

# Sklopljeno optično modeliranje sodobnih optoelektronskih gradnikov

Milan Kovačič, Marko Jošt, Matevž Bokalič, Benjamin Lipovšek

Univerza v Ljubljani, Fakulteta za elektrotehniko, Tržaška c. 25, 1000 Ljubljana, Slovenija  
E-pošta: benjamin.lipovsek@fe.uni-lj.si

**Povzetek.** Napredni pristopi optičnega modeliranja so eno izmed ključnih orodij pri analizi, načrtovanju in optimizaciji sodobnih optoelektronskih gradnikov, kot so sončne celice in svetleče diode. Pri tem se zaradi čedalje večje kompleksnosti struktur vse bolj uveljavlja metoda sklopljenega modeliranja, pri kateri združujemo različne numerične modele, ki jih uporabimo za obravnavo različnih delov strukture. V tem prispevku se osredotočamo na sklopljeno optično modeliranje visokoučinkovitih heterospojnih silicijevih sončnih celic in organskih svetlečih diod. V obeh primerih najprej s pomočjo optičnih simulacij analiziramo delovanje izhodiščne strukture, pri čemer posebno pozornost posvetimo analizi optičnih izgub. Nato oba gradnika na sprednji strani nadgradimo s površinsko teksturirano folijo, s katero občutno izboljšamo svetlobno ujetje pri sončnih celicah oziroma izstop svetlobe pri svetlečih diodah, ter ovrednotimo njen vpliv v primerjavi z izhodiščno strukturo. V zaključnem delu se posvetimo še optimizaciji geometrijskega profila površinske teksture, s katero bi bilo mogoče doseči kar največje učinkovitosti delovanja obravnavanih optoelektronskih gradnikov.

**Ključne besede:** sončne celice, organske svetleče diode, upravljanje svetlobe, optično modeliranje

## Coupled optical modelling of modern optoelectronic devices

Advanced concepts of optical modelling present one of the key tools for analysis, design and optimization of modern optoelectronic devices, such as solar cells and light-emitting diodes. However, since the structures of these devices are becoming increasingly more complex, they can only be accurately treated by means of a coupled modelling approach, in which different parts of the device are analyzed by different numerical models. In this work, we focus on coupled optical modelling of high-efficiency heterojunction silicon solar cells and organic light-emitting diodes. Employing optical simulations in both cases, we first analyze the performance of the initial device structures, with a special emphasis on the analysis of optical losses. Then both devices are enhanced with a surface-textured light-management foil at the front side by which the in-coupling into the solar cell and the out-coupling out of the light-emitting diode are improved significantly. We evaluate the performance of the surface-textured devices compared to their initial structure. In the final part, we optimize the geometrical profile of the surface texture to obtain an optimal device performance in both types of the studied optoelectronic devices.

**Keywords:** Solar cells, Organic light emitting diodes, Light management, Optical modelling

## 1 UVOD

Optoelektronika je dandanes eden izmed tehnoloških temeljev sodobne družbe. Optoelektronske naprave nas spremljajo tako rekoč na vsakem koraku, saj jih srečujemo tako v obliki majhnih potrošniških izdelkov (pametni telefoni, zasloni, kompaktni fotoaparati) kot tudi velikih sistemov (sončne elektrarne, javna razsvetljava).

Pri načrtovanju, analizi in optimizaciji sodobnih optoelektronskih gradnikov so nepogrešljivo orodje optične simulacije, ki ne le skrajšajo pot do končnega izdelka, temveč ključno prispevajo tudi k bolj poglobljenemu razumevanju različnih fizikalnih pojavov, ki v njih nastopajo [1]. Z njimi je namreč mogoče pridobiti podatke tudi o veličinah, ki jih eksperimentalno ne bi mogli izmeriti. Zaradi kompleksnosti struktur celovite optične analize tovrstnih gradnikov ni mogoče izvesti le z enim fizikalnim modelom, temveč je treba združevati različne modele, ki jih uporabimo vsakega za svoj del obravnavane strukture. Govorimo o pristopu t. i. sklopljenega modeliranja (angl. coupled modelling approach – CMA), ki je zadnja leta vse bolj v veljavi in ga vse pogosteje uporabljajo v številnih raziskovalnih skupinah [2–4].

V pričujočem prispevku bomo s pristopom sklopljenega modeliranja obravnavali dva ključna optoelektronska gradnika, in sicer visokoučinkovito heterospojno silicijevo sončno celico ter organsko

svetlečo diodo. Za njuno optično analizo bomo uporabili lastni napredni optični simulator CROWM [2, 5, 6]. Najprej bomo predstavili delovanje simulatorja ter ključne vhodne in izhodne parametre obeh struktur. Nato bomo izhodiščne strukture obravnavali v smislu analize optičnih izgub in evalvacije osnovnega delovanja. V drugem delu bomo obe strukturi na sprednji strani nadgradili s površinsko teksturirano folijo, ki omogoča bistveno boljše optične razmere tako pri vstopu svetlobe v strukturo sončne celice kot tudi pri izstopu svetlobe iz svetleče diode, s čimer se optične izgube občutno zmanjšajo, učinkovitost gradnikov pa poveča [7–11]. V zaključni fazi bomo s pomočjo optičnih simulacij površinsko teksturo optimizirali še s stališča njenega geometrijskega profila, pri čemer bo cilj poiskati takšno teksturo, ki bo omogočala kar najboljše optične razmere in s tem učinkovitost obeh obravnavanih gradnikov.

## 2 OPTIČNO MODELIRANJE

Sodobni optoelektronski gradniki, kot so visokoučinkovite sončne celice in svetleče diode, so s stališča optičnega modeliranja kompleksne večplastne strukture, sestavljene iz množice različnih materialov, ki nastopajo v plasteh različnih debelin. V optično tankih plasteh, tj. tipično pri debelinah manj kot 1  $\mu\text{m}$ , svetloba ohranja koherentni značaj, kar se odraža predvsem v opaznih interferenčnih pojavih; govorimo o koherentnem širjenju, ki ga je treba obravnavati z ustreznimi fizikalnimi modeli s področja t. i. valovne optike. Po drugi strani pa se pri dovolj debelih plasteh, tipično 10  $\mu\text{m}$  in več, koherentni značaj izgubi, interferenčni pojavi pa izzvenijo; v tem primeru govorimo o nekoherentnem širjenju, ki ga navadno obravnavamo s fizikalnimi modeli s področja t. i. geometrijske optike. Dodatno se v strukturah na spojih med plastmi lahko pojavljajo tudi različne teksture. Te so lahko v mikro- ali milimetrskem velikostnem razredu, kjer prehod svetlobe preko takšnega spoja v celoti opisuje Snellov lomni zakon (geometrijska optika). V primeru tekstur iz nanometerskega velikostnega razreda, kjer so značilne dimenzije texture (npr. perioda, višina, korelacijska dolžina) primerljive z valovno dolžino svetlobe, pa pridejo do izraza tudi uklonski učinki. V tem primeru je obravnavo prehoda svetlobe preko takšnega spoja treba izvesti z ustrežno metodo s področja valovne optike, pri čemer se najpogosteje uporabljata rigorozna analiza sklopljenih valov (angl. rigorous coupled wave analysis, RCWA) in metoda končnih elementov (angl. finite element method, FEM).

Celovito optično analizo opisanih kompleksnih struktur lahko učinkovito izvedemo le s pristopi sklopljenega modeliranja, kjer različne dele strukture obravnavamo z različnimi modeli, med njimi pa zagotovimo ustrežno povezavo, ki je tipično iterativnega značaja. V Laboratoriju za fotovoltaike in optoelektroniko (LPVO) na Fakulteti za elektrotehniko Univerze v Ljubljani smo razvili optični simulator CROWM (angl. Coupled Ray Optics / Wave optics

Model), ki združuje model sledenja žarkov v treh dimenzijah (angl. ray tracing, RT) z modelom prenosnih matrik (angl. transfer matrix method, TMM) [2, 5]. Prvi je uporabljen za analizo nekoherentnega širjenja svetlobe skozi vse optično debele plasti v strukturi ter loma svetlobe na gladkih in mikroteksturiranih spojih (geometrijska optika), medtem ko drugi opisuje koherentno širjenje svetlobe skozi vse gladke optično tanke plasti (valovna optika). Za obravnavo morebitnih nanoteksturiranih spojev v strukturi, v kateri bi postali izraziti tudi uklonski pojavi, CROWM omogoča še uporabo modela RCWA [12], ki pa v okviru te študije ne bo uporabljen.

Poleg ustreznih optičnih modelov je treba za verodostojno optično analizo dobro poznati parametre strukture. To so predvsem debeline posameznih plasti, ki jih ali poznamo vnaprej, npr. z dobrim poznavanjem proizvodnega procesa, ali pa jih izmerimo naknadno, npr. s pomočjo vrstičnega elektronskega mikroskopa (angl. scanning electron microscopy, SEM). Sledijo profili morebitnih tekstur v strukturi, ki jih lahko izmerimo z različnimi orodji, kot so profilometer, konfokalni mikroskop ali mikroskop na atomsko silo (angl. atomic force microscopy, AFM). Dobro pa moramo poznati tudi optične lastnosti posameznih materialov, ki se v splošnem spreminjajo z valovno dolžino svetlobe  $\lambda$  in se tipično podajajo v obliki kompleksnega lomnega količnika  $N(\lambda) = n(\lambda) - jk(\lambda)$ , v katerem  $n$  predstavlja realni del,  $j$  imaginarno enoto,  $k$  pa t. i. ekstinkcijski koeficient, ki je neposredno povezan s stopnjo absorpcije v materialu pri dani valovni dolžini. Kompleksni lomni količnik materialov je mogoče določiti na različne načine, kot sta elipsometrija [13] in metoda merjenja odbojnosti in prepustnosti [14].

