

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE



UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMARI DE TIZI-OUZOU  
FACULTE DES SCIENCES  
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



LABORATOIRE DE PHYSIQUE ET CHIMIE QUANTIQUE

## MEMOIRE DE MASTER

Filière : Physique  
Option : Nanophysique

Présenté par :  
**Moussa BOULAHIA**

Thème

*Etude de l'effet de nanostructures diélectriques sur les propriétés électriques et optiques d'une OLED.*

Devant le jury d'examen composé de :

M.D	MITICHE	Professeur	U.M.M.T.O.	Président
O	LAMROUS	Professeur	U.M.M.T.O.	Examineur
M	DJOUDER	MCA	U.M.M.T.O.	Encadreur

# Remerciements

Ce travail a été effectué au sein du Laboratoire physique et chimie Quantique (LPCQ) de l'Université Mouloud MAMMARI de Tizi-Ouzou. Je Tiens à remercier le Directeur Monsieur A. MEZEAGHRANE et l'ex Directeur Monsieur H. BOUZAR pour leur accueil chaleureux.

Mes remerciements, avant tout, à DIEU tout puissant pour la volonté, la santé et la patience qu'il m'a données durant toutes ces longues années d'étude afin que je puisse arriver à ce stade.

Mes sincères remerciements s'adressent aux membres du jury Pr M.D. Mitiche et Pr. O. Lamrous qui ont accepté d'examiner ce travail.

Mon encadreur, Monsieur DJOUDER Madjid, MCA à l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou (UMMTO) à qui j'adresse mes sincères remerciements pour m'avoir proposé ce sujet de mémoire de master, qu'il trouve ici ma profonde reconnaissance pour sa gentillesse, sa bienveillance, sa patience et pour la confiance qu'il m'a accordée durant ce stage.

Je tiens à remercier tout particulièrement à Mademoiselle HARCHAOUI Nadra, MCA à l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou (UMMTO), pour ses encouragements et ses précieux conseils.

Je remercie toute l'équipe des doctorants du LPCQ de l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou pour la sympathie et la gentillesse dont ils ont fait preuve à mon égard.

Enfin, je tiens à exprimer une pensée profonde à l'égard de ma famille, et plus particulièrement de mes parents. Qu'ils trouvent, dans ce travail une preuve de la reconnaissance que je leur porte, eux à qui je dois tant.

## *Dédicaces*

*A ma mère, femme de vertu, épouse modèle et mère parfaite,*

*A mon père, homme de raison et père endurent,*

*A mes frères et sœurs dont l'amour guide mes pas*

*A toute ma famille socle inébranlable de tout mon être et de mon existence*

*A mes amis, harmonie de ma vie*

## Résumé

L'OLED est une diode électroluminescente constituée d'un empilement de couches semi-conductrice organiques. C'est une technologie qui gagne de plus en plus de parts du marché de l'affichage et de l'éclairage. L'incorporation de nanoparticules dans les couches de l'OLED a pour intérêt l'augmentation de l'efficacité énergétique et aussi le contrôle de la directivité du rayonnement émis. Le travail présenté ici est l'étude de l'effet de ces nanostructures sur les caractéristiques électriques de l'OLED, telles que la caractéristique  $U(I)$  et la luminance.

## Abstract

OLED is a light-emitting diode based on a stack of organic semiconductor layers. It is a technology that is gaining an increasing share of the electronic display and lighting market. The incorporation of nanoparticles in the OLED layers is of great interest, especially in terms of increasing the energy efficiency and controlling the properties of the emitted radiation. The work presented here is the study of the effect of these nanostructures on the electrical characteristics of the OLED, such as the  $U(I)$  characteristic and the luminance.

# Table des matières

<b>Table des matières</b>	<b>4</b>
<b>Table des figures</b>	<b>6</b>
<b>Liste des tableaux</b>	<b>8</b>
<b>Introduction générale</b>	<b>8</b>
<b>1 Généralité sur les OLEDs</b>	<b>11</b>
1.1 Introduction . . . . .	11
1.2 C'est quoi une OLED? . . . . .	11
1.3 Les matériaux organiques semi-conducteurs . . . . .	12
1.4 Structure électronique des molécules organiques semi-conductrices . . . . .	13
1.5 Les niveaux d'énergies . . . . .	14
1.6 Le polaron . . . . .	15
1.7 L'exciton . . . . .	15
1.8 Les états singulets / triplets . . . . .	16
1.9 Structuration de l'OLED . . . . .	19
<b>2 Etude du transport et de la diffusion des charges</b>	<b>20</b>
2.1 Introduction . . . . .	20
2.2 Modèle de transport de charge dans les OLED . . . . .	20
2.2.1 Équation de Poisson . . . . .	21
2.2.2 Équations de dérive-diffusion de la densité de courant . . . . .	21
2.2.3 Injection des charges . . . . .	23

2.2.4	Modèle de la mobilité . . . . .	24
2.3	Diffusion des excitons . . . . .	25
2.4	COMSOL Multi-physics . . . . .	26
2.5	Processus de programmation . . . . .	26
<b>3</b>	<b>Etude de l'effet des nanostructures diélectriques sur les propriétés élec-</b>	
	<b>triques et optique d'une OLED</b>	<b>29</b>
3.1	Introduction . . . . .	29
3.2	Propriété des matériaux utilisé(NPB,Alq3) . . . . .	29
3.3	Structure de l'OLED modélisée . . . . .	31
3.4	Structuration de l'OLED modélisée sans et avec nano-structure . . . . .	32
3.5	Etude de l'OLED sans nano-structures . . . . .	32
3.5.1	Propriétés électriques : . . . . .	32
3.6	Propriétés optiques . . . . .	35
3.7	Etude de l'OLED avec nano-structures . . . . .	37
3.7.1	Propriétés électriques . . . . .	37
3.7.2	Propriétés optiques . . . . .	40
3.8	Randment Luminance en fonction de la puissance . . . . .	42
	<b>Conclusion générale</b>	<b>43</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>46</b>

## Table des figures

1.1	Forme scellât des molécules organiques [6] . . . . .	13
1.2	(a) Hybridation sp 2 et principe de la double liaisons, dont le diagramme énergétique est donné en (b) . . . . .	14
1.3	Schéma des bandes HOMO et LUMO. . . . .	14
1.4	(a)déformation locale d'une molécule (polaron),(b) Représentation de l'état d'un polaron négatif et positif. . . . .	15
1.5	Différents types d'excitons. . . . .	16
1.6	Les différentes configurations de spins possibles pour les électrons et les trous (a) et leur combinaison possible(b) . . . . .	16
1.7	Représentation des quatre états que peuvent prendre les excitons. . . . .	17
1.8	Diagramme de Jablonski avec les niveaux d'énergie excités singulets (S) et triplets (T) . . . . .	18
1.9	Principe de fonctionnement d'une OLED . . . . .	19
2.1	Les niveaux d'energie de l'assemblage (NPB/Alq <sub>3</sub> ) . . . . .	24
2.2	Transport par saut . . . . .	25
2.3	Interface du logiciel Comsol . . . . .	27
2.4	Géométrie (a) et le maillage dans l'OLED modélisé (b) . . . . .	28
3.1	(a) Molecul NPB ,(b) Empilement moléculaire d'NPB dans la maille élémentaire	30
3.2	(a) Molécule Alq <sub>3</sub> , (b) Empilement moléculaire d'Alq <sub>3</sub> dans la maille élémentaire.	30
3.3	Représentation schématique des OLED modélisées . . . . .	32
3.4	Visualisation de densité des charges dans l'OLED a 2D, (a) pour les électrons, (b) pour les trous. . . . .	33

3.5	Distribution spatiale de la densité des électrons et des trous calculée avec différentes tensions appliquées . . . . .	33
3.6	Variation du potentiel et le champ électrique en fonction de la position Y . . . .	34
3.7	Variation de la densité de courant fonction du temps . . . . .	34
3.8	Caractéristique densité de courant-tension de l’OLED . . . . .	35
3.9	Création des excitons dans l’OLED . . . . .	36
3.10	Luminance en fonction du temps . . . . .	36
3.11	Luminance en fonction de la tension appliquée . . . . .	37
3.12	Densité des charges dans l’OLED avec des bâtonnets (en haut) et des sphères (en bas), (a)et(c) pour les électrons,(b)et(d) pour les trous. Pour pouvoir visualiser les deux couches nous avons utilisé deux échelles logarithmique différentes. . . .	38
3.13	Coupe du potentiel et du champ électriques pour $V_a=9V$ . A :Sans nanostructures,B : Bâtonnets, C : Sphères . . . . .	39
3.14	Densité des exciton dans l’OLED avec bâtonnets, à gauche, et des sphères à droite ( $V_a=9V$ ). En bas, coupe transversale passant par le centre des bâtonnets.	39
3.15	Densité de courant sans et avec nano bâtonnets en fonction de temps à $V_a=9V$ .	40
3.16	Densité de courant en fonction du $V_a$ appliqué. A : Sans nanostructures, B : Bâtonnets, C : Sphères . . . . .	41
3.17	Luminance en fonction de $V_a$ (en unité arbitraire). A : Sans nanostructures, B : Bâtonnets, C : Sphères . . . . .	41
3.18	Taux de perte de la luminance en présence de nano bâtonnets. . . . .	42
3.19	la luminance en fonction de puissance électrique . . . . .	42

