.

Keywords: modeling, finite difference time domain method, IR LED, field strength, transmittance, light extraction efficiency.

Conflict of interests. The author declares no conflict of interests.

For citation. Turavets U. Y. (2025) Modeling of Optical Processes in Thin-Film IR Light-Emitting Diode Based on Colloidal PbS Quantum Dots. *Doklady BGUIR*. 23 (3), 19–25. <http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2025-23-3-19-25> (in Russian).

Введение

Внешняя квантовая эффективность (ВКЭ) – один из важнейших параметров ИК-светодиодов (ИКС) на основе коллоидных квантовых точек (ККТ) PbS. Ограничение значений ВКЭ может быть связано с низким коэффициентом эффективности излучения света (ЭИС). Для получения качественного и количественного анализа данного параметра моделируют оптические процессы, происходящие в структуре светодиода, что позволяет 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, применяется 2D-моделирование, поскольку оно выполняется значительно быстрее и требует меньших вычислительных мощностей [3].

В статье на основании результатов моделирования процессов распространения света рассмотрена оптимизация ВКЭ ИКС на основе квантовых точек сульфида свинца путем подбора материала проводящего прозрачного электрода (ППЭ).

Теоретическое обоснование

Для оценки распределения электромагнитных волн в структуре ИКС выполняли расчет распределения интенсивности дальнего поля, равной напряженности эклектрического поля в квадрате (E^2). Данные параметры служат для первичной оценки эффективности ИКС, их расчет выполняли путем решения уравнений Максвелла с использованием метода конечной разности во временной области (FDTD) на базе программного комплекса Ansys Lumerical.

Конструкция ИКС представляет собой тонкопленочные функциональные слои [4, 5]. На рис. 1 приведена 3D-модель структуры ИКС в соответствии с порядком слоев, а толщина материалов слоев – в табл. 1. Значения комплексного показателя преломления для ближнего ИК-диапазона были взяты из открытых баз данных [6, 7].

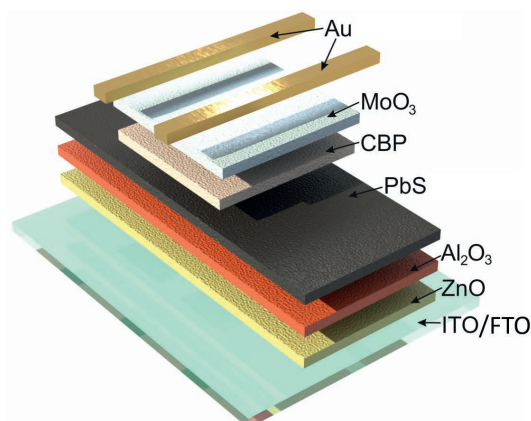


Рис. 1. Схематическое представление конструкции инфракрасного светодиода на коллоидных квантовых точках PbS

Fig. 1. Schematic representation of the infrared light-emitting diode design based on colloidal PbS quantum dots

Таблица 1. Параметры функциональных слоев инфракрасного светодиода
Table 1. Infrared light-emitting diode functional layers' parameters

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 (ППЭ)	Оксид индия-олова ИТО/оксид олова, легированный фтором FTO	70/70
Подложка	SiO ₂	>1000

Для сравнительной оценки характеристик использовали такие параметры, как ЭИС, оптическое пропускание и распределение электромагнитных волн в структуре ИКС для предполагаемых функциональных слоев и их толщин. Параметр ЭИС определяет отношение фотонов, испускаемых светодионом, ко всем фотонам, испускаемым активной областью, и определяется из формулы [1]

$$\text{ВКЭ} = \text{ЭИС} \cdot \text{ВнКЭ}, \quad (1)$$

где $\text{ЭИС} = 1 - \sqrt{1 - \left(\frac{n_{\text{ЭТС}}^2}{n_{\text{акт.сл}}^2} \right)}$ [2]; ВнКЭ – внутренняя квантовая эффективность.

ЭИС зависит от коэффициента преломления активного слоя и ЭТС. В рассматриваемом случае активный слой – ККТ PbS и ZnO.

С учетом ЭБС коэффициент ЭИС = 0,34 %, без учета ЭБС – ЭИС = 0,64 %. То есть ЭБС препятствует 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. Поэтому стратегия выбора слоев для ИКС требует комплексного решения и компромисса при оптимизации слоев. Так, слой оксида индия-олова (ITO) непрозрачен в ИК-области, поэтому блокирует прохождение излучения.