Ne nazadnje je treba pri optičnih simulacijah jasno opredeliti vhodne in izhodne signale. Njihove definicije se razlikujejo za različne tipe optoelektronskih gradnikov, zato jih v nadaljevanju posebej navajamo za dva izbrana primera, ki bosta obravnavana v okviru tega prispevka.

### 2.1 Svetlobni sprejemniki – sončne celice

Pri svetlobnih sprejemnikih, kot so fotodetektorji in sončne celice, vhodni signal optičnih simulacij predstavlja svetloba, ki vpada na strukturo. Pri tem moramo poznati valovno dolžino svetlobe  $\lambda$ , gostoto vpadne moči in polarizacijo. V primeru sončnih celic kot vir svetlobe pogosto vzamemo referenčni sončni spekter AM1,5G (IEC60904-3), v katerem je gostota vpadne moči  $J_{\text{ph}}$  pri posameznih valovnih dolžinah natančno določena, svetlobo pa obravnavamo kot nepolarizirano oziroma v simulacijah privzamemo enako razmerje transverzalno električne (TE) in transverzalno magnetne (TM) komponente.

Tipični izhodni signali, ki nas zanimajo v sklopu optičnih simulacij svetlobnih sprejemnikov, pa so relativni deleži vpadne svetlobe, ki se pri posamezni valovni dolžini odbije od celotne strukture, prepusti skozi

strukturo ali pa absorbira znotraj določene plasti. Govorimo o veličinah odbojnosti oz. reflektanci  $R$ , prepustnosti oz. transmitanci  $T$  in absorptanci  $A$ . V primeru sončnih celic nas najpogosteje zanima ravno absorptanca znotraj fotoaktivne plasti, v kateri se generirajo pari nosilcev električnega naboja (elektron-vrzel), ki jih med delovanjem sončne celice zbiramo na kontaktih v obliki električnega toka. Če predpostavimo, da se med ekstrakcijo nosilcev naboja iz fotoaktivne plasti nič nosilcev ne izgubi, lahko iz podatka o absorptanci izračunamo tudi gostoto kratkostičnega toka celice  $J_{SC}$  po enačbi (1), v kateri  $q$  predstavlja osnovni naboj,  $h$  Planckovo konstanto in  $c_0$  hitrost svetlobe v praznem prostoru. Ker je vrednost  $J_{SC}$  neposredno povezana z učinkovitostjo pretvorbe sončne energije v električno, jo pri optičnem načrtovanju in optimizaciji sončnih celic pogosto jemljemo kot kriterijsko funkcijo.

$$J_{SC} = \frac{q}{h c_0} \int_{\lambda} A(\lambda) J_{ph}(\lambda) \lambda d\lambda \quad (1)$$

## 2.2 Svetlobni oddajniki – svetleče diode

Pri optičnih simulacijah svetlobnih oddajnikov vhodni signal predstavlja svetloba, generirana znotraj strukture. V primeru organskih svetlečih diod (angl. organic light-emitting diode, OLED) je to elektroluminiscenčna emisija, ki jo sproži prehod dipola iz vzbujenega molekularnega stanja v osnovno stanje. Ker velikosti takšnih sevalnih virov – molekul – v OLED ne presegajo nekaj nanometrov, jih lahko obravnavamo kot točkovne dipole. Točkovni sevalni dipoli so modelirani kot klasični, nenehno nihajoči dipoli s preddefiniranim emisijskim spektrom in specifično kotno porazdelitvijo intenzitete sevale svetlobe (angl. angular intensity distribution, AID).

Sevalni dipoli so v splošnem lahko poljubno orientirani v prostoru, vendar pa lahko vsak naključno orientiran dipol predstavimo s kombinacijo treh ortogonalnih dipolov, pri čemer je en pravokoten (vertikalen) glede na horizontalno ravnino globalnega koordinatnega sistema, s katero so paralelne tudi vse plasti strukture, druga dva pa sta z njo paralelna (horizontalna). Dipoli so v večini primerov obravnavani kot izotropno orientirani, torej moramo upoštevati samo orientacijo glede na normalo sistema. Za opis splošne orientacije vseh sevalnih dipolov v sistemu vpeljemo anizotropni koeficient  $a$ , ki definira razmerje med številom vertikalnih dipolov in vseh dipolov. Za primer naključne orientacije dipolov je  $a = 1/3$ . Z vpeljavo anizotropije kompleksen problem opisa detajlne orientacije posameznih sevalnih dipolov zmanjšamo na razmeroma enostaven problem definicije razmerja med horizontalnimi in vertikalnimi dipoli [15].

OLED se primarno uporabljajo kot svetlobni viri (svetila, zaslani) v vidnem delu spektra, zato izhodne podatke, ki opisujejo lastnosti delovanja OLED, namesto v radiometričnih veličinah raje podajamo v fotometričnih veličinah, ki so prilagojene zaznavi človeškega očesa.

Najpomembnejša med njimi je učinkovitost  $\eta_p$ , ki je definirana kot razmerje med fotometrično močjo v luminih, ki jo zaznavamo na izhodu (v zraku), in električno močjo, ki se troši v elementu. Izračunamo jo lahko po enačbi (2), v kateri je  $K$  funkcija luminiscenčne učinkovitosti, ki ustreza relativni občutljivosti človeškega očesa pri fotopičnem vidu [16],  $K_m = 683 \text{ lm/W}$  je njena maksimalna vrednost pri valovni dolžini 555 nm,  $U$  je električna napetost,  $I_c$  električni tok in  $EQE$  zunanja kvantna učinkovitost.

$$\eta_p = \frac{K_m h c_0}{q U} \int_{\lambda} EQE(I_c, \lambda) K(\lambda) d\lambda \quad (2)$$

Optične lastnosti, na katere se osredotočamo v tem prispevku, so zajete v zunanji kvantni učinkovitosti  $EQE$ , ki izraža razmerje med številom fotonov, ki dosežejo daljno polje (v zraku), in številom injiciranih nosilcev naboja znotraj strukture. Izračunamo jo po enačbi (3), v kateri je  $\gamma$  električna učinkovitost, definirana kot razmerje med številom sevalnih rekombinacij v emisijski plasti in številom injiciranih nosilcev naboja,  $s_{el}$  je normalizirani elektroluminiscenčni emisijski spekter emisijskega materiala,  $\eta_{out}$  je izstopna učinkovitost generirane svetlobe v daljno polje,  $\eta_{rad,e}^*$  pa je efektivna sevalna učinkovitost.

$$EQE = \gamma \int_{\lambda} s_{el}(\lambda) \eta_{rad,e}^*(\lambda) \eta_{out}(\lambda) d\lambda \quad (3)$$

Pomemben faktor  $\eta_{rad,e}^*$  določa razmerje med emisijskimi in neemisijskimi rekombinacijami, na katero močno vpliva optično okolje (npr. optična votlina). Izračunamo ga po enačbi (4), v kateri je  $\eta_{rad,e}$  konstanta lastne sevalne učinkovitosti sevalnega vira, določena z materialom,  $F$  pa Purcellov faktor, definiran kot razmerje med skupno sevano močjo na lokaciji vira in skupno sevano močjo, ki bi jo vir oddajal v neskončnem homogenem prostoru. V primeru OLED se v tankoplastni strukturi med substratom in zadnjim kontaktom pojavi optična mikrovotlina, ki določa Purcellov faktor  $F$ .

$$\eta_{rad,e}^*(\lambda) = \frac{\eta_{rad,e} F(\lambda)}{1 - \eta_{rad,e} + \eta_{rad,e} F(\lambda)} \quad (4)$$

V optičnih simulacijah z uporabo sklopljenega modeliranja izračunamo valovno odvisno izstopno učinkovitost generirane svetlobe  $\eta_{out}$  ter valovno odvisen Purcellov faktor  $F$ , nato pa z uporabo zgornjih enačb izračunamo  $EQE$  kot primarni izhodni podatek. Kot drugi izhodni podatek simulacij pa nas pogosto zanima še valovno odvisna kotna porazdelitev intenzitete sevale svetlobe (AID) v daljnem polju, ki v zgornjih enačbah sicer ne nastopa. Ta je še zlasti pomembna pri belih OLED-svetilih, kjer je treba zagotoviti ujemanje AID-karakteristik posameznih valovnih komponent, saj bi se v nasprotnem primeru lahko barva svetlobe nezaželeno spreminjala z vidnim kotom.

### 3 HETEROSPOJNE SILICIJEVE SONČNE CELICE

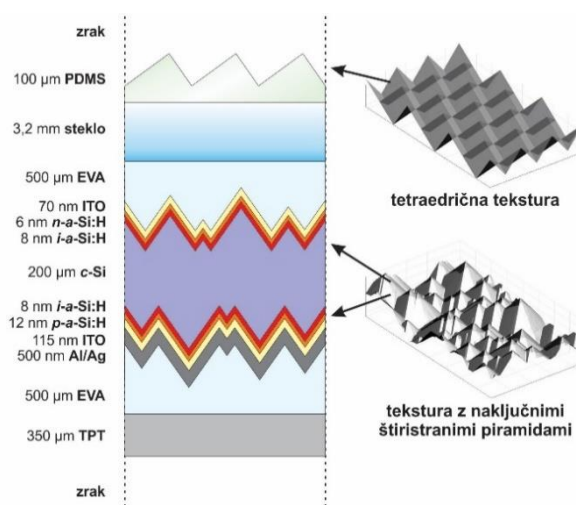
Na področju fotovoltaike danes prevladujejo sončne celice, osnovane na rezinah kristalnega silicija, pri čemer najvišje učinkovitosti pretvorbe sončne energije v električno dosegajo heterospojne izvedbe [17, 18]. Primer strukture heterospojne silicijeve sončne celice prikazuje slika 1, v kateri so poleg navedb posameznih plasti podane tudi njihove debeline te niso risane v razmerju), hkrati pa sta prikazani še obe značilni teksturi, ki bosta podrobneje opisani v nadaljevanju.