3.20 le rendement de puissance . . . . .	43
--	----

## Liste des tableaux

3.1 la mobilité des porteurs dépendant du champ, les constantes diélectriques relatives, et HOMO et LUMO [14]. . . . .	31
3.2 Structure OLED . . . . .	31

# Introduction générale

L'électroluminescence des molécules organiques est un phénomène connu depuis les années 1960. En 1987, des chercheurs ont démontré la faisabilité (économiquement viable) d'un dispositif OLED à haut rendement pour des applications pratiques. L'efficacité des OLED a augmenté d'environ 20 fois depuis cette date, approchant ainsi la limite théorique de l'efficacité quantique interne. Les OLED sont actuellement très utilisées : téléphones mobiles, téléviseurs, . . . un des problèmes qui se pose avec les OLED est que la majeure partie de la luminescence est piégée à l'intérieur des multicouches, on estime que le rendement externe n'est en fait que de 20% . Dans un travail précédent de l'équipe, il a été observé une augmentation significative de la luminescence émise vers l'extérieur en incorporant des nanoparticules d'argent ou diélectriques. Cependant, une question est restée ouverte : Quel est l'effet de ces nanoparticules sur les propriétés électriques de l'OLED (courant, luminance, . . .) ? Est-ce que le gain en luminescence n'est pas perdu par une dégradation des propriétés électriques ? C'est dans cette perspective que se place le travail que nous présentons ici.

Nous avons simulé trois OLED à deux couches dans un modèle à deux dimensions :

- OLED de référence NPB/Alq3
- OLED NPB/Alq3 avec des nano bâtonnets diélectriques,
- OLED NPB/Alq3 avec des nano sphères diélectriques.

On applique une tension de polarisation de 1V à 9V et on suit numériquement l'évolution des densités des électrons, des trous et des excitons. pour se faire ,nous a vous utilisé Le logiciel COMSOL Multiphysics qui utilise la discrétisation des équation de transport par la méthode des éléments finis.

Notre manuscrit est structuré de la façon suivante :

Dans le premier chapitre, nous donnons un aperçu sur les semi-conducteurs organiques, ainsi que les diodes électroluminescentes organiques.

Le deuxième chapitre est consacré aux rappels des équations de transport de charge. On y décrit l'un des modèles de mobilité les plus utilisés.

Dans le dernier chapitre, nous présentons nos résultats de simulation qui portent sur l'étude des effets des nanoparticules sur la densité de courant et la luminance, en fonction de la tension de polarisation. Ce manuscrit se termine par une conclusion générale.

# Chapitre 1

## Généralité sur les OLEDs

### 1.1 Introduction

Une diode électroluminescente organique est un dispositif opto-électronique fait à base de matériaux semi-conducteurs organiques. Depuis sa découverte, les OLED sont passées d'une simple curiosité scientifique à une technologie exploitée dans plusieurs applications dans le domaine de l'affichage et de l'éclairage. Dans ce chapitre, on s'intéresse au caractère semi-conducteur des matériaux organiques, les mécanismes de transport de charge et les processus de production du rayonnement lumineux.

### 1.2 C'est quoi une OLED ?

La diode organique électroluminescente, en anglais « Organic Light-Emitting Diode », est formée d'une ou plusieurs couches actives de matériaux composées essentiellement de petites molécules organiques. Elle a été réalisée pour la première fois en 1987 par les chercheurs C.W. Tang et S.A. Van Slyke de la compagnie Eastman Kodak [1]

Les OLED sont des hétérostructures organiques réalisées par empilement de matériaux semi-conducteurs organiques électroluminescents [2]. Ces matériaux organiques sont luminescents et semi-conducteurs. S'ils sont traversés par un courant électrique, ils émettent un rayonnement électromagnétique, généralement dans le domaine du visible. La longueur d'onde émise

dépend de la composition du matériau. Il existe actuellement un grand nombre de matériaux synthétisés afin de balayer un large spectre lumineux.

### 1.3 Les matériaux organiques semi-conducteurs

C'est des matériaux à base de carbone, d'oxygène, d'hydrogène, d'azote et de soufre, qui ont des propriétés similaires à un semi-conducteur habituel (Si, Ge, . . .), notamment l'existence de bandes de valence et de conduction séparées par un gap (entre 1.5 et 3 eV). Cependant, la mobilité ( $\mu$ ) des porteurs de charges, c'est-à-dire la facilité avec laquelle les électrons et les trous traversent un matériau, est très inférieure à celles des matériaux SC inorganiques [3]

Ces dernières années ont été marquées par l'amélioration continue des performances des matériaux organiques avec notamment la synthèse de matériaux différents comprenant de petites molécules, des polymères ou des mélanges de polymères entre eux ou avec des colorants [4].

On distingue deux types de composés semi-conducteurs organiques :

- les matériaux a petites molécules permettent de réaliser des films électroluminescents par évaporation sous vide,
- les polymères qui sont mis en œuvre à partir de solution (spin-coating, . . .).

Le procédé de dépôt est choisi selon la nature du matériau. Le spin-coating est utilisé pour les grandes molécules organiques par contre l'évaporation thermique est privilégiée pour les petites molécules [5].

La fabrication des OLED à base des petites molécules est plus onéreux mais plus performant car il permet le dépôt de couches successives avec une précision nanométrique. Sur la figure 1.1, on donne des exemples des molécules organiques qui sont utilisées dans les OLED.

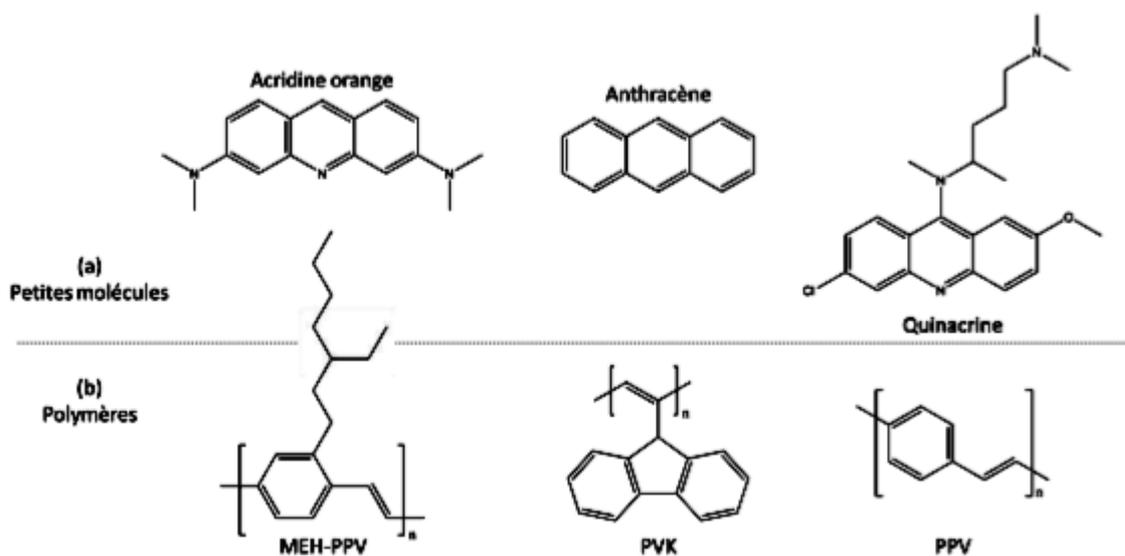


Figure 1.1: Forme scellât des molécules organiques [6]

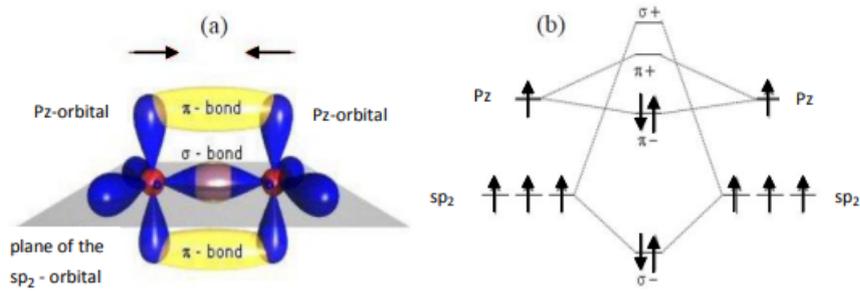
## 1.4 Structure électronique des molécules organiques semi-conductrices

Dans ces matériaux organiques on s'intéresse à deux types de liaisons différentes, l'une désignée par  $\sigma$  et l'autre  $\pi$  (voir figure 1.2).