Проведем сравнение двух моделей: контрольной структуры, изображенной на рис. 1, и модели с заменой ППЭ, где будет выполнена замена слоя ITO на слой оксида олова, легированного фтором (FTO). В качестве анода (или ППЭ) предлагается использовать FTO – как более подходящий материал, сохраняющий прозрачность в ИК-области на уровне 70 % (в ITO – 35 %) [8, 9]. Кроме того, материал FTO показывает незначительное ухудшение проводимости, что имеет большое значение при выборе материала ППЭ. Параметры моделирования для каждого случая были аналогичны.

Область симуляции составляла $4 \times 1 \text{ мкм}^2$ в плоскости x – y (длина–ширина) и 0,5 мкм – в направлении координаты z (толщина). В качестве граничных условий области симуляции по координатам x – y 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 устанавливались по середине слоев ITO и Au. Для моделирования люминесцирования в активном слое использовался точечный источник излучения (dipole source) [2], имеющий пик излучения 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 диапазон для длин волн ИК-излучения 1,2–1,4 мкм. Чтобы создать эффект произвольного направления излучения (так как 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 устанавливался индивидуальный шаг сетки 0,1 нм. Экран детектирования падающего излучения (пропускания) располагался по координате z .

Результаты исследований и их обсуждение

Анализ углового распределения E^2 контрольной модели (рис. 2, а) показывает, что распространение излучения происходит преимущественно при 60° за пределами границы устройства в дальнем поле. При замене слоя ППЭ на FTO (рис. 2, б) видно заметное усиление интенсивности

и расширения области выходящего за пределы устройства излучения. В этом случае распространение излучения происходит в пределах 70° . Однако стоит учитывать, что при задании диапазона длин волн излучения спектр имеет выраженный «хвост» на значении 1,4 мкм, соответственно, угловое распределение на данной длине волны имеет незатухающий характер.

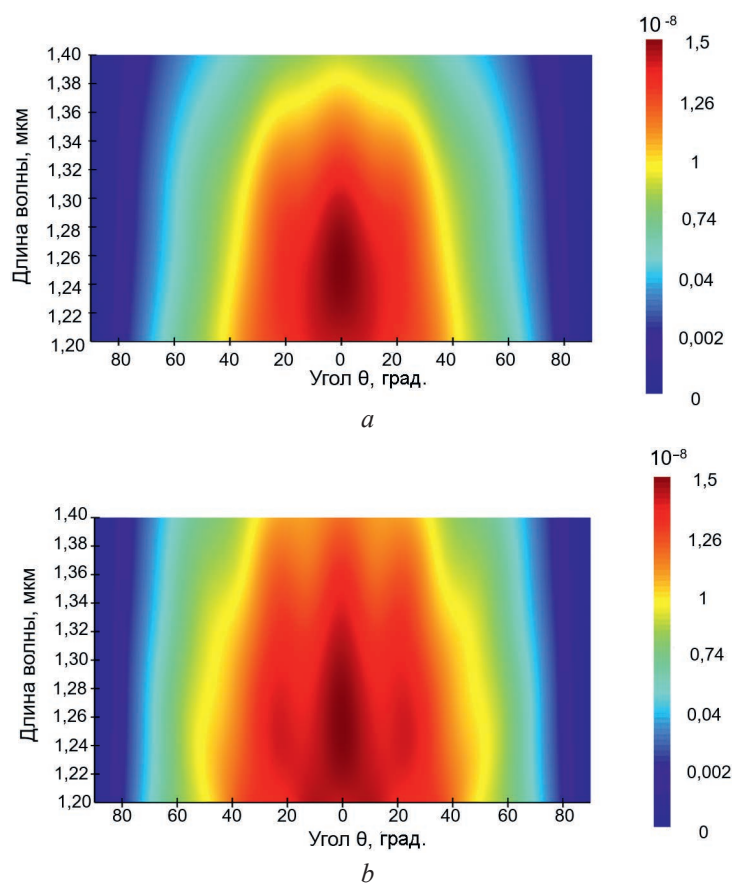


Рис. 2. 2D-представление углового распределения E^2 от длины волны излучения с использованием заданного коэффициента преломления за пределами границы устройства в дальнем поле для структуры со слоем: *a* – ИТО; *b* – ФТО

Fig. 2. 2D representation of the angular distribution of E^2 versus the radiation wavelength using a given refractive index beyond the device boundary in the far field for a structure with a layer of: *a* – ITO; *b* – FTO

По характеру распределения поля E (рис. 3) можно заметить, что ультратонкий слой оксида алюминия (ЭБС) выступает как барьер, в некоторой степени препятствующий прохождению излучения. 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 ППЭ. В случае замены ППЭ на слой ФТО (рис. 3, *b*) видно, что интенсивность излучения, проходящего в направлении ППЭ, выше по сравнению с контрольным устройством.