Jedro celice predstavlja 200  $\mu\text{m}$  debela rezina kristalnega silicija (*c*-Si), ki je za potrebe boljšega ujetja svetlobe tipično teksturirana z obeh strani. Teksturiranje se izvaja z alkalnim jedkanjem, najpogosteje v raztopini KOH pri povišani temperaturi, pri čemer se na površini izoblikujejo naključne štiristrane piramide z gostoto več deset tisoč piramid na kvadratni milimeter. Povprečna višina piramid, ki je odvisna od procesa, se giblje v območju od 1 do 10  $\mu\text{m}$ , stranice pa s horizontalo oklepajo kot nekoliko manj kot  $55^\circ$ . Primer izmerjene teksture je prikazan v spodnjem desnem kotu slike 1. Teksturirana površina silicijeve rezine je pasivirana s tanko plastjo čistega hidrogeniziranega amorfne silicija (*i*-a-Si:H), ki ji nato vsaka na svoji strani sledita še z borom in s fosforjem močno dopirani plasti hidrogeniziranega amorfne silicija (*p*-a-Si:H in *n*-a-Si:H), ki služita za selektivno zbiranje svetlobno generiranih nosilcev električnega naboja. Zaradi slabe prevodnosti dopiranih plasti *a*-Si:H je za učinkovit transport nosilcev potrebna dodatna plast transparentnega prevodnega oksida, pri čemer se najpogosteje uporablja z indijem dopirani kositrov oksid (ITO). Sledita še kovinska kontakta; kontakt na sprednji strani je realiziran s sitotiskom v obliki tankih kontaktnih prstov, medtem ko je na zadnji strani kontakt realiziran po celotni površini celice. Kovinski kontakt na zadnji strani pri tem opravlja tudi funkcijo učinkovitega odbojnika za svetlobo, ki se ji v prvem preletu preko silicijeve plasti ni uspelo v celoti absorbirati.

Pred končno uporabo je celicam treba zagotoviti še ustrezno mehansko trdnost in zaščito pred zunanji vplivi. To se izvede v koraku enkapsulacije, pri katerem se najpogosteje uporablja metoda laminacije. Celice se na sprednji strani zaščitijo z debelo plastjo visokoprepustnega stekla, na zadnji strani pa z zaščitno večslojno polimerno folijo (npr. TPT). Med celico in steklom oziroma zadnjo zaščitno folijo je še plast etilenvinil acetatne folije (EVA), ki v postopku laminacije poveže celico s sprednjo in zadnjo zaščitno plastjo ter med poznejšim obratovanjem celice zagotavlja zaščito pred zunanji vplivi.

Kot zadnji gradnik strukture heterospojne silicijeve sončne celice, prikazane na sliki 1, pa je na površini zaščitnega stekla še tanka teksturirana folija na osnovi polidimetilsiloksana (PDMS), katere glavna funkcija je dodatno izboljšanje ujetja svetlobe znotraj sončne celice [7, 10]. Takšne folije so se izkazale kot zelo

učinkovite v primeru tankoplastnih organskih in perovskitnih sončnih celic [10, 19], medtem ko bo njihova uporaba v heterospojnih silicijevih sončnih celicah ovrednotena v sklopu tega prispevka. Teksturo na površini PDMS-plasti je mogoče realizirati na različne načine, na primer s postopkom UV-nanovtisne litografije (UV-NIL) [19, 20], prav tako je mogoče realizirati različne oblike oziroma profile teksture. Kot eden izmed najbolj učinkovitih se je za potrebe svetlobnega ujetja izkazal profil heksagonalno razporejenih enakostraničnih tristranih piramid oz. tetraedrov, katerih dolžine stranic se lahko gibljejo v rangu od 1 do 100  $\mu\text{m}$ , ploskve piramid pa druga z drugo oklepajo pravi kot (t. i. »cornercube« tekstura) [7, 9]. Primer takšne teksture je prikazan v zgornjem desnem kotu slike 1.



Slika 1: Shematski prerez strukture heterospojne silicijeve sončne celice z označenimi debelinami plasti ter teksturami, realiziranimi na različnih spojih v strukturi. Debeline plasti niso risane v pravem razmerju.

#### 3.1 Svetlobno ujetje v heterospojnih silicijevih sončnih celicah

V optimalnem primeru popolne izrabe vpadnega sončnega spektra, ko bi se vsakemu vpadnemu fotonu uspelo absorbirati v fotoaktivni plasti in generirati svoj par nosilcev naboja, bi heterospojna silicijeva sončna celica pod referenčnimi pogoji osvetlitve ( $25^\circ\text{C}$ , gostota vpadne moči  $100\text{ mW/cm}^2$ , spekter AM1,5G) izkazovala gostoto kratkostičnega toka  $J_{\text{SC, ideal}} = 46,53\text{ mA/cm}^2$ . V realnosti je delež izrabe spektra nižji zaradi različnih mehanizmov optičnih izgub, ki jih poskušamo omejevati z raznovrstnimi pristopi upravljanja svetlobe. Razumevanje tako optičnih izgub kot tudi omenjenih pristopov je ključno za uspešno načrtovanje in optimizacijo visokoučinkovitih sončnih celic, zato jih s pomočjo sklopljenega modeliranja v okolju CROWM podrobno obravnavamo v tem razdelku.

V prvem koraku smo izvedli simulacijo gole, neenkapsulirane sončne celice (brez plasti PDMS, stekla, EVA in TPT) brez kakršnihkoli tekstur v strukturi –

površina silicijeve rezine je bila obravnavana kot gladka. Simulirana absorptanca, tj. delež vpadne svetlobe, ki se absorbira v siliciju pri posameznih valovnih dolžinah, je prikazana na sliki 2 s prekinjeno rumeno krivuljo. Gostota kratkostičnega toka  $J_{SC}$ , izračunana iz simulirane absorptance ob upoštevanju referenčnega spektra AM1,5G, znaša  $34,19 \text{ mA/cm}^2$ , kar ustreza 73,5-odstotni izrabi spektra. Občutne optične izgube v obsegu več kot četrte vpadnega spektra v primeru obravnavane celice izvirajo primarno iz treh mehanizmov [10]. Prvič, v celotnem spektralnem območju je prisoten odboj svetlobe od površine celice. Ta je deloma omejen z optimalno izbiro debeline sprednje plasti ITO, ki poleg zbiranja nosilcev naboja opravlja tudi funkcijo protiodbojne plasti; v danem primeru je minimum odbojnosti in s tem vrh absorptance pri valovni dolžini 640 nm. Povečanje debeline plasti ITO bi se odrazilo v premiku tega vrha proti daljšim valovnim dolžinam (v desno), zmanjšanje debeline pa v premiku vrha proti krajšim valovnim dolžinam (v levo). Drugič, del svetlobe, ki vstopa v strukturo, se absorbira v neaktivnih plasteh, še preden doseže fotoaktivno plast. Ta pojav t. i. parazitne absorpcije je zlasti izrazit pri kratkih valovnih dolžinah, pri katerih se svetloba močno absorbira v sprednjih plasteh ITO, *n-a-Si:H* in *i-a-Si:H*, ter v danem primeru obsega 6,1 % celotnega vpadnega spektra. Pod tretji mehanizem štejemo pojav, ko se del svetlobe, ki sicer vstopa v fotoaktivno plast, v njej ne uspe popolnoma absorbirati, temveč po odboju od zadnjega odbojnika izstopa iz strukture na sprednji strani in se prišteva k skupni odbojnosti. Ta pojav je poudarjen pri daljših valovnih dolžinah, ko zmožnost absorpcije v siliciju začne upadati. Izgube zaradi obeh mehanizmov odboja skupaj v danem primeru obsegajo 20,4 % celotnega vpadnega spektra in so s tem poglaviti vir optičnih izgub v obravnavani sončni celici. Za lažjo primerjavo je porazdelitev vpadnega spektra na uporabni delež in deleže optičnih izgub prikazana na sliki 3 za vse primere, simulirane v tem razdelku.

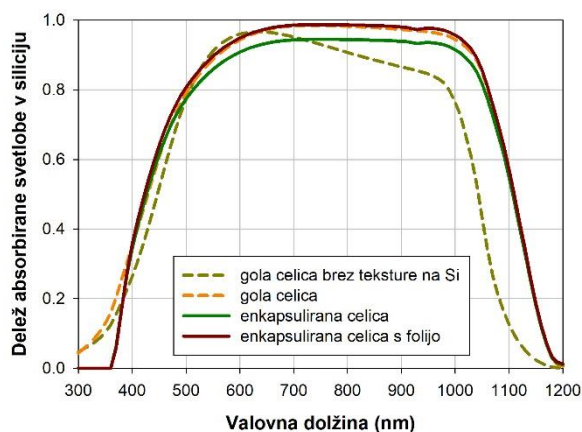
V naslednjem koraku smo v simulaciji upoštevali, da sta obe površini rezine silicija teksturirani, medtem ko smo še vedno simulirali golo celico. Pri tem smo uporabili realno teksturo z naključnimi štiristranskimi piramidami, izmerjeno s pomočjo mikroskopa na atomsko silo (AFM). Povprečna višina piramid v teksturi je znašala  $2,8 \mu\text{m}$ , največja višina je bila  $6,25 \mu\text{m}$ , korelacijska dolžina pa  $1,3 \mu\text{m}$ . Simulirana absorptanca je prikazana na sliki 2 s prekinjeno oranžno krivuljo. Gostota kratkostičnega toka  $J_{SC}$  v tem primeru znaša  $38,55 \text{ mA/cm}^2$ , kar ustreza 82,8-odstotni izrabi spektra. Iz rezultata je očitno, da se je učinkovitost celice bistveno povečala; absorptanca predvsem v dolgovalovnem delu je občutno višja, vrednost  $J_{SC}$  je za 12,8 % večja od prejšnjega primera, medtem ko so se optične izgube zaradi odbojnosti zmanjšale za kar 73,8 %, kot je razvidno iz slike 3. Pri razlagi omenjenih izboljšav lahko ponovno govorimo o treh mehanizmih optičnega ujetja, ki jih pogojuje tekstura, realizirana na površini silicijeve plasti [10]. Prvič, zaradi teksture se zmanjša odboj od