**Liaison  $\sigma$  :** c'est la combinaison des orbitales atomiques hybrides  $SP^2$ , c'est une liaison forte entre deux atomes de carbone, l'orbitale ( $\sigma$ ) est d'énergie inférieure de  $E$  au plus bas des niveaux atomiques  $H_{11}$ . L'orbitale anti-liante ( $\sigma^*$ ) est d'énergie supérieure de  $E^*$  au plus haut niveau atomique  $H_{22}$ . Le caractère anti-liant de ( $\sigma^*$ ) est plus marqué que le caractère liant de ( $\sigma$ ).

**Liaison  $\pi$  :** c'est la combinaison des orbitales atomiques  $2P_z$ . On distingue les orbitales moléculaires ( $\pi$ ) correspondant à l'orbitale liante occupée et les orbitales moléculaires ( $\pi^*$ ) correspondant à l'orbitale anti-liante non occupée. Le recouvrement ( $\sigma$ ) étant plus grand que le recouvrement ( $\pi$ ), il donne lieu à une liaison ( $\sigma$ ) plus forte que la liaison ( $\pi$ ).

Les matériaux offrant un système d'orbitale ( $\pi$ ) délocalisé sont constitués d'un ensemble alterné de liaisons simples et doubles, ce sont des matériaux conjugués.



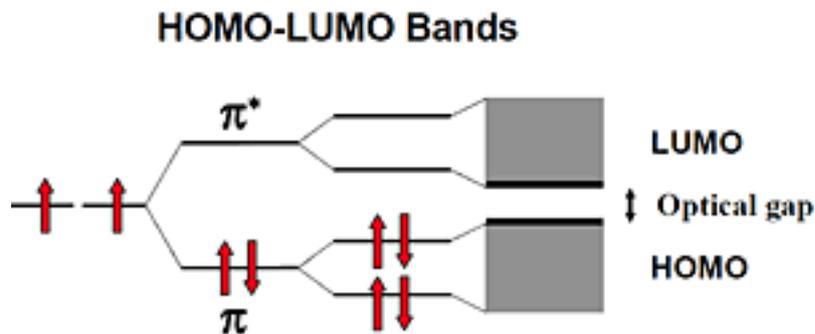
**Figure 1.2:** (a) Hybridation  $sp_2$  et principe de la double liaisons, dont le diagramme énergétique est donné en (b)

## 1.5 Les niveaux d'énergies

L'association d'un grand nombre de molécules organiques donne naissance aux deux niveaux d'énergie les plus importants :

- Le niveau haut de la bande de valence qui est l'orbitale occupée de plus grande énergie, notée HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital).
- Le niveau bas de la bande de conduction qui est le niveau de l'orbitale inoccupée de plus basse énergie, notée LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital).

L'écart entre ces deux niveaux définit le gap qui est typiquement située entre 1.5eV et 3eV dans les SC électroluminescents (voir figure 1.3)

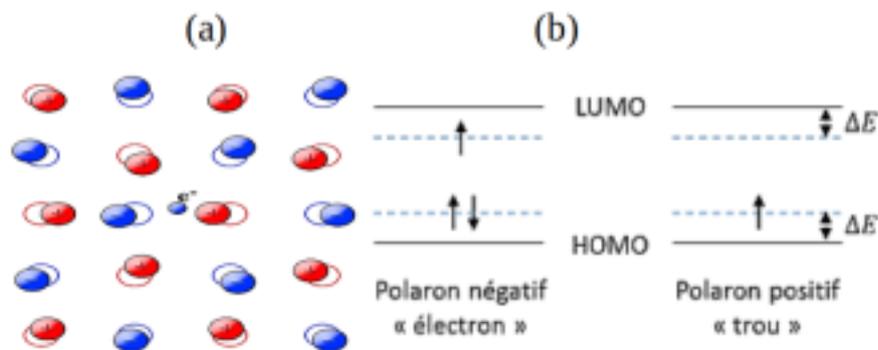


**Figure 1.3:** Schéma des bandes HOMO et LUMO.

## 1.6 Le polaron

C'est une quasi-particule associée à une déformation locale dans une molécule  $\pi$ -conjuguée qui induit une polarisation de son entourage (figure 1.4a).

On parle de polaron positif (trou) si un électron est retiré et d'un polaron négatif (électron) si un électron est injecté dans la molécule. Les niveaux d'énergie sont légèrement décalés par rapport aux niveaux HOMO ou LUMO de la molécule. Ce décalage est noté  $\Delta E$  sur la figure (1.4b) [3] [6]



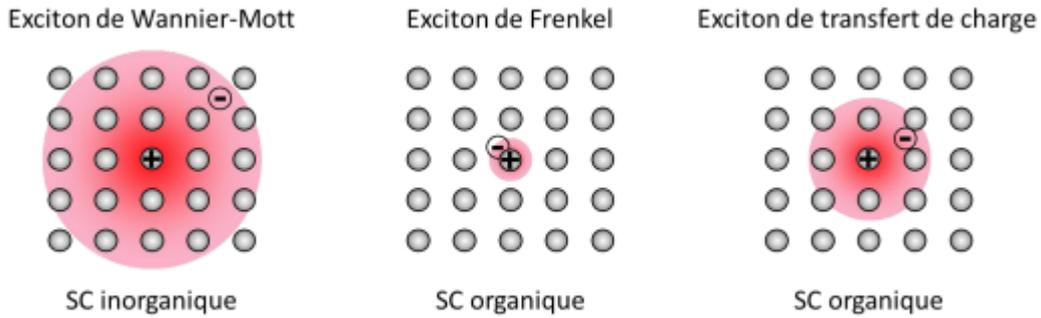
**Figure 1.4:** (a) déformation locale d'une molécule (polaron), (b) Représentation de l'état d'un polaron négatif et positif.

## 1.7 L'exciton

L'association d'un polaron positif et d'un autre négatif est appelée paire électron-trou, ou encore exciton. C'est la formation d'excitons et leur désexcitation qui permet l'émission de lumière lors de l'électroluminescence. Selon la nature du matériau, il existe trois sortes d'excitons (Figure 1.5) :

- l'exciton dit de « Wannier-Mott » concerne les matériaux inorganiques et s'étend sur un rayon voisin de 10nm,
- l'exciton dit de « Frenkel », plus petit, qui s'étend sur un rayon de l'ordre du nanomètre. Il intervient dans les matériaux à faible constante diélectrique, comme c'est le cas des SC organiques [6]

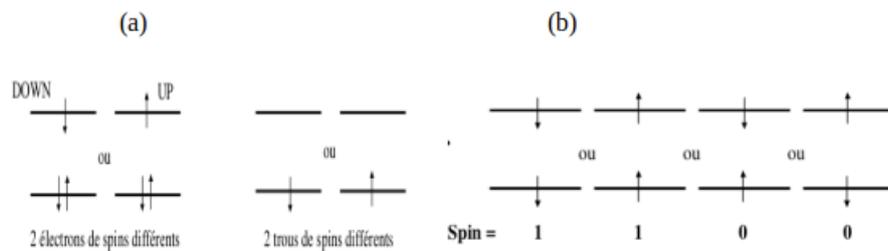
• Il existe un cas intermédiaire, appelé exciton à transfert de charges [3], où les charges sont situées sur des molécules voisines possédant des groupements donneurs et accepteurs. Ce type d'exciton a pu être observé, par exemple, à l'interface de deux matériaux organiques différents [3]



**Figure 1.5:** Différents types d'excitons.

## 1.8 Les états singulets / triplets

Il est très important de comprendre la formation des excitons puisqu'elle détermine l'état à partir duquel les électrons se désexcitent (état singulet ou état triplet). Les électrons et les trous, ou plus exactement, les polarons négatifs et positifs, peuvent prendre deux valeurs de spin : Up ou Down.



**Figure 1.6:** Les différentes configurations de spins possibles pour les électrons et les trous (a) et leur combinaison possible (b)

Si on considère le nombre quantique de spin total ( $s$ ) de l'exciton on trouve deux possibilités :

$s=0 \rightarrow$  État singulet.