Согласно рис. 4, коэффициент пропускания значительно уменьшается после прохождения функциональных слоев на выходе из контрольного 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 [10]. В рассматриваемом случае значение пропускания на длине волны 1300 нм составляет порядка 35 %. Противоположная ситуация наблюдается при замене слоя ИТО на ФТО. Отмечено заметное улучшение пропускания в ИК-области с увеличением значений до 70 % на длине волны 1300 нм. Таким образом, полностью подтверждено предположение о целесообразности использования ФТО в качестве ППЭ.

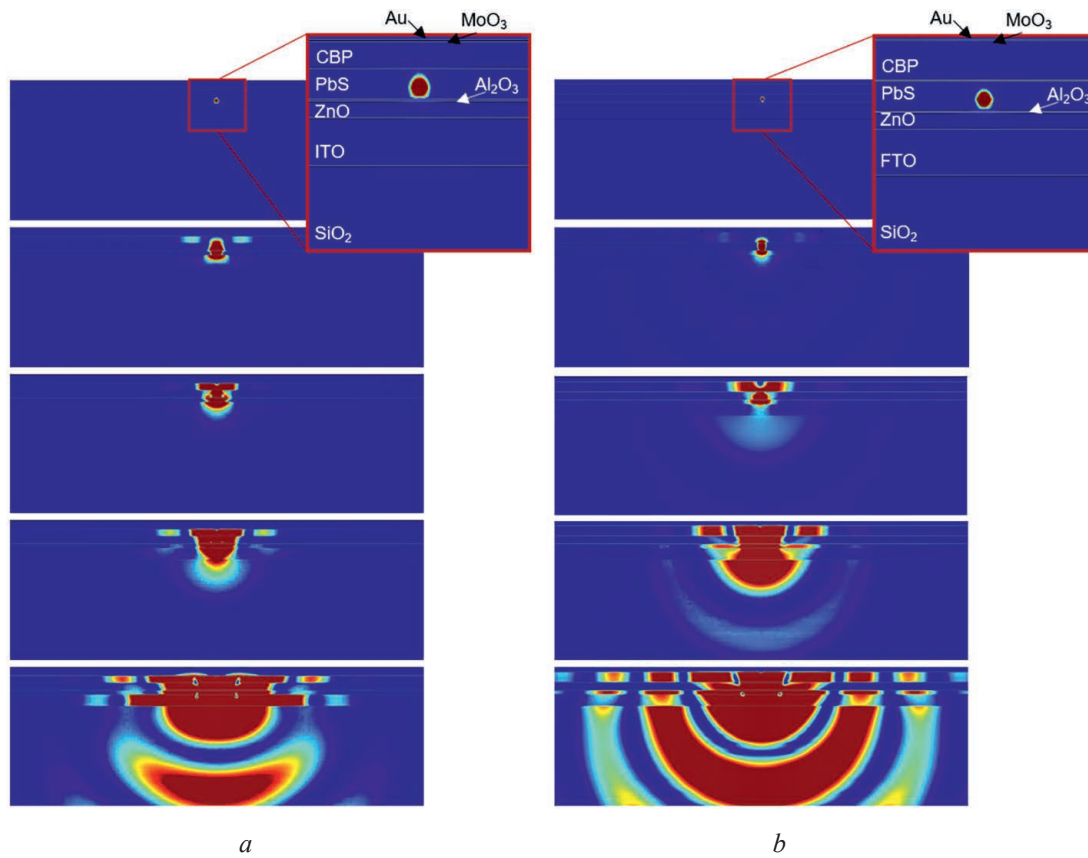


Рис. 3. 2D-срез распределения поля E во временной области с 15 до 60 фс для структуры со слоем: a – ITO; b – FTO
Fig. 3. 2D slice of the E field distribution in the time domain from 15 to 60 fs for a structure with a layer: a – ITO; b – FTO