površine celice, saj del svetlobe, ki se ob prvem naletu sicer odbije od stranic piramid, v nadaljevanju svoje poti vpadna na stranice sosednjih piramid, kjer se dodatno prepušča v notranjost strukture. Drugič, zaradi loma na teksturi svetloba v notranjosti celice vstopa pod večjimi koti, kar podaljša optične poti in s tem povečuje absorpcijo v fotoaktivni plasti. In tretjič, svetloba, ki se ji ni uspelo v celoti absorbirati in se po odboju od zadnjega odbojnika vrača proti sprednji strani, je v tem primeru mnogo bolj učinkovito ujeta v strukturi. Na teksturirano površino z notranje strani namreč vpadna pod večjimi koti, ki lahko celo presegajo kritični vpadni kot popolnega odboja. Občuten delež svetlobe se zato odbije nazaj proti fotoaktivni plasti, kjer se lahko dodatno absorbira; ta pojav se v simulirani absorptanci na sliki 2 kaže predvsem kot izrazit porast karakteristike v dolgovalovnem delu. Omeniti pa je treba, da vsi omenjeni mehanizmi, ki povečujejo absorpcijo v fotoaktivni plasti, seveda povečujejo tudi parazitno absorpcijo v neaktivnih plasteh. Ta se v primerjavi s prejšnjim primerom skoraj podvoji, kot prikazuje slika 3.

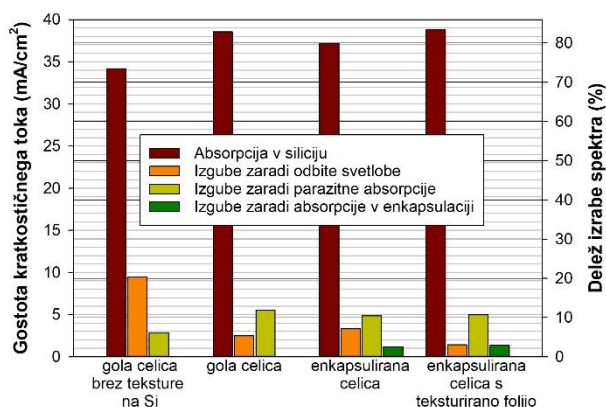
V tretjem koraku smo prešli na simulacijo enkapsulirane celice, a sprva še brez teksturirane plasti PDMS na sprednji strani. Celico iz prejšnjega primera smo torej obdali s folijo EVA na obeh straneh ter s steklom na sprednji in folijo TPT na zadnji strani. Simulirana absorptanca je prikazana na sliki 2 s polno zeleno krivuljo. Gostota kratkostičnega toka  $J_{SC}$  znaša  $37,15 \text{ mA/cm}^2$ , kar ustreza 79,8-odstotni izrabi spektra. Rezultati kažejo, da je učinkovitost enkapsulirane celice v primerjavi z golo celico manjša za 3,6 %. Poglaviti razlog je odboj od sprednje površine stekla, ki vpliva na dobre 4 % vpadne svetlobe in je pretežno enakomerno prisoten v celotnem valovnem območju, kar je razvidno iz enakomernega znižanja karakteristike absorptance, prikazane na sliki 2. Dodatno pa se del kratkovalne svetlobe v enkapsulacijskih plasteh tudi absorbira in posledično ne doseže fotoaktivne plasti, kar je na sliki 2 razvidno iz ničelne absorptance pri kratkih valovnih dolžinah do 370 nm. Parazitna absorpcija v enkapsulacijskih plasteh, ki v tem primeru obsega 2,5 % vpadnega spektra, je dodatni vir optičnih izgub in je na sliki 3 prikazana s svojim stolpcem.

V zadnjem koraku smo želeli ovrednotiti še vpliv dodatne teksturirane plasti PDMS s tetraedrično teksturo, opisano v prejšnjem razdelku. Dolžina stranic polkock na teksturi je znašala  $5,5 \mu\text{m}$ , maksimalna višina teksture pa  $6,36 \mu\text{m}$ . V preteklih študijah, izvedenih na primeru tankoplastnih organskih in perovskitnih celic, je takšna plast omogočala občutno izboljšanje gostote kratkostičnega toka tudi do 25 % [10]. Vendar pa je treba poudariti, da drugih mehanizmov svetlobnega ujetja v omenjenih celicah ni bilo, medtem ko v primeru heterospojne silicijeve sončne celice učinkovito svetlobno ujetje dosežemo že s teksturo na površini rezine kristalnega silicija. Simulirana absorptanca je prikazana na sliki 2 s polno rdečo krivuljo. Gostota kratkostičnega toka  $J_{SC}$  znaša  $38,80 \text{ mA/cm}^2$ , kar ustreza 83,4-odstotni izrabi spektra. Rezultati kažejo, da z

uporabo PDMS plasti dosežemo 4,4-odstotno izboljšanje učinkovitosti celice, kar je pričakovano manj kot v primeru tankoplastnih sončnih celic, a vseeno ni zanemarljivo. Mehanizmi optičnega ujetja so pri tem podobni kot v primeru teksture na siliciju; tudi tu gre za zmanjšanje odboja od površine, za podaljšanje optičnih poti in končno za notranje ujetje svetlobe, ki bi se sicer po odboju od zadnjega odbojnika izgubljala iz strukture na sprednji strani. Iz rezultatov lahko tako izluščimo ključno ugotovitev, da uporaba plasti PDMS ne le izniči negativni vpliv enkapsulacije, temveč še dodatno zniža optične izgube zaradi odbite svetlobe, ki v tem primeru obsegajo le še 3 % celotnega vpadnega spektra. Poglavitni vir izgub zdaj ostaja parazitna absorpcija, tako v neaktivnih plasteh celice kot tudi v enkapsulacijskih plasteh. To bi bilo treba na nadaljnji poti razvoja tovrstnih sončnih celic zmanjšati z izboljšanjem optičnih lastnosti obstoječih oziroma z uvedbo morebitnih novih materialov v strukturi.



Slika 2: Absorptanca v fotoaktivni plasti heterospojne silicijeve sončne celice za štiri različne primere.

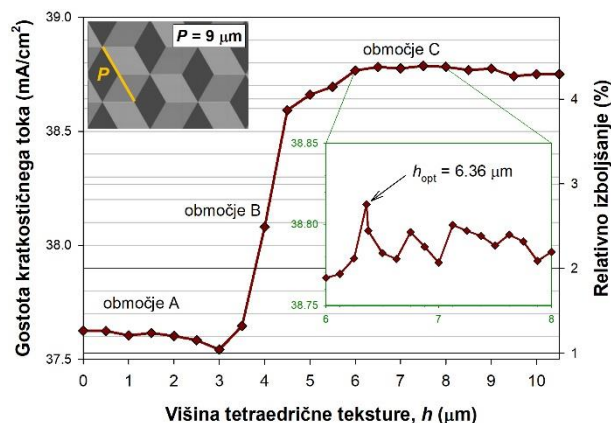


Slika 3: Porazdelitev spektra na uporabno gostoto kratkostičnega toka ter izgube zaradi odboja od strukture, parazitne absorpcije v neaktivnih plasteh in absorpcije v enkapsulacijskih plasteh.

### 3.2 Optimizacija tetraedrične teksture na površini plasti PDMS

V prejšnjem razdelku smo pokazali, da dodatna teksturirana plast PDMS občutno povečuje učinkovitost heterospojne sončne celice. Ostaja pa vprašanje, ali je izbrana oblika oziroma profil teksture hkrati tudi optimalen. Za namen optimizacije profila teksture lahko ponovno uporabimo optične simulacije, osnovane na metodi sklopljenega modeliranja v okolju CROWM.

Izvedli smo serijo simulacij, v katerih smo postopoma spreminjali geometrijsko razmerje med višino in periodo teksture, realizirane na površini plasti PDMS. Perioda  $P$  heksagonalne teksture, ki je označena v zgornjem levem kotu slike 4, je bila postavljena na  $9 \mu\text{m}$ , medtem ko smo celotno medvršno višino teksture  $h$  spreminjali med 0 in  $10,5 \mu\text{m}$  v korakih po  $0,5 \mu\text{m}$ . Za vsako izbrano kombinacijo višine in periode smo izvedli simulacijo celotne sončne celice in izračunali vrednost gostote kratkostičnega toka  $J_{SC}$ . Rezultati so prikazani na sliki 4.



Slika 4: Gostota kratkostičnega toka heterospojne silicijeve sončne celice v odvisnosti od geometrijskega razmerja tetraedrične teksture, realizirane na površini plasti PDMS. V vseh primerih je upoštevana perioda teksture  $P = 9 \mu\text{m}$ .