$s=1 \rightarrow$  État triplet.

La distribution des polarons étant aléatoire, quel est la répartition entre les excitons singulets et triplets ?

Les principes d'indiscernabilité des fermions et de symétrisations de Pauli montrent que la répartition est de 25% / 75%. En effet, il y a quatre combinaisons de spins possibles pour les deux électrons 1 et 2 (figure 1.6) :  $\uparrow 1 \uparrow 2$ ,  $\uparrow 1 \downarrow 2$ ,  $\downarrow 1 \uparrow 2$  et  $\downarrow 1 \downarrow 2$ . Mais le problème se pose pour le cas  $\uparrow 1 \downarrow 2$  et le cas  $\downarrow 1 \uparrow 2$  qui ne correspondent ni à une partie de spin symétrique (car les spins sont différents), ni à une partie de spin antisymétrique car 1 et 2 sont indiscernables. Il y a donc des états qui sont une combinaison linéaire de ces deux états :

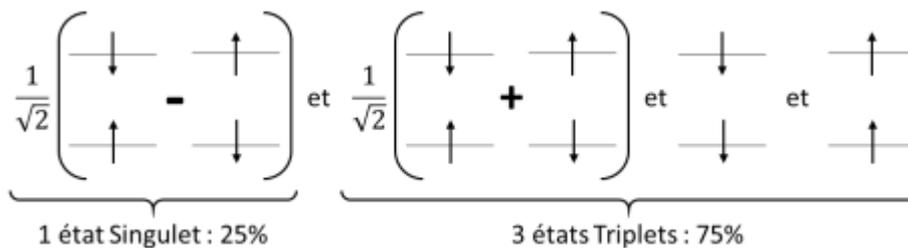
$$\sigma^- = 1/\sqrt{2}(\uparrow 1 \downarrow 2 - \downarrow 1 \uparrow 2) \rightarrow \text{Antisymétrique}$$

$$\sigma^+ = 1/\sqrt{2}(\uparrow 1 \downarrow 2 + \downarrow 1 \uparrow 2) \rightarrow \text{Symétrique}$$

On aboutit ainsi à l'existence de quatre états différents possibles associés à une même partie spatiale pour une molécule dont les propriétés sont fixées par deux électrons :

$$\begin{aligned} \text{Singulets} \implies 2S + 1 = 1 & \left\{ \psi_{\text{singule}}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) = \psi_{\text{sym}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) * \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow 1 \downarrow 2 - \downarrow 1 \uparrow 2) \right. \\ \text{Triplets} \implies 2S + 1 = 3 & \left\{ \begin{aligned} \psi_{\text{triplet}}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) &= \psi_{\text{antisym}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) * \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow 1 \downarrow 2 + \downarrow 1 \uparrow 2) \\ \psi_{\text{triplet}}(\vec{q}_1 \vec{q}_2) &= \psi_{\text{antisym}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) * (\uparrow 1 \uparrow 2) \\ \psi_{\text{triplet}}(\vec{q}_1 \vec{q}_2) &= \psi_{\text{antisym}}(\vec{r}_1 \vec{r}_2) * (\downarrow 1 \downarrow 2) \end{aligned} \right. \end{aligned}$$

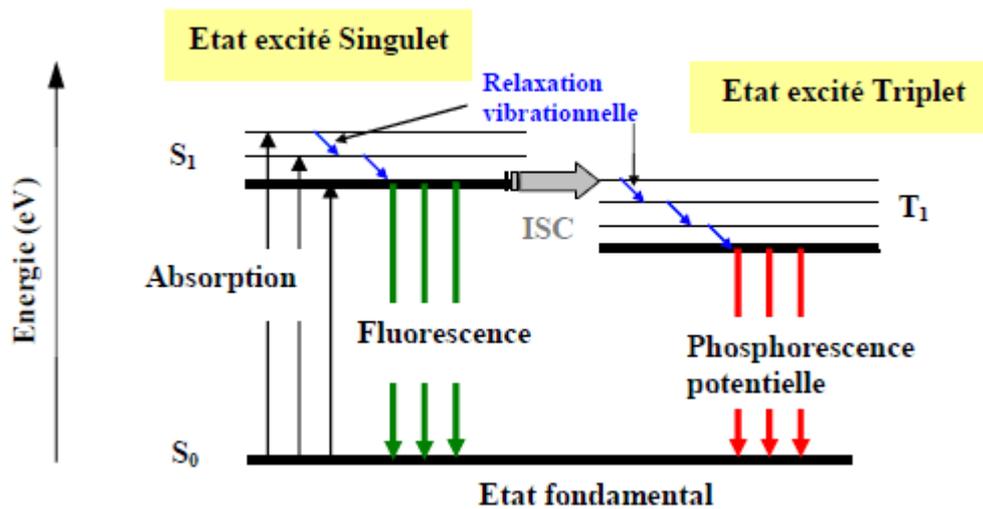
On obtient alors 4 états excités possibles de la molécule. Si les spins des polarons négatifs et des polarons positifs sont aléatoires, on aboutit donc à la fraction des (singulets / triplets) de 1/4 (voir figure 1.7).



**Figure 1.7:** Représentation des quatre états que peuvent prendre les excitons.

L'énergie de l'état triplet sera toujours inférieure à celle de l'état singulet, et les états triplets sont plus stables que les états singlets. Ce pendant, il est à noter que si cela est vrai dans la plupart des cas, certaines études montrent qu'il est possible d'avoir l'état triplet d'énergie plus haute que l'état singulet [3].

Les différents processus physico-chimiques simplifiés intervenant dans les molécules sont résumés dans le diagramme de Jablonski ci-dessous (figure1.8).



**Figure 1.8:** Diagramme de Jablonski avec les niveaux d'énergie excités singulets (S) et triplets (T)

Le retour permis S<sub>1</sub>→S<sub>0</sub> sans changement de spin s'accompagne d'émission de lumière : c'est la fluorescence. Ce pendant, la désexcitation radiative de l'exciton vers l'état fondamental ne peut se faire qu'à partir des états singulets (figure1.8).

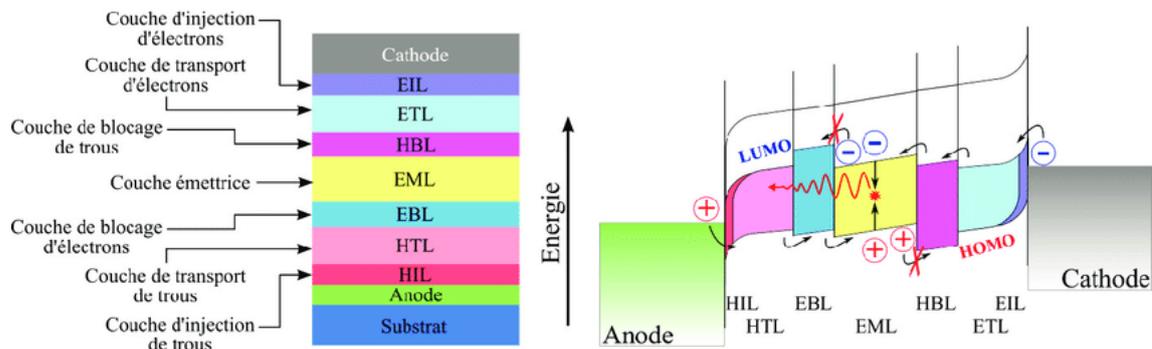
Le retour T<sub>1</sub>→S<sub>0</sub> est une transition interdite dans un matériau fluorescent car elle nécessiterait un changement de spin, les triplets se désexcitent alors sous forme de vibrations (pertes par échauffement). Il existe cependant d'autres voie possible de désexcitation que nous n'allons pas aborder ici [6].

Ce rapport entre le nombre d'états singulets et le nombre d'états triplets formés oriente le choix d'un matériau émissif plutôt qu'un autre. En effet, dans un matériau fluorescent, au maximum 25% d'excitons singulets peuvent être créés, ce qui limite à 25% le rendement quantique.