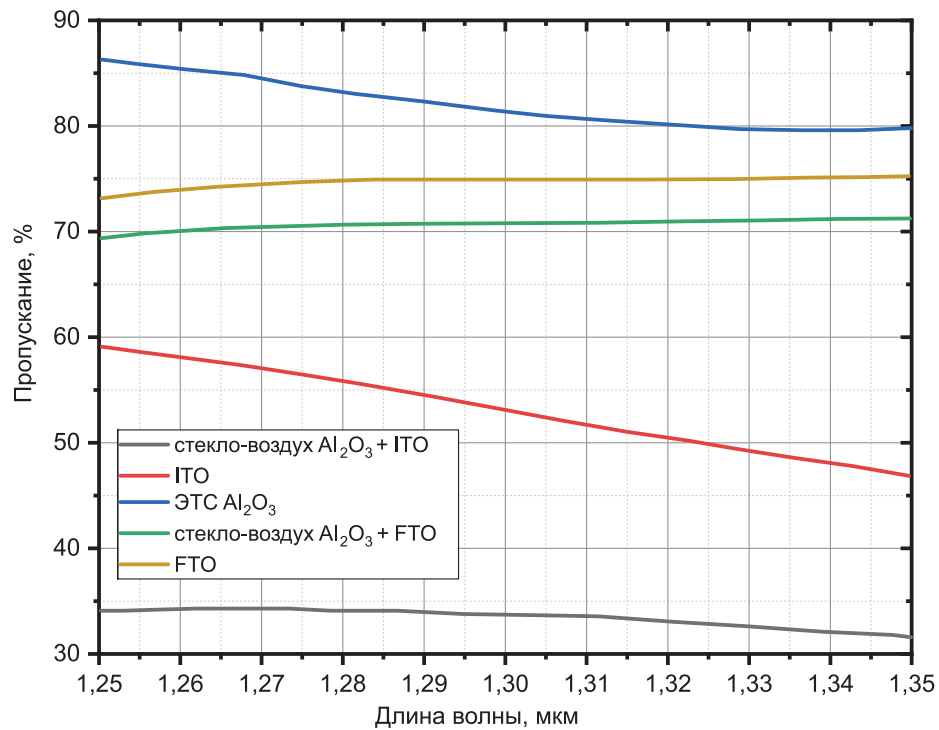


Рис. 4. Оптическое пропускание излучения в различных слоях сравниваемых устройств
Fig 4. Optical transmission of radiation in different layers of the compared devices

Заключение

1. В результате моделирования и первичной оценки параметров эффективности излучения света выявлены недостатки тонкопленочного ИК-светодиода на основе квантовых точек сульфида свинца, которые в значительной мере были устранены путем оптимизации состава функциональных слоев. Осуществлено моделирование двух сходных по конструкции ИК-светодиодов, отличающихся лишь материалом прозрачного проводящего электрода: контрольного устройства со слоем оксида индия-олова (ITO) в качестве прозрачного проводящего электрода и устройства с заменой ITO на слой оксида олова, легированного фтором (FTO).

2. В результате анализа полученных данных можно сделать вывод о целесообразности замены материала прозрачного электрода ITO на слой FTO, поскольку при этом повышается оптическое пропускание и улучшается распределение электромагнитных волн в структуре. Оптическое пропускание достигло 70 % на границе стекло–воздух устройства с заменой ППЭ на слой FTO, что на 35 % больше по сравнению с контрольным устройством со слоем ITO. Угловое распределение E^2 в устройстве с заменой материала прозрачного электрода на слой FTO показало значение 70° на длине волны 1300 нм, что на 10° больше, чем у контрольного устройства на той же длине волны.

3. Исследование проведено при поддержке Белорусского фонда фундаментальных исследований по теме гранта № T23M-040 «Неорганические инфракрасные светодиоды на коллоидных квантовых точках PbS с улучшенными характеристиками».