Potek spreminjanja vrednosti  $J_{SC}$  s povečevanjem višine teksture  $h$  izkazuje tri značilna območja, ki so na sliki 4 označena z oznakami A, B in C. V prvem območju A pri nizkih vrednostih  $h$  gostota kratkostičnega toka  $J_{SC}$  sprva pada. Z višanjem teksture se namreč povečuje vpadni kot naleta svetlobe na površino, kar povečuje odboj in z njim povezane izgube. Ko vrednost  $h$  nadalje povečujemo, dosežemo točko, ko začne odbita svetloba vpadati na sosednje stranice na teksturi, pri čemer del te svetlobe vstopa v strukturo. Nastopi območje B, kjer izgube zaradi odboja začnejo strmo padati, vrednosti  $J_{SC}$  pa pri tem rastejo. Končno dosežemo še območje C, kjer kombinacija vseh treh mehanizmov optičnega ujetja, opisanih v prejšnjem razdelku, zagotavlja visoko stopnjo absorpcije v fotoaktivni plasti in s tem visoke vrednosti gostote kratkostičnega toka  $J_{SC}$ . Rezultati kažejo, da moramo za optimalno delovanje obravnavane heterospojne silicijeve sončne celice izbrati tetraedrično

teksturo z višino  $h$  med 6 in 8  $\mu\text{m}$  pri periodi  $P = 9 \mu\text{m}$ , kar ustreza geometrijskemu razmerju  $h/P = 0,67 - 0,89$ .

V zadnjem koraku raziskave pa smo izvedli še podrobnejše simulacije v območju C z željo poiskati optimalno obliko tetraedrične teksture. Rezultati so prikazani v manjšem grafu na sliki 4. Iz rezultatov je razvidno, da v omenjenem območju vrednosti  $J_{SC}$  ne odstopajo bistveno od povprečne vrednosti (manj kot 1 %), kljub temu pa absolutno največjo vrednost dosežemo pri teksturi z višino  $h_{opt} = 6,36 \mu\text{m}$ , pri teksturi, pri kateri stranice tetraedrov druga z drugo oklepajo ravno pravi kot. S stališča optičnega ujetja v heterospojnih silicijevih sončnih celicah torej ta tip teksture, realizirane na površini plasti PDMS, zagotavlja največje učinkovitosti pretvorbe sončne energije v električno.

#### 4 ORGANSKE SVETLEČE DIODE

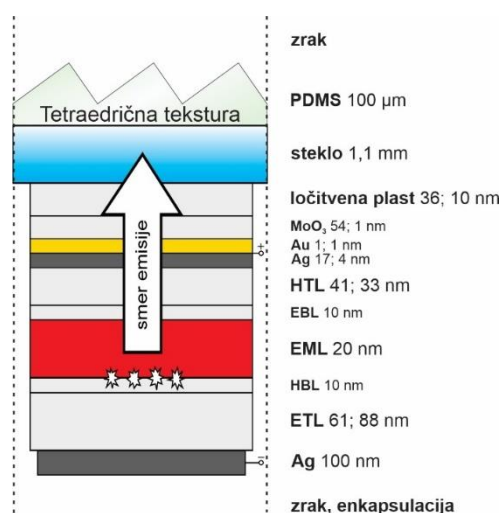
V zadnjih letih lahko opazimo hitro širjenje novih, t. i. polprevodniških svetlobnih virov, osnovanih na svetlečih diodah (LED). Med njimi prevladujejo neorganske izvedbe iz kristalnih polprevodniških materialov, ki so že močno razširjene na trgu, saj omogočajo visoke učinkovitosti in dolgo življenjsko dobo. Kot komplementarna neorganskim pa se čedalje bolj uveljavlja tudi relativno nova tehnologija organskih svetlečih diod (OLED), ki je že močno razširjena med zasloni (televizije, pametni telefoni), ponuja pa tudi možnosti za splošno notranjo in zunanjo osvetlitev. OLED-tehnologija obeta ceneno izdelavo velikih panelnih svetlobnih virov na togih ali fleksibilnih substratih s kakovostno homogeno osvetlitvijo, ki jih je mogoče izdelati tudi kot deloma prozorne (npr. OLED-okna), vse to pa ponuja veliko svobode tudi oblikovalcem in arhitektom [21].

Ker notranje učinkovitosti sodobnih OLED, osnovanih na fosforescenci [22] in toplotno aktivirani zakasnitveni fluorescenci (angl. thermally activated delayed fluorescence, TADF [23]), že dosegajo 100 %, glavni omejitveni faktor ostaja nizka stopnja izstopa svetlobe iz strukture v zrak. Za enostavne naprave ta znaša le od 20 do 30 %. Izstop svetlobe omejujejo trije glavni dejavniki. Prva dva sta povezana s popolnim notranjim odbojem, ki se zgodi pri prehodu svetlobe iz materiala z višjim v material z nižjim lomnim količnikom. V OLED se to zgodi na meji med tankoplastno organsko strukturo ( $n \sim 1,7-1,8$ ) in steklenim substratom ( $n \sim 1,5$ ) – ta odboj prispeva k t. i. valovodnim izgubam – ter na meji med steklenim substratom ( $n \sim 1,5$ ) in zrakom ( $n = 1$ ) – ta odboj pa prispeva k t. i. izgubam substrata. V zadnjih letih je bilo veliko napredka pri izboljšanju izstopa svetlobe iz OLED [24], vendar še vedno obstaja veliko prostora za izboljšave; ena izmed takšnih bo raziskana tudi v tem prispevku. Tretji glavni dejavnik optičnih izgub pa so izgube na kovinskih kontaktih, kjer se svetloba lahko spaja s površinskimi plazmonskimi polaritoni (angl. surface plasmon polaritons, SPP). Manjše optične izgube

povzročajo še parazitne absorpcije in odboji znotraj OLED-strukture [25].

Tako kot pri sončnih celicah je tudi pri OLED-zgradba osnovana na kombinaciji optično tankih in debelih plasti. Primer strukture rdeče OLED z oznakami in debelinami posameznih plasti je predstavljen na sliki 5. Svetloba se generira v tanki emisijski plasti (angl. emission layer, EML) s sevalnimi rekombinacijami elektronov in vrzeli. Za zagotavljanje dovolj velikega števila obojih so dodane (opcijske) transportne plasti tako za elektrone (angl. electron transport layer, ETL) kot tudi za vrzeli (angl. hole transport layer, HTL). Dodane so še (opcijske) blokirne plasti za elektrone in vrzeli (angl. electron/hole blocking layer, EBL in HBL), ki zadržujejo nosilce naboja v emisijski plasti in tako povečujejo možnost sevalnih rekombinacij. Kontakti so zagotovljeni preko svetlobno neprepustne, močno odbojne srebrne (Ag) katode in zelo tanke, ter zatorej svetlobno prepustne srebrne anode. Pogosto se za anodo uporablja tudi svetlobno prepusten z indijem dopiran kositrov oksid (ITO). Anodo dopolnjujeta še tanki plasti zlata (Au) in molibdenovega oksida ( $\text{MoO}_3$ ), ki zagotavljata enakomerno, homogeno porazdelitev tanke plasti srebra. Dodatna ločitvena plast je dodana za boljši oprijem organskih plasti na steklu. Celotna tankoplastna struktura je položena na steklen substrat in zaščitena z enkapsulacijo. Primer izdelave OLED z vsemi podrobnosti o uporabljenih materialih in postopkih je predstavljen v [11].

Dodatno je na strani substrata, kjer ni organskih plasti, lahko dodana še tanka površinsko teksturirana folija na osnovi polidimetilsiloksana (PDMS). Takšne folije s teksturami v mikrometrskem velikostnem razredu so se z optičnega stališča izkazale kot zelo učinkovite v primeru sončnih celic (gl. prejšnje poglavje), zdaj pa bomo njihov potencial za izboljšanje izstopa svetlobe raziskali še v primeru OLED-struktur.



Slika 5: Shematski prerez OLED-strukture z označenimi plastmi in pripadajočimi debelinami. Prva podana debelina je optimalna za OLED brez teksture in druga za OLED s teksturo. Debeline plasti niso risane v pravem razmerju. Uporabljena tetraedrična tekstura je prikazana na sliki 1.

V sklopu tega prispevka se primarno osredotočimo na zmanjšanje izgub zaradi odboja na meji med substratom in zrakom (izgube substrata). Za ta namen bomo pozneje na meji uporabili površinsko teksturirano folijo PDMS, ki lahko bistveno poveča možnost izstopa svetlobe v zrak zaradi zmanjšane učinka odboja pri velikih vpadnih kotih (predvsem nad kritičnim). Vendar pa za končno optimizacijo, torej pri iskanju visoke *EQE*, zgolj apliciranje teksturirane folije ni dovolj; na izstop svetlobe namreč vpliva še mnogo drugih dejavnikov, ki so med seboj prepleteni in se med optimizacijo strukture lahko tudi spreminjajo.

Na izstop svetlobe iz OLED-strukture vplivajo predvsem lastnosti materialov in druge omejitve, na katere nimamo neposrednega vpliva. Optične lastnosti materialov ter pomen optično tankih in debelih plasti smo že opisali v prejšnjih poglavjih. Sledi anizotropni koeficient  $a$ , ki podaja orientacijo sevalnih dipolov in vpliva tako na razmerje med TE- in TM-komponento sevale svetlobe kot tudi na notranjo kotno porazdelitev njene intenzitete. Za primer obravnavane OLED je eksperimentalno izmerjen  $a = 0,24$  [26] in med optimizacijo ostaja konstanten. Nadalje na *EQE* vpliva električna učinkovitost  $\gamma$ , ki je odvisna predvsem od lastnosti emisijskega materiala ter električnih lastnosti tankoplastne strukture. Ker so električne in optične lastnosti tankih plasti močno prepletene, pa moramo pri optični optimizaciji strukture upoštevati določene omejitve. V našem primeru OLED obravnavamo z idealnimi električnimi lastnostmi,  $\gamma = 1$ . Ker so debeline plasti EML, HBL in EBL že optimizirane za doseg maksimalnega števila sevalnih rekombinacij v EML, jih v nadaljevanju ne smemo več spreminjati. Tudi debeline Ag-anode ne moremo poljubno spreminjati, saj smo omejeni z minimalno debelino 4 nm, ki še zagotavlja dobre kontaktne lastnosti. Lahko pa z minimalnim vplivom na električne lastnosti skoraj poljubno spreminjamo debeline plasti ETL in HTL, kar nam daje veliko svobode pri optimizaciji optične mikrovotline in s tem povezanih interferenčnih učinkov. Dodaten parameter, ki je odvisen od uporabljenega emisijskega materiala, je tudi lastna sevalna učinkovitost, ki za dano OLED znaša  $\eta_{rad} = 0,7$ . Od nje je preko enačbe (4) odvisna efektivna sevalna učinkovitost  $\eta_{rad,e}^*$ , ki pa je močno odvisna tudi od optične votline, ki jo lahko deloma uravnavamo s spreminjanjem debelin tankih plasti.