## 1.9 Structuration de l'OLED

En pratique l'OLED est un empilement de couches minces faites de différents matériaux qui possèdent des propriétés optiques et électriques bien précises pour accomplir une des fonctions suivantes (figure1.9) :

- l'injection des charges ;
- le transport ;
- la recombinaison et l'émission de lumière



**Figure 1.9:** Principe de fonctionnement d'une OLED

# Chapitre 2

## Etude du transport et de la diffusion des charges

### 2.1 Introduction

Afin d'optimiser les propriétés électriques des OLED, on peut commencer par l'étude du transport des charges, les électrons et les trous, à travers les différentes couches, la formation des excitons et la luminescence. Pour simuler ce transport, il existe principalement deux méthodes : la première est basée sur des algorithmes de types Monté-Carlo, la seconde sur un traitement en continuum basé sur les équations de dérive-diffusion. Nous avons opté pour la seconde méthode dans le but d'étudier l'effet des nanostructures dans la couche émettrice sur les propriétés électriques de l'OLED. Nous allons commencer par la présentation du modèle complet, en incluant les différents processus que l'on peut trouver notamment aux interfaces. Ces processus restent cependant relativement méconnus et font encore l'objet de recherches. Pour la partie numérique, nous avons utilisé Comsol Multiphysics qui est un logiciel commercial.

### 2.2 Modèle de transport de charge dans les OLED

Le transport des charges est pris en compte en se basant sur un modèle de dérive-diffusion (drift-diffusion). Ce modèle de simulation du transport des charges est largement utilisé dans

la microélectronique classique. Son application aux semi-conducteurs organiques constitue une approximation car la démonstration classique repose sur l'existence d'états délocalisés et de structure de bande. Cependant, cette méthode a donné lieu à des résultats satisfaisants dans le cadre de simulation d'OLED. Les particularités du transport de charges dans les semi-conducteurs organiques sont prises en compte dans les expressions des mobilités des porteurs et dans les courants d'injections aux interfaces organique/métal. Ces modèles seront introduits dans la suite. Le modèle de transport des porteurs de charge dans les OLED se compose de l'équation de Poisson et des équations de dérive-diffusion des densités de courant [7]

### 2.2.1 Équation de Poisson

Les vitesses des charges sont relativement faibles, on peut se placer donc dans une approximation quasistatique. On se limite alors à l'équation de Poisson qui lie les variations du potentiel électrostatique aux densités locales de charge :

$$\vec{\nabla} \cdot (\varepsilon \vec{\nabla} \psi) = -e(p - n)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$$

Le champ électrique est donné par la relation :  $\vec{E} = -\vec{\nabla}(\psi)$

$\varepsilon$  la permittivité électrique,  $n$  et  $p$  sont les densités numériques des électrons et des trous,  $\varepsilon_0$  la permittivité du vide et  $\varepsilon_r$  la permittivité relative du matériau SC.

Dans le cas général, il faut ajouter dans cette équation tous les états de charge notamment issus du dopage et des piègeages. Dans notre travail nous n'avons pas inclus les effets d'un éventuel dopage ou les densités de charge dues aux piègeages.

### 2.2.2 Équations de dérive-diffusion de la densité de courant

Les équations générales de dérive-diffusion dans les semi-conducteurs sont utilisées pour décrire le transport de charges à travers les multicouches dans l'OLED [8] [9]. Les équations

de continuité décrivent le taux de variation des densités  $n$  et  $p$  des porteurs (électron –trous) qui sont donnés respectivement par :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n - \gamma np$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p - \gamma np$$

Le second terme  $\gamma np$  est le taux de formation des combinaisons électron-trous où le facteur est donné par la formule de Langevin [10]

$$\gamma = \frac{e}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} (\mu_n + \mu_p)$$

$\mu_n, \mu_p$  sont les mobilités des électrons et des trous, respectivement  $\vec{J}_n, \vec{J}_p$  sont les densités de courant des électrons et des trous donnés par :

$$\vec{J}_n = e\mu_n n \vec{\nabla} \left( \frac{E_{LUMO}}{q} \right) - eD_n \vec{\nabla} n$$

et

$$\vec{J}_p = e\mu_p p \vec{\nabla} \left( \frac{E_{HOMO}}{q} \right) - eD_p \vec{\nabla} p$$

où  $E_{LUMO} = -(q\psi + \chi_c)$  et  $E_{HOMO} = -(q\psi + \chi_c + E_g)$  sont les niveaux d'énergie de l'orbitale moléculaire inoccupée la plus basse LUMO et de l'orbitale moléculaire occupée la plus haute HOMO,  $\chi_c$  et  $E_g$  sont l'affinité électronique et le gap du semi-conducteur organique respectivement.

$(D_n, D_p)$  sont les coefficients de diffusion des électrons et des trous donnés par la relation d'Einstein :

$$D_n = \mu_n \frac{k_B T}{q} \text{ et } D_p = \mu_p \frac{k_B T}{q}$$

où  $k_B$  est la constante de Boltzmann et  $T$  la température.

### 2.2.3 Injection des charges

Pour induire l'émission électroluminescente dans les OLED il est nécessaire d'injecter des charges électriques à partir des électrodes. Dans les semi-conducteurs inorganiques, les charges sont déjà présentes dans le matériau dopé. Dans les semi-conducteurs organiques, l'injection consiste à attirer les charges présentes dans les électrodes vers le matériau organique sous l'effet d'un champ électrique extérieur appliqué. Les charges sont soit des électrons (polarons négatifs) injectés depuis la cathode soit des trous (polarons positifs) injectés depuis l'anode. Dans chacun des cas, les charges doivent franchir une barrière d'énergie non négligeable formée par l'interface métal/organique (voir figure 2.1). Les modèles existants pour expliquer les phénomènes d'injection dans les organiques, sont tirés des phénomènes d'injection dans les inorganiques. Cependant, ceux-ci possèdent des limites de validité de sorte que pour l'instant, des recherches sont toujours en cours pour mieux comprendre l'injection. L'injection des porteurs de charges peut se décomposer en plusieurs courants dont les principaux sont dus à l'émission thermoïonique et à l'effet tunnel :

$$J_{nb} = eV_{rn}(n_b - n_{qe}) + J_{ntu}$$

où :

$J_{ntu}$  : est le courant dû à l'effet tunnel donné par l'équation de Fowler-Nordheim [11] :

$$J_{ntu} = \frac{e^3}{8\pi h \phi_{Bn}} E^2 \exp\left(\frac{-8\pi\sqrt{2m}\phi_{Bn}^3}{3qhE}\right)$$

$h$  : est la constante de Planck,  $E$  : est le champ électrique

$n_b$  : est la densité des électrons à l'interface

$\phi_{bn}$  : est la barrière de potentiel à l'interface qui dépend du champ électrique [?] donne par :

$$\phi_{bn} = \phi_{Bn} - \sqrt{\frac{eE}{4\pi\epsilon}}$$

avec  $\phi_{Bn}$  la barrière de potentiel à champs nul

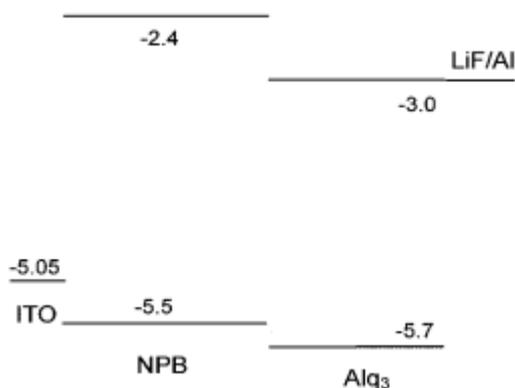
$V_{rn}$  : est le taux de recombinaison à l'interface donné par [13] :

$$V_{rn} = 16\pi\varepsilon(K_B T)^2 \frac{\mu_n}{e^3}$$

$\mu_n$  : la mobilité des électrons,  $\varepsilon$  : la permittivité électrique,  $K_B$  : la constant de Boltzmann

$n_{qe}$  : est la densité électronique de quasi équilibre à l'interface donnée par [14] :

$$n_{qe} = N_{LUMO} \exp\left(\frac{-e\phi_{bn}}{K_B T}\right)$$



**Figure 2.1:** Les niveaux d'énergie de l'assemblage (NPB/Alq<sub>3</sub>)

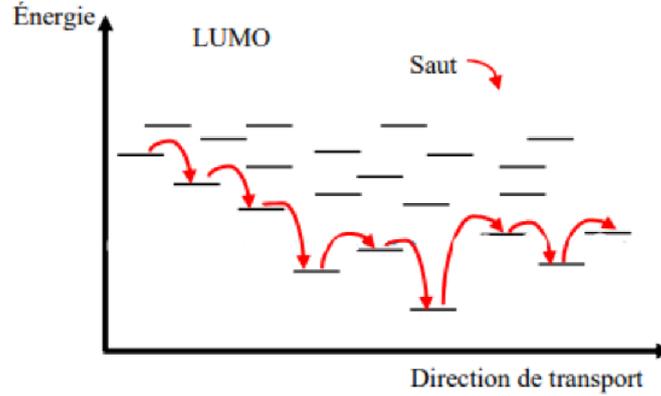
## 2.2.4 Modèle de la mobilité

Un semi-conducteur organique est composé d'un empilement de molécules avec des liaisons intra-moléculaires fortes et inter-moléculaires faibles avec une structure désordonnée (amorphe). Ainsi, le transport des électrons dans le volume doit obligatoirement s'effectuer par saut d'une molécule à une autre (figure 2.2) Si les électrons ne peuvent se déplacer que par sauts dans les petites molécules, le transport dans les polymères conjugués est une combinaison de mouvements le long des orbitales moléculaire délocalisées des chaines polymères et de sauts entre ces dernières. Ces sauts sont activés thermiquement (effet Schottky), mais peuvent aussi se réaliser par effet tunnel (Fowler-Nordheim) [15].