Список литературы

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. <http://dx.doi.org/10.1109/JPHOT.2020.3038275>.
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. <http://dx.doi.org/10.1088/2515-7639/ac9e77>.
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. <http://dx.doi.org/10.1063/5.0005843>.
5. Туровец, У. Е. Оптическое моделирование тонкопленочного ИК-светодиода на основе коллоидных квантовых точек / У. Е. Туровец // Компьютерное проектирование в электронике: сб. тр. Междунар. науч.-практ. конф., Минск, 28 нояб. 2024 г. Минск, 2024. С. 63–66.
6. Refractive Index [Electronic Resource]. Mode of access: <https://refractiveindex.info>. Date of access: 26.09.2024.
7. Filmmetrics [Electronic Resource]. Mode of access: <https://www.filmmetrics.com>. Date of access: 29.09.2024.
8. Physical Investigations on Undoped and Fluorine Doped SnO_2 Nanofilms on Flexible Substrate Along with Wettability and Photocatalytic Activity Tests / S. Ben Ameer [et al.] // *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2017. Vol. 61. P. 17–26. <http://dx.doi.org/10.1016/j.mssp.2016.12.019>.
9. 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. <http://dx.doi.org/10.1016/j.omx.2024.100330>.
10. 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. <http://dx.doi.org/10.1039/c1cs15065k>.

Поступила 03.03.2025

Принята в печать 09.04.2025

References

1. Mei G., Wu D., Ding S., Choy W. C. H., Wang K., Sun X. W. (2020) Optical Tunneling to Improve Light Extraction in Quantum Dot and Perovskite Light-Emitting Diodes. *IEEE Photonics Journal*. 12 (6), 1–14. <http://dx.doi.org/10.1109/JPHOT.2020.3038275>.
2. Othman D., Weinstein J. A., Lyu Q., Hou B. (2022) Photonics Design Theory Enhancing Light Extraction Efficiency in Quantum Dot Light Emitting Diodes. *Journal of Physics: Materials*. 5 (4). <http://dx.doi.org/10.1088/2515-7639/ac9e77>.

3. OLED (2D). *Ansys Optics*. Available: <https://optics.ansys.com/hc/en-us/articles/360042225934-OLED-2D> (Accessed 17 September 2024).
4. Marus M., Xia Y., Zhong H., Li D., Ding S., Turavets U., et al. (2020) Bright Infra-Red Quantum Dot Light-Emitting Diodes Through Efficient Suppressing of Electrons. *Appl. Phys. Lett.* 116 (19). <http://dx.doi.org/10.1063/5.0005843>.
5. Turavets U. Y. (2024) Optical Modeling of Thin Film IR Quantum Dot Light Emitting Diode. *Electronic Design Automation: Conference materials, Minsk, 28 Nov.* 63–66 (in Russian).
6. *Refractive Index*. Available: <https://refractiveindex.info> (Accessed 26 September 2024).
7. *Filmetrics*. Available: <https://www.filmetrics.com> (Accessed 29 September 2024).
8. Ben Ameer S., Barhoumi A., Bel Hadjltaief H., Mimouni R., Duponchel B., Leroye G., et al. (2017) Physical Investigations on Undoped and Fluorine Doped SnO₂ Nanofilms on Flexible Substrate Along with Wettability and Photocatalytic Activity Tests. *Materials Science in Semiconductor Processing*. 61, 17–26. <http://dx.doi.org/10.1016/j.mssp.2016.12.019>.
9. Marinova V., Petrov S., Petrova D., Napoleonov B., Chau N. H. M., Lan Y. P., et al. (2022) Effect of Transparent Conductive Layers on the Functionality of Liquid Crystal Devices: Comparison of AZO, FTO and ITO. *Optical Materials: X*. 22. <http://dx.doi.org/10.1016/j.omx.2024.100330>.
10. Pasquarelli R. M., Ginley D. S., O'Hayre R. (2011) Solution Processing of Transparent Conductors: From Flask to Film. *Chemical Society Reviews*. 40 (11), 5406–5441. <http://dx.doi.org/10.1039/c1cs15065k>.

Received: 3 March 2025

Accepted: 9 April 2025

Сведения об авторе

Туровец У. Е., мл. науч. сотр. науч.-исслед. лаб. интегрированных микро- и наносистем, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

Адрес для корреспонденции

220013, Республика Беларусь,
Минск, ул. П. Бровки, 6
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники
Тел.: +375 17 293-88-69
E-mail: u.turovets@bsuir.by
Туровец Ульяна Егоровна

Information about the author

Turavets U. Ya., Junior Researcher at the R&D Laboratory of Integrated Micro- and Nanosystems, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

Address for correspondence

220013, Republic of Belarus,
Minsk, P. Brovki St., 6
Belarusian State University
of Informatics and Radioelectronics
Tel.: +375 17 293-88-69
E-mail: u.turovets@bsuir.by
Turavets Ulyana Yahorayna