Bistveno največ pa lahko na izstop svetlobe iz OLED-strukture vplivamo s spreminjanjem debelin posameznih plasti v tankoplastni strukturi (z upoštevanjem zgoraj omenjenih omejitev), saj s tem vplivamo na med seboj tesno prepletene pojave, kot so učinek konstruktivne oz. destruktivne interference, spajanje s SPP, spreminjanje optične mikrovotline, spreminjanje kotne porazdelitve intenzitete svetlobe itd.

S spreminjanjem debeline ETL in/ali HTL lahko pomaknemo emisijo stran od kovinskih kontaktov, s čimer zmanjšamo spajanje svetlobe s SPP, vendar

obenem razširimo organski valovod, s čimer povečamo izgube valovoda [25]. Z nastavljanjem debeline anode (primarno Ag) spreminjamo t. i. moč mikrovotline; debelejša ko je Ag-anoda, učinkoviteje odbija svetlobo, kar rezultira v močnejšem votlinskem učinku. To lahko s pravilno optimizacijo vodi v bolj usmerjeno svetlobo, v manjše kote, pod katerimi svetloba lažje izstopa iz strukture, hkrati pa močna votlina (velik  $F$ ) izboljša tudi  $\eta_{rad,e}^*$ , kar pomeni manjše sevalne izgube. Po drugi strani pa se z večanjem debeline Ag-anode stopnjujejo optične izgube zaradi parazitne absorpcije v kovinski elektrodi.

Poleg zgoraj opisanega spreminjanja posameznih plasti pa moramo obenem s kombinacijo vseh debelin tankih plasti hkrati ustvariti ugodne pogoje za kar največji izstop svetlobe v valovnem območju emisije s pomočjo konstruktivne interference. Ker so vsi omenjeni pojavi (moč votline, interferenca, parazitna absorpcija, vpliv teksture) močno prepleteni in soodvisni, pa mora biti optimizacija izvedena kot celota in kot kompromis med vsemi lastnostmi za optimalen izstop svetlobe.

#### 4.1 Optimizacija debelin plasti

Optimizacijo tankih plasti za največji izstop svetlobe smo izvedli za primer treh različnih konfiguracij OLED-struktur. Prva je struktura s povsem gladkimi plastmi brez tekstur, ki je služila kot referenca za nadaljnje izboljšave; označili smo jo kot struktura OLED A. Druga konfiguracija – OLED B – je prav tako brez tekstur, vendar pa smo debeline tankih plasti v njenem primeru optimizirali za največji možni izstop svetlobe v substrat (ampak ne nujno v zrak). To smo izvedli s pomočjo dodatne simulacije s poenostavljeno strukturo, v kateri smo upoštevali neskončno plast stekla na sprednji strani. Na koncu pa smo izvedli optimizacijo debelin še za celotno strukturo z dodatno teksturirano plastjo PDMS na sprednji strani; to strukturo smo označili kot OLED C.

Optimalne debeline omenjenih treh struktur so bile določene z uporabo sklopljenega optičnega modela, implementiranega v optičnem simulatorju CROWM, in s pomočjo optimizacijskega algoritma, ki je poiskal največjo *EQE* za posamezno strukturo. Optimalne debeline za vse tri primere so podane v tabeli 1.

Tabela 1: Optimalne debeline plasti različnih struktur OLED. S krepkim tiskom so označene plasti, ki so bile optimizirane.

	<b>OLED A</b>	<b>OLED B</b>	<b>OLED C</b>
substrat	1.1 mm	1.1 mm	1.1 mm
<b>ločitvena plast</b>	<b>36 nm</b>	<b>63 nm</b>	<b>10 nm</b>
<b>MoO<sub>3</sub></b>	<b>54 nm</b>	<b>1 nm</b>	<b>1 nm</b>
<b>Au</b>	<b>1 nm</b>	<b>1 nm</b>	<b>1 nm</b>
<b>Ag-anoda</b>	<b>17 nm</b>	<b>7 nm</b>	<b>4 nm</b>
<b>HTL</b>	<b>41 nm</b>	<b>42 nm</b>	<b>33 nm</b>
EBL	10 nm	10 nm	10 nm
EML	20 nm	20 nm	20 nm
HBL	10 nm	10 nm	10 nm
<b>ETL</b>	<b>61 nm</b>	<b>83 nm</b>	<b>88 nm</b>
Ag-katoda	100 nm	100 nm	100 nm



Rezultate optimizacije debelin plasti iz tabele 1 bomo v nadaljevanju analizirali skupaj z analizo optičnih razmer v vsaki izmed OLED-struktur A, B in C. Pri tem se bomo osredotočili predvsem na valovno odvisno karakteristiko izstopa svetlobe ( $\gamma \eta_{rad,e}^*(\lambda) \eta_{out}(\lambda)$ ), ki bo za vsak simulirani primer prikazana na sliki 6, ter na relativno porazdelitev generirane svetlobne moči med uporabno (izsevano v zrak) in izgubljeno (zaradi različnih izgubnih mehanizmov), kar bo za vsak primer prikazano na sliki 7.

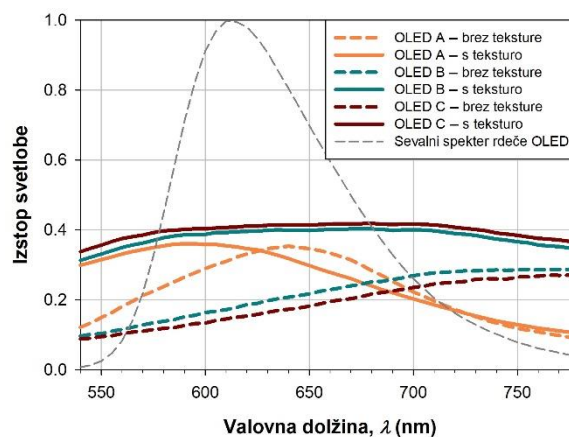
Z optimizacijo tankih plasti pri OLED A (brez dodatnih tekstur) že takoj dosežemo visoko  $EQE = 29,2\%$ . V optimizirani strukturi najprej opazimo dokaj debelo Ag-anodo (17 nm), kar nakazuje na relativno visoko odbojnost in zaradi tega močan učinek optične votline. To potrjujeta tudi izračunani Purcellov faktor z največjimi vrednostmi  $F > 2,4$ . Dodatno lahko iz rezultatov na sliki 6 opazimo močno valovno odvisnost izstopa svetlobe, ki je pogojena z debelinami vseh tankih plasti in je največja pri valovni dolžini okrog 640 nm, nato pa strmo pada proti daljšim in krajšim valovnim dolžinam.

Močan votlinski učinek ima pri tej strukturi dve glavni posledici, ki vplivata na visoko  $EQE$ . Prva je prednostna usmerjenost svetlobe v majhne kote, zaradi česar lahko večina svetlobe izstopi v zrak in je samo manjši del izgubljen zaradi popolnega notranjega odboja. To se na sliki 7 deloma kaže tudi v majhnem deležu izgub v substratu (~8 %). Poleg tega pa se zaradi visoke vrednosti Purcellovega faktorja poveča efektivna sevalna učinkovitost  $\eta_{rad,e}^*$  oziroma se zmanjšajo neoptične izgube ( $1 - \eta_{rad,e}^*$ ). Te znašajo le ~17 %, medtem ko bi v primeru  $F = 1$ , torej brez učinka optične votline, znašale 30 %.

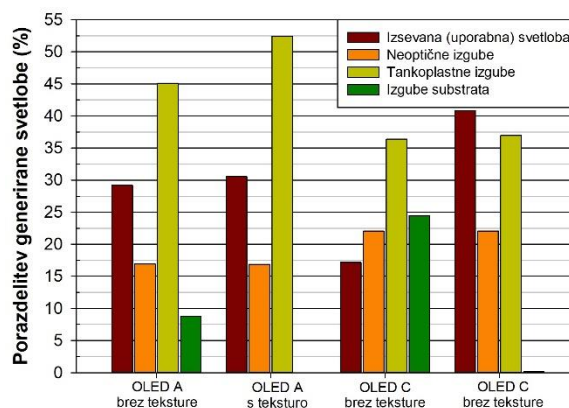
Zdaj pa analizirajmo še primer, ko bi strukturi OLED A na sprednji strani dodali površinsko teksturirano plast PDMS, s katero želimo spremeniti odbojne lastnosti na meji med substratom in zrakom ter tem izboljšati učinkovitost izstopa svetlobe. Simulacije v tem primeru pokažejo le majhno izboljšanje;  $EQE$  naraste z 29,2 % na 30,5 %. Rezultati na sliki 7 kažejo, da so neoptične izgube enake kot za strukturo brez teksture, saj zunanja tekstura ni v stiku z organskimi plastmi in ne vpliva na električne izgube. Hkrati tudi ne vpliva na optično votlino, saj je plast PDMS na drugi strani optično debelega substrata, zato tudi  $\eta_{rad,e}^*$  ostane enaka. Izgube v substratu pa se zmanjšajo skoraj na nič, kar kaže na učinkovitost teksture pri izstopu svetlobe. Razlog za le minimalno povečanje  $EQE$  je dejstvo, da je struktura optimizirana za situacijo z gladkimi mejami med plastmi, brez tekstur. Optimalni parametri zagotavljajo, da je svetloba v tem primeru izsevana v majhne kote, ki ji omogočajo izstop iz strukture, vendar s tem že v izhodišču omejimo skupno količino svetlobe, ki vstopa v substrat.