Cela induit que la mobilité des porteurs de charges, c'est-à-dire la propriété des électrons et des trous à traverser un matériau, est très inférieure à celles des matériaux semi-conducteurs inorganiques (  $10^{-2} - 10^{-6} \text{cm}^2/Vs$  pour les organiques contre  $10^3 \text{cm}^2/V$  pour le silicium). Il existe plusieurs modèles de mobilité, nous avons choisi celui dit de Poole-Frenkel qui est relativement simple et très utilisé :

$$\mu(E) = \mu_0 \exp(\alpha \sqrt{E})$$

où  $\mu_0$  est la mobilité à champ nul et  $\alpha$  traduit l'abaissement de la barrière de saut du porteur par le champ électrique  $E$ .



**Figure 2.2:** Transport par saut

## 2.3 Diffusion des excitons

Une fois que l'électron et le trou se combinent pour former un exciton, celui-ci diffuse et transfère de l'énergie. L'équation de diffusion régissant la densité des excitons singulets  $N_{ex}$  sur un espace continu est donnée par [6] [14] :

$$\frac{\partial N_{exc}}{\partial t} = \underbrace{G_h}_{1er} + \underbrace{D_{exc-h} \frac{\partial^2 N_{exc-h}}{\partial x^2}}_{2eme} - \underbrace{(k_{nr-h} + k_{r-h}) N_{exc-h}}_{3eme} - \underbrace{\frac{1}{2} \gamma_{ss-h} N_{exc-h}^2}_{4eme} - \underbrace{Q(x)_{nexc-h}}_{5eme}$$

avec

$N_{ex}$  : est le densité d'exciton singulet

$D_{ex}$  : est la constante de diffusion d'exciton déterminée expérimentalement

$G_h$  : est les taux de production des excitons singulets résultant de l'association électron-trous donne par :  $G_h = \frac{1}{4} \gamma np$  où  $\gamma$  le coefficient de combinaison des porteurs de charge vu plus haut.

$k_{nr}, k_r$  : sont les constantes de recombinaison non radiative et radiative de l'exciton

$\gamma_{ss}$  :est le taux d'annihilation singulet-singulet.

Le dernier terme c'est la perte par quenching qui représente l'annihilation des excitons à l'électrode avec un transfert d'énergie vers les atomes du métal. Le taux d'extinction  $Q(\vec{r})$  est donné par [14] :

$$Q(\vec{r}) = q_r m(\vec{r})$$

où  $q_r$  est une constante  $m(x)$  et représente la densité des atomes de métal à la position  $\vec{r}$  :

$$m(\vec{r}) = N_{electrode} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_p} \exp\left(-\frac{|\vec{r} - \vec{r}_{electrode}|}{2\sigma_p^2}\right)$$

où  $N_{electrode}$  est la densité des atomes de métal à l'électrode,  $\sigma_p$  représente un écart type en général dépendant du matériau de l'électrode et du procédé de dépôt et  $\vec{r}_{electrode}$  est la position de l'électrode.

## 2.4 COMSOL Multi-physics

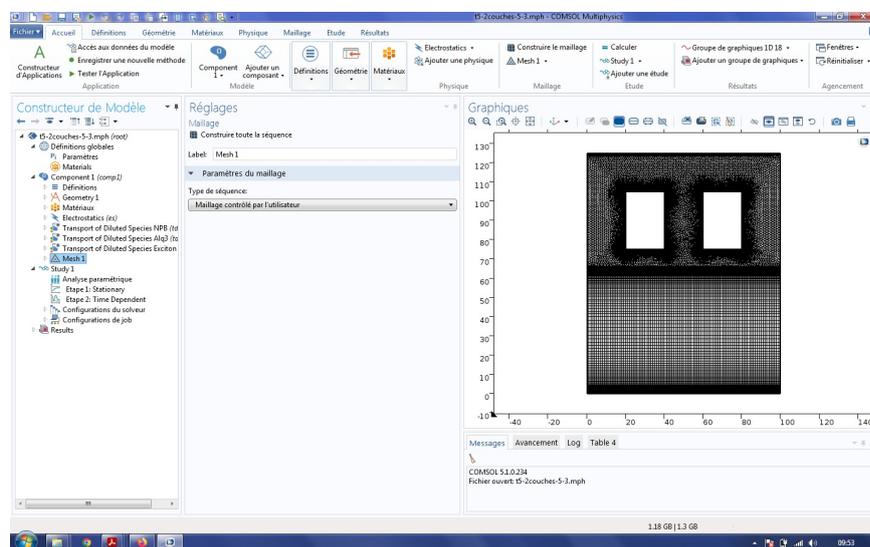
Est un logiciel créé en 1986 par des étudiants de Germund Dahlquist et la première version de COMSOL Multi-physics est sortie en 1998. est un logiciel de modélisation et de simulation numérique de problèmes physique et d'ingénierie basés sur la méthode des éléments finis. Ce logiciel autorise l'utilisateur à définir ses propres systèmes d'équations aux Dérivées Partielles (EDP). Son langage de programmation est une extension du langage MATLAB associé à une interface graphique. En physique on peut l'utiliser dans plusieurs domaines : électromagnétisme, physique des plasmas, mécanique des fluides, physique des semi-conducteurs ...etc. Dans notre étude nous avons utilisé la version 5.1.

## 2.5 Processus de programmation

Le processus de modélisation et de simulation numérique sous Comsol Multiphysics implique plusieurs étapes :

- La définition globale des paramètres et des variables liées au modèle.

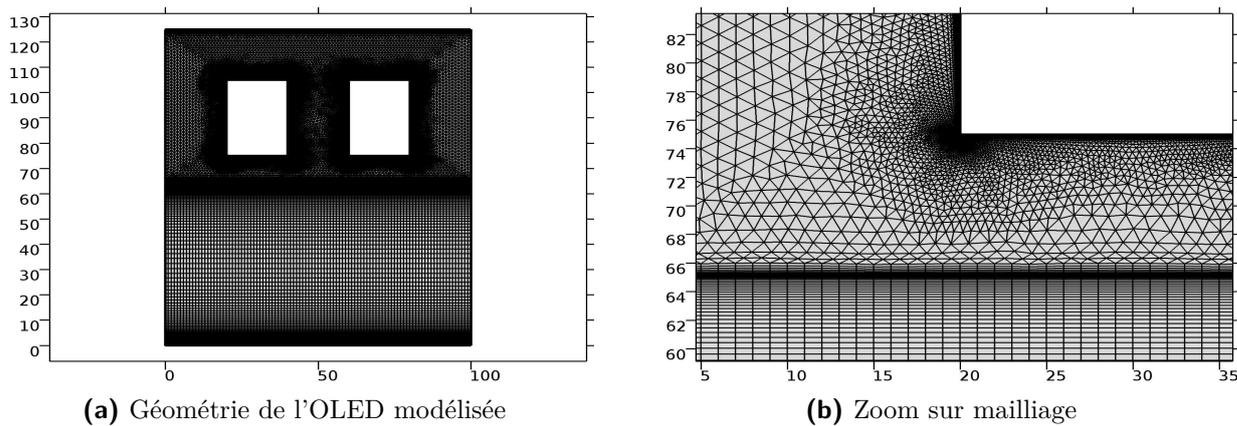
- La définition de sa géométrie.
- La prise en compte des différents phénomènes physiques qui peuvent exister dans le problème considéré.
- Introduire les propriétés physiques des matériaux utilisés.
- Choisir les conditions initiales et aux limites pour le problème étudié .
- Choisir la taille des éléments à utiliser pour le maillage ainsi que le type de maillage.
- Choisir l'algorithme d'inversion de matrice.
- Visualisation des résultats.