Naslednji korak v optimizaciji izstopa svetlobe je bila optimizacija tankih plasti tako, da čim več svetlobe prehaja v substrat, od koder bi nato s pomočjo teksture

lahko izstopila v okoliški zrak. To optimizacijo smo izvedli s pomočjo strukture OLED B. Če na strukturo dodamo še teksturirano plast PDMS, dobimo mnogo večjo  $EQE = 39,2\%$ . Vendar pa rezultat v tem primeru ni povsem realen, saj smo pri optimizaciji strukture OLED B zanemarili povratne odboje od meje med substratom in zrakom nazaj v notranjost strukture.



Slika 6: Izstop svetlobe ( $\gamma \eta_{rad,e}^*(\lambda) \eta_{out}(\lambda)$ ) v odvisnosti od valovne dolžine za tri primere OLED-strukture (A, B in C). Dodan je sevni spekter rdeče OLED.



Slika 7: Porazdelitev generirane svetlobne moči na izsevano (uporabno), neoptične izgube ( $1 - \eta_{rad,e}^*$ ), izgube v tankih plasteh (parazitna absorpcija v organskih plasteh in kontaktih) ter izgube substrata. Rezultati so prikazani za OLED-strukture A in C brez teksturirane plasti in z dodano teksturirano plastjo PDMS.

Zato smo izvedli še optimizacijo celotne strukture s teksturirano plastjo PDMS – OLED C. Najprej analiziramo optične razmere v strukturi brez teksture s povsem gladkimi mejami med plastmi. Tukaj dosežemo zelo majhno  $EQE = 17,1\%$ , ki je precej manjša od strukture OLED A. Eden izmed razlogov za majhno  $EQE$  se vidi v povečanih izgubah v substratu; zdaj sicer mnogo več svetlobe vstopi v substrat, vendar pod velikimi koti, kjer se svetloba popolnoma notranje odbije in ostane ujeta v substratu. Učinek močne optične votline, ki je v primeru OLED A preferiral usmerjeno emisijo v majhne

kote, je zdaj nadvladan z minimizacijo parazitne absorpcije, kar se kaže pri optimalni debelini Ag-anode, ki doseže svoj minimum – 4 nm. Zaradi majhne debeline se tudi zmanjša učinek optične votline ( $F < 1.8$ ), kar vpliva še na  $\eta_{rad,e}^*$  in posledično na večje neoptične izgube ( $> 22\%$ ). Ne nazadnje pa se manjši vpliv optične votline kaže tudi v manj izraziti valovni odvisnosti izstopa svetlobe, ki je prikazan na sliki 6; ta pojav je še zlasti izrazit pri strukturah OLED B in C z dodatno teksturirano plastjo PDMS, kjer lahko opazimo široko valovno območje z visokim deležem izsevane svetlobe.

Ko strukturi OLED C dodamo še teksturirano plast PDMS, opazimo velik porast  $EQE$  na kar 40,8 % in padec izgub v substratu skoraj na nič. Večina svetlobe, ki je bila prej ujeta zaradi popolnega notranjega odboja na meji med steklom in zrakom, zdaj zaradi dodane teksture na površini plasti PDMS lahko izstopa v zrak. Neoptične izgube ostanejo enake, saj dodana tekstura ne vpliva na optično votlino oz. preostale električne lastnosti OLED, medtem ko se kot primarni vir izgub ( $> 35\%$ ) zdaj kažejo organske in kontaktne plasti. Poudariti je treba še to, da smo, čeprav imamo pri strukturi C v substratu na voljo manj svetlobe za izstop v zrak (50,01 % generirane svetlobe doseže substrat) kot v strukturi B (51,1 %), dobili višjo  $EQE$ , saj je optimizacija tankih plasti upoštevala tudi vpliv povratnih odbojev od teksture nazaj v notranjost strukture. Izvedli smo torej globalno optimizacijo celotnega sistema, tako tankoplastnega dela kot tudi dela s substratom in površinsko teksturirano plastjo PDMS.

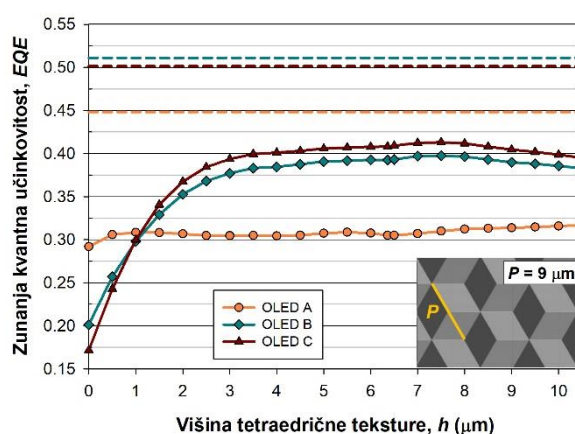
#### 4.2 Optimizacija teksture

Do zdaj smo v optimizacijo vključili profil teksturirane površine plasti PDMS, ki temelji na regularni tetraedrični teksturi, v kateri stranice druga z drugo oklepajo pravi kot. Vendar pa se poraja vprašanje, ali lahko še povečamo učinkovitost izstopa svetlobe z optimizacijo same teksture. S pomočjo simulacij tokrat raziščemo razmerje med višino  $h$  in periodo  $P$  teksture za vse tri različne strukture OLED A, B in C. Za namen optimizacije profila teksture smo ponovno uporabili optične simulacije, osnovane na metodi sklopljenega modeliranja.

Podobno kot pri sončnih celicah v poglavju 3.2 smo izvedli serijo simulacij, v katerih smo postopoma spreminjali geometrijsko razmerje med višino in periodo teksture, realizirane na površini plasti PDMS. Perioda  $P$  heksagonalne teksture, ki je označena v spodnjem desnem kotu slike 8, je bila postavljena na 9  $\mu\text{m}$ , medtem ko smo celotno medvršno višino teksture  $h$  spreminjali med 0 in 10,5  $\mu\text{m}$  v korakih po 0,5  $\mu\text{m}$ .

Rezultati so predstavljeni na sliki 8. Za primer strukture OLED A oblika teksture le minimalno vpliva na  $EQE$ ; rezultat še enkrat jasno kaže, da brez optimizacije tankih plasti tudi pozitivnih lastnosti teksturirane plasti ne moremo učinkovito izrabiti. Rezultati za strukturi OLED B in C pa po drugi strani kažejo zelo hiter vzpon

$EQE$  z višanjem razmerja  $h/P$ , ki pri višini okrog 3  $\mu\text{m}$  doseže nasičenje, v katerem so nadaljnje spremembe dokaj majhne. To se sklada s teorijo, da za izstop svetlobe iz substrata ni toliko pomembna oblika teksture, ampak predvsem zmožnost zagotavljanja zadostne preusmeritve žarkov, ki jim bo nato sčasoma uspelo zapustiti substrat [27]. Vseeno med rezultati lahko poiščemo optimum; za primer končne strukture OLED C je razvidno, da največjo  $EQE = 41,3\%$  dosežemo pri višini teksture  $h = 7,5\ \mu\text{m}$  (geometrijsko razmerje  $h/P = 0,83$ ). Ta vrednost  $EQE$  je ena izmed višjih vrednosti za rdečo OLED z zunanjo teksturo, presega pa tudi  $EQE$ , doseženo z uporabo heksagonalnih parabolčnih tekstur [11, 28]. Rezultati torej potrjujejo, da imajo tetraedrične teksture izjemen potencial za izboljšanje optičnih razmer, ne le v sončnih celicah, temveč tudi v sodobnih OLED.



Slika 8: Zunanja kvantna učinkovitost za različne konfiguracije OLED-struktur (A, B in C) v odvisnosti od višine tetraedrične teksture. S prekinjenimi črtami so dodane še največje mogoče učinkovitosti pri upoštevanju 100 % izstopa svetlobe iz substrata v zrak, ki hkrati določajo tudi limito  $EQE$  vrednosti posamezne strukture (brez dodatnih ukrepov).

## 5 ZAKLJUČEK

V tem delu smo s pomočjo sklopljenega optičnega modeliranja s simulatorjem CROWM analizirali optične razmere v visokoučinkovitih heterospojnih sončnih celicah in organskih svetlečih diodah. Posvetili smo se predvsem analizi optičnih izgub in izboljšavam, ki jih lahko dosežemo z uporabo površinsko teksturirane plasti PDMS na sprednji strani strukture, katere geometrijski profil smo tudi optimizirali.

Rezultati kažejo, da v heterospojnih sončnih celicah, realiziranih na teksturiranih rezinah kristalnega silicija, z enkapsulacijo izgubimo 1,40 mA/cm<sup>2</sup> (– 3,6 %) kratkostičnega toka. Pri uporabi dodatne plasti PDMS z optimalno tetraedrično teksturo pa lahko kratkostični tok povečamo za 1,64 mA/cm<sup>2</sup> (+ 4,4 %) in s tem izničimo negativni vpliv enkapsulacije. Glavni vir optičnih izgub ostaja predvsem parazitna absorpcija v neaktivnih plasteh strukture, ki v ekvivalentu kratkostičnega toka znaša 4,98 mA/cm<sup>2</sup>.

Uporaba dodatne plasti PDMS s tetraedrično teksturo se je izkazala kot zelo učinkovita tudi pri zagotavljanju izstopa svetlobe iz rdečih organskih svetlečih diod. Rezultati simulacij kažejo, da z optimalno teksturo v optimizirani strukturi dosežemo zunanjo kvantno učinkovitost 41,3 %, kar je relativno za dobrih 41 % več kot v primeru optimizirane strukture brez plasti PDMS. Analiza izgub pa medtem kaže, da se največji delež svetlobe (> 35 %) izgublja v organskih in kontaktnih plasteh, kar nakazuje potrebo po nadaljnji optimizaciji v smeri zmanjšanja izgub tankoplastne strukture in hkrati odpira še veliko prostora za nadaljnje izboljšave OLED.