**Figure 2.3:** Interface du logiciel Comsol

### Les avantages :

- Résoudre des problèmes de simulation dans plusieurs domaines de la physique
- Facilité de programmation
- Étude en 1D ,2D, 2D symétrique et 3D
- Utilise une interface graphique très intuitive
- Facilite le calcul parallèle



**Figure 2.4:** Géométrie (a) et le maillage dans l'OLED modélisé (b)

**Les inconvénients :**

- Logiciel payant
- Besoin d'un ordinateur puissant et performant

# Chapitre 3

## Etude de l'effet des nanostructures diélectriques sur les propriétés électriques et optique d'une OLED

### 3.1 Introduction

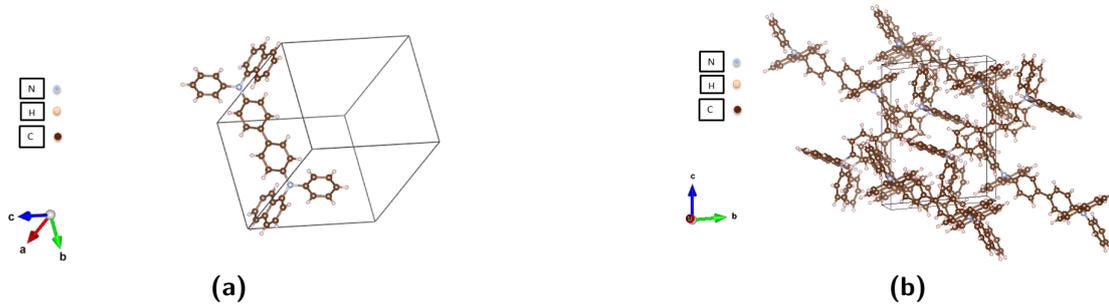
Pour étudié les effets des nanoparticules diélectriques dans la couche émettrice d'une OLED, sur ses propriétés électriques, nous avons utilisé le modèle de transport à plusieurs types de porteurs de charge. Nous avons défini une OLED de référence à deux couches. Nous avons placé ensuite des nanoparticules en forme de bâtonnets, puis en forme de sphères. Nous avons simulé ces trois OLED et avons comparé les différentes propriétés électriques et optiques.

### 3.2 Propriété des matériaux utilisé(NPB,Alq3)

- NPB ( $C_{44}H_{32}N_2$ )

NPB ( $C_{44}H_{32}N_2$ ) : La N, N'-Di (1-naphtyl)-N, N'-diphényl-(1,1'-biphényl)-4,4'-diamine, connue sous le nom de NPB ou NPD, a été utilisée de manière intensive dans les OLED et d'autres dispositifs électroniques organiques comme couche de transport de trous [16]. Sa structure est donnée sur la figure (3.a) et la représentation des molécules NPB dans la maille

élémentaire sur la figure (3.b).

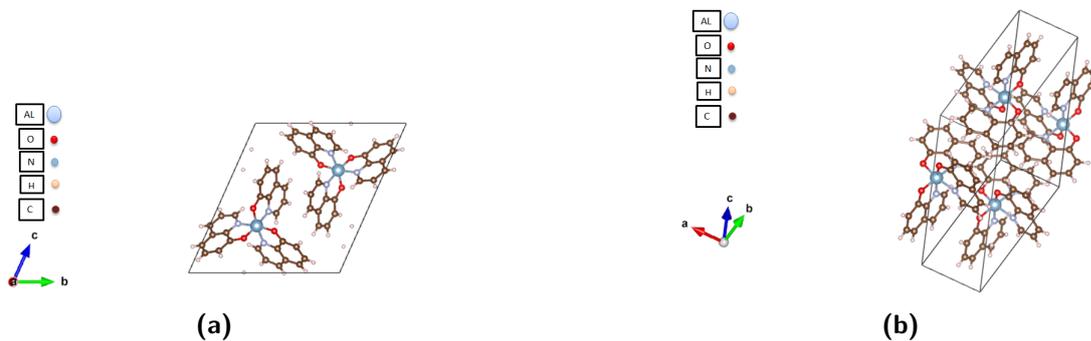


**Figure 3.1:** (a) Molecul NPB ,(b) Empilement moléculaire d'NPB dans la maille élémentaire

- Alq3 ( $C_{27}H_{18}AlN_3O_3$ )

Alq3 ( $C_{27}H_{18}AlN_3O_3$ ) : tris (8-hydroxyquinoléine) aluminium(III), communément appelé Alq3, est largement utilisé dans les OLED comme matériau de transport d'électrons (ETM) et matériau de couche émettrice (ELM) grâce à ses propriétés électroluminescentes découverts en 1987 [1]. Sa structure est donnée sur la figure (3.3) et la représentation des molécules Alq3 dans la maille élémentaire sur la figure (3.4).

En se basant sur le modèle de Poole-Frenkel, les mobilités des porteurs mineurs (NPB et Alq3) sont obtenues par ajustement des résultats des données expérimentales. Le tableau (1) liste la mobilité des porteurs dépendant du champ, les constantes diélectriques relatives, et les niveaux HOMO et LUMO des matériaux organiques utilisés dans cette étude.



**Figure 3.2:** (a) Molécule Alq3, (b) Empilement moléculaire d'Alq3 dans la maille élémentaire.

	$\mu_{0n}(cm^2/Vs)$	$\alpha_n(cm^2/V)^{1/2}$	$\mu_{0P}(cm^2/Vs)$	$\alpha_p(cm^2/V)^{1/2}$	$\epsilon_r$	HOMO(eV)	LUMO(eV)
NPB	$6.90 * 10^{-6}$	$1.50 * 10^{-3}$	$2.60 * 10^{-4}$	$3.83 * 10^{-3}$	3.1	-5.7	-3.0
Alq3	$1.51 * 10^{-7}$	$9.93 * 10^{-3}$	$9.16 * 10^{-10}$	$9.60 * 10^{-3}$	2.9	-5.5	-2.4

**Tableau 3.1:** la mobilité des porteurs dépendant du champ, les constantes diélectriques relatives, et HOMO et LUMO [14].

### 3.3 Structure de l'OLED modélisée

Dans cette étude nous avons choisi une OLED contenant deux couches organiques (NPB/Alq3). Ces deux couches sont mises entre une cathode en aluminium et un substrat recouvert d'ITO. La structure de l'OLED modélisée est décrite dans le tableau (3.2) et est représentée sur la figure (3.3a). Dans une seconde série de simulations nous avons placé des nanostructures de formes bâtonnet et sphérique au niveau de la couche ETL. Ces nanostructures sont faites d'un matériau diélectrique à forte constante diélectrique (figure 3.3b.3c).

Matériaux	Nom/formule chimique	Épaisseur/ la largeur (nm)	Fonction
Substrat de verre/ITO	verre/ Oxyde d'étain d'indium	-	Anode
NPB	N, N'-Di (1 naphthyl)-N, N'-diphenyl-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamine /C <sub>44</sub> H <sub>32</sub> N <sub>2</sub>	65/100	Couche de transport des trous
Alq3	Tris-8-hydroxyquinoline aluminium C <sub>27</sub> H <sub>18</sub> AlN <sub>3</sub> O <sub>3</sub> / 4-(Dicyanomethylene)-2- methyl-6-'4-dimethylaminostyryl)-4Hpyran /C <sub>19</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O	60/100	matériau de transport d'électrons/Couche émissive
Al	Aluminium/Al	-	Cathode

**Tableau 3.2:** Structure OLED

### 3.4 Structuration de l'OLED modélisée sans et avec nano-structure

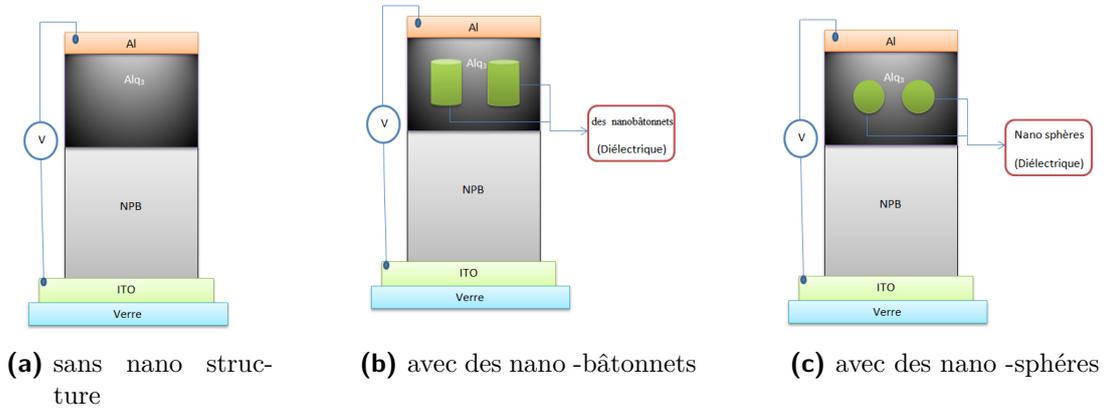


Figure 3.3: Représentation schématique des OLED modélisées

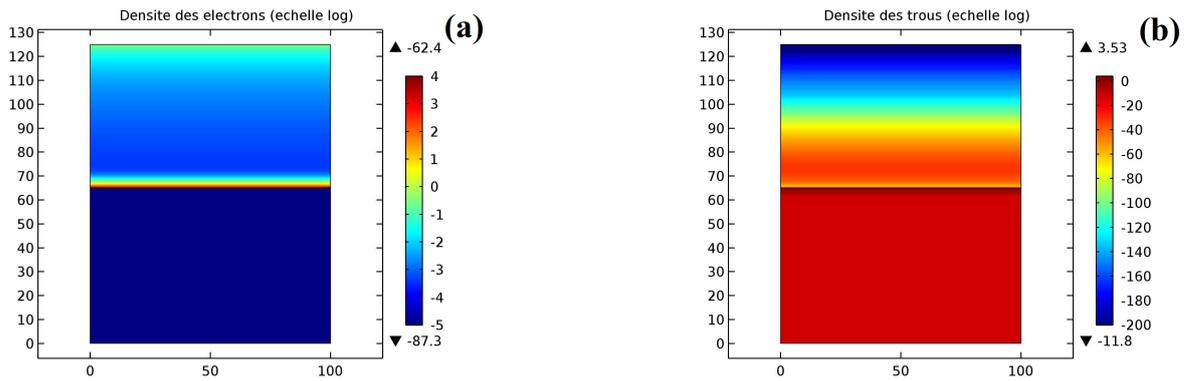
### 3.5 Etude de l'OLED sans nano-structures

#### 3.5.1 Propriétés électriques :

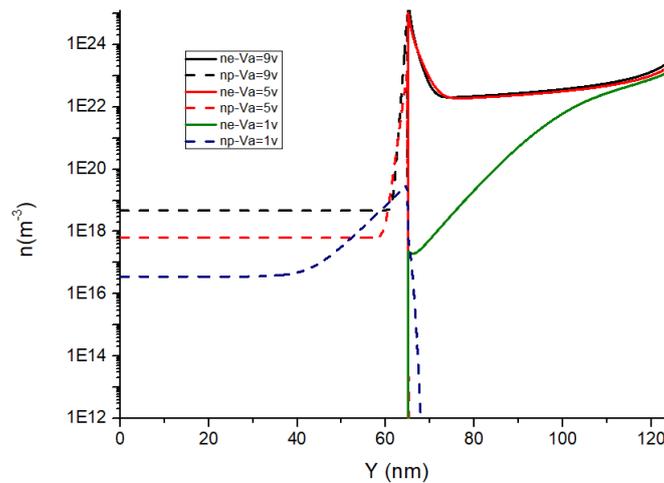
La simulation montre le comportement général de l'OLED : les électrons sont injectés à travers la cathode en Al dans la couche Alq3 et les trous à travers l'anode ITO dans la couche NPB (figure 3.4). Sur cette figure, les densités de charges sont données avec une échelle logarithmique des couleurs. A l'interface NPB/Alq3 (en  $y=65\text{nm}$ ) on constate une accumulation des électrons et des trous. Très peu de trous a travers l'interface vers l'Alq3 mais pratiquement aucun flux d'électrons ne traverse vers le NPB. Cela est dû à la différence des niveaux d'énergie HOMO et LUMO de NPB et Alq3. En effet, ces différences d'énergie constituent des barrières de potentiels aux charges. La barrière rencontrée par les électrons est plus grande que celle rencontrée par les trous,  $0.45\text{eV}$  et  $0.2\text{eV}$  respectivement. Cela induit donc un flux par effet tunnel négligeable pour les électrons et faible, mais non négligeable, pour les trous.

Le profil des densités (figure 3.5) montre une augmentation dans le temps jusqu'à atteindre un état d'équilibre où la formation des excitons est exactement compensée par l'injection des

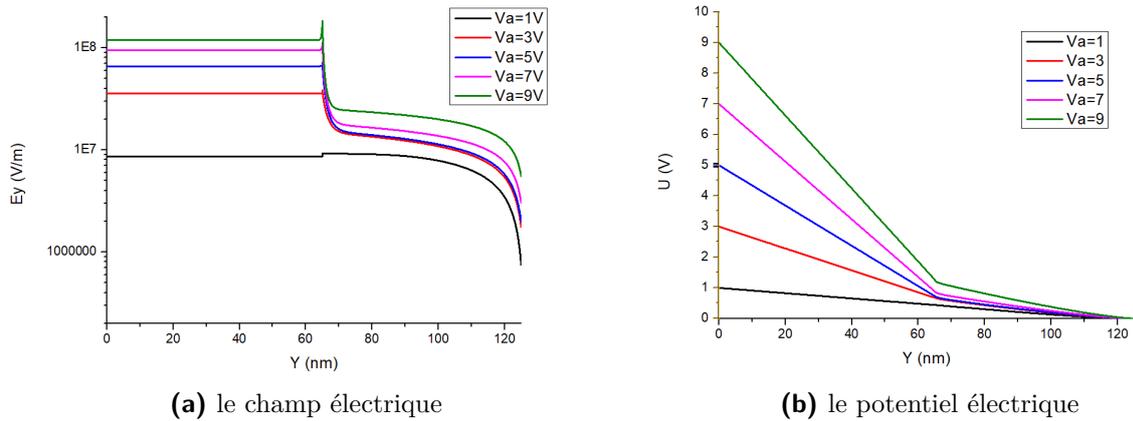
charges aux électrodes. Le temps nécessaire pour arriver à cette équilibre est inversement proportionnel à la différence de potentiel appliquée à l'OLED. Il est de l'ordre de 0.2ms à une tension de 9V (Figure 3.7), soit une fréquence maximale d'utilisation de cette OLED de 5kHz.



**Figure 3.4:** Visualisation de densité des charges dans l'OLED a 2D, (a) pour les électrons, (b) pour les trous.

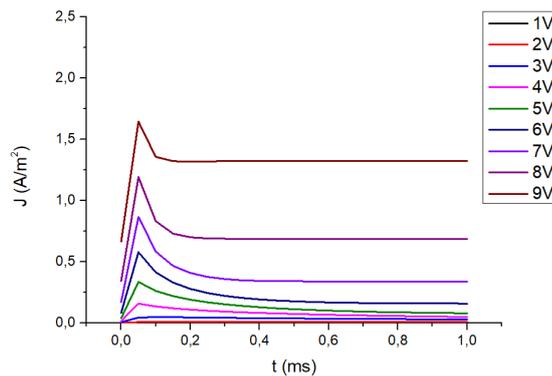


**Figure 3.5:** Distribution spatiale de la densité des électrons et des trous calculée avec différentes tensions appliquées

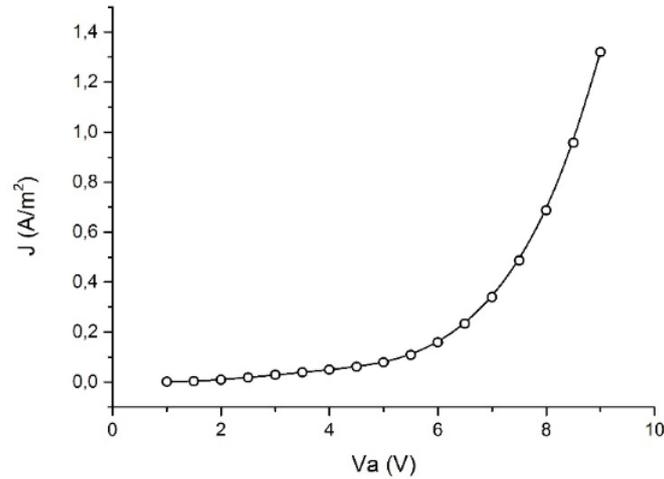


**Figure 3.6:** Variation du potentiel et le champ électrique en fonction de la position Y

Le champ électrique dans la coche de NPB est pratiquement constant mais présente un pic à l'interface NPB/Alq3. Il est le résultat de l'accumulation des charges à cet endroit (figure 3.6a). Sur la figure (3.6b), on a représenté le potentiel électrique qui est la superposition du potentiel appliqué et le potentiel dû à la distribution de charge.



**Figure 3.7:** Variation de la densité de courant fonction du temps