## LITERATURA

- [1] M. Topič, M. Sever, B. Lipovšek, A. Čampa, J. Krč, "Approaches and challenges in optical modelling and simulation of thin-film solar cells," *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 135, str. 57–66, 2015.
- [2] B. Lipovšek, J. Krč, M. Topič, "Optical model for thin-film photovoltaic devices with large surface textures at the front side," *Informacije MIDEM - Journal of Microelectronics, Electronic Components and Materials*, 41(4), str. 264–271, 2011.
- [3] R. Santbergen, T. Meguro, T. Suezaki, G. Koizumi, K. Yamamoto, M. Zeman, "GenPro4 optical model for solar cell simulation and its application to multijunction solar cells," *IEEE Journal of Photovoltaics*, 7(3), str. 919–926, 2017.
- [4] N. Tucher, J. Eisenlohr, H. T. Gebrewold, P. Kiefel, O. Höhn, H. Hauser, J. C. Goldschmidt, B. Bläsi, "Optical simulation of photovoltaic modules with multiple textured interfaces using the matrix-based formalism OPTOS," *Optics Express*, 24(14), str. A1083–1093, 2016.
- [5] M. Kovačič, P.-A. Will, B. Lipovšek, J. Krč, S. Lenk, S. Reineke, M. Topič, "Combined optical model for micro-structured organic light emitting diodes," *Informacije MIDEM - Journal of Microelectronics, Electronic Components and Materials*, 46(4), str. 267–275, 2017.
- [6] B. Lipovšek, A. Čampa, F. Guo, C. J. Brabec, K. Forberich, J. Krč, M. Topič, "Detailed optical modelling and light-management of thin-film organic solar cells with consideration of small-area effects," *Optics Express*, 25(4), str. A176–A190, 2017.
- [7] C. Ulbrich, A. Gerber, K. Hermans, A. Lambert, U. Rau, "Analysis of short circuit current gains by an anti-reflective textured cover on silicon thin film solar cells," *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 21, str. 1672–1681, 2013.
- [8] J. D. Myers, W. Cao, V. Cassidy, S.-H. Eom, R. Zhou, L. Yang, W. You, J. Xue, "A universal optical approach to enhancing efficiency of organic-based photovoltaic devices," *Energy & Environmental Science*, 5(5), str. 6900–6904, 2012.
- [9] S. Esiner, T. Bus, M. M. Wienk, K. Hermans, and R. A. J. Janssen, "Quantification and validation of the efficiency enhancement reached by application of a retroreflective light trapping texture on a polymer solar cell," *Advanced Energy Materials*, 3(8), str. 1013–1017, 2013.
- [10] B. Lipovšek, J. Krč, and M. Topič, "Microtextured light-management foils and their optimization for planar organic and perovskite solar cells," *IEEE Journal of Photovoltaics*, 8(3), str. 783–792, 2018.
- [11] M. Kovačič, P. A. Will, B. Lipovšek, M. Topič, S. Lenk, S. Reineke, J. Krč, "Coupled optical modeling for optimization of organic light-emitting diodes with external outcoupling structures," *ACS Photonics*, 5(2), str. 422–430, 2018.
- [12] Ž. Lokar, B. Lipovšek, A. Razzaq, V. Depauw, I. Gordon, J. Poortmans, J. Krč, M. Topič, "Coupled modelling approach for optimization of bifacial silicon heterojunction solar cells with multi-scale interface textures," *Optics Express*, 27(20), str. A1554–A1568, 2019.
- [13] H. G. Tompkins, W. A. McGahan, *Spectroscopic Ellipsometry and Reflectometry*, John Wiley & Sons, 1999.
- [14] A. Čampa, "NIKA - model for extracting refractive indices," *48th International Conference on Microelectronics, Devices and Materials, Otočec, Slovenia*, 2012.
- [15] A. Buckley, *Organic Light-Emitting Diodes (OLEDs)*, Woodhead Publishing, 2013.
- [16] Luminosity functions, <http://www.cvrl.org/lumindex.htm> (11.9.2020).
- [17] K. Yoshikawa, H. Kawasaki, W. Yoshida, T. Irie, K. Konishi, K. Nakano, T. Uto, D. Adachi, M. Kanematsu, H. Uzu, K. Yamamoto, "Silicon heterojunction solar cell with interdigitated back contacts for a photoconversion efficiency over 26%," *Nature Energy*, 2(5), str. 1–8, 2017.
- [18] S. DeWolf, A. Descoedres, Z. Holman, C. Ballif, "High-efficiency silicon heterojunction solar cells: A review," *Green*, 2(1), str. 7–24, 2012.
- [19] M. Jošt *et al.*, "Efficient light management by textured nanoimprinted layers for perovskite solar cells," *ACS Photonics*, 4(5), str. 1232–1239, 2017.
- [20] J.-S. Lin, W.-P. Chu, F.-S. Juang, N.-P. Chen, Y.-S. Tsai, C.-C. Chen, C.-M. Chen, L.-C. Liu, "Manufacture of light-trapping (LT) films by ultraviolet (UV) irradiation and their applications for polymer solar cells (PSCs)," *Materials Letters*, 67(1), str. 42–45, 2012.
- [21] S. Reineke, "Complementary LED technologies," *Nature Materials*, 14(5), 2015.
- [22] L. Xiao, S.-J. Su, Y. Agata, H. Lan, J. Kido, "Nearly 100% Internal Quantum Efficiency in an Organic Blue-Light Electrophosphorescent Device Using a Weak Electron Transporting Material with a Wide Energy Gap," *Advanced Materials*, 21(12), str. 1271–1274, 2009.
- [23] F. B. Dias, K. N. Bourdakos, V. Jankus, K. C. Moss, K. T. Kamtekar, V. Bhalla, J. Santos, M. R. Bryce, A. P. Monkman, "Triplet Harvesting with 100% Efficiency by Way of Thermally Activated Delayed Fluorescence in Charge Transfer OLED Emitters," *Advanced Materials*, 25(27), str. 3707–3714, 2013.
- [24] A. Salehi, X. Fu, D.-H. Shin, F. So, "Recent Advances in OLED Optical Design," *Advanced Functional Materials*, 29(15), str. 1808803, 2019.
- [25] R. Meerheim, M. Furno, S. Hofmann, B. Lüssem, K. Leo, "Quantification of energy loss mechanisms in organic light-emitting diodes," *Applied Physics Letters*, 97(25), str. 253305, 2010.
- [26] T. D. Schmidt, D. S. Setz, M. Flämmich, J. Frischeisen, D. Michaelis, B. C. Krummacker, N. Danz, W. Brütting, "Evidence for non-isotropic emitter orientation in a red phosphorescent organic light-emitting diode and its implications for determining the emitter's radiative quantum efficiency," *Applied Physics Letters*, 99(16), str. 163302, 2011.
- [27] H. Greiner, "Light Extraction from Organic Light Emitting Diode Substrates: Simulation and Experiment," *Japanese Journal of Applied Physics*, 46(7R), str. 4125, 2007.
- [28] M. Kovačič, P.-A. Will, B. Lipovšek, M. Topič, S. Lenk, S. Reineke, J. Krč, "Improved light outcoupling of organic light-emitting diodes by combined optimization of thin layers and external textures," *Organic Electronics and Photonics: Fundamentals and Devices*, 10687, str. 106870Z, 2018.

**Milan Kovačič** je leta 2012 diplomiral, leta 2017 pa doktoriral na Fakulteti za elektrotehniko v Ljubljani. Zaposlen je kot raziskovalec na Fakulteti za elektrotehniko Univerze v Ljubljani. Njegova raziskovalna zanimanja vključujejo različne optoelektronske naprave, s posebnim poudarkom na optičnih simulacijah veliko-površinskih optičnih naprav, kot so sončne celice in organske svetleče diode – OLED.

**Marko Jošt** je leta 2013 diplomiral na Fakulteti za elektrotehniko v Ljubljani, doktoriral pa leta 2017 na Fakulteti za elektrotehniko v Ljubljani in Tehnični univerzi v Berlinu z dvojnimi doktoratom. Izobraževanje je nadaljeval kot podoktorski raziskovalec na inštitutu Helmholtz-Zentrum Berlin v Berlinu v Nemčiji. Trenutno je zaposlen kot asistent na Fakulteti za elektrotehniko v Ljubljani. Njegovo raziskovalno področje je fotovoltaika, predvsem perovskitne sončne celice in upravljanje svetlobe v tandemskih sončnih celicah.

**Matevž Bokalič** je leta 2008 diplomiral na Fakulteti za elektrotehniko v Ljubljani, kjer je leta 2013 tudi doktoriral in nadaljeval izobraževanje na dvoletnem podoktorskem študiju. V letih 2012 in 2014 je raziskovalno gostoval na univerzi Colorado State University v ZDA in inštitutu Forschungszentrum Jülich v Nemčiji. Trenutno je kot znanstveni sodelavec zaposlen na Fakulteti za elektrotehniko v Ljubljani, kjer raziskuje degradacijo fotonapetostnih elementov s prostorskimi karakterizacijskimi metodami.

**Benjamin Lipovšek** je leta 2007 diplomiral na Fakulteti za elektrotehniko Univerze v Ljubljani, kjer je leta 2012 tudi doktoriral. Zaposlen je kot asistent na Fakulteti za elektrotehniko Univerze v Ljubljani. Njegovo raziskovalno delo je osredotočeno na napredne pristope modeliranja visokoučinkovitih sončnih celic in drugih optoelektronskih gradnikov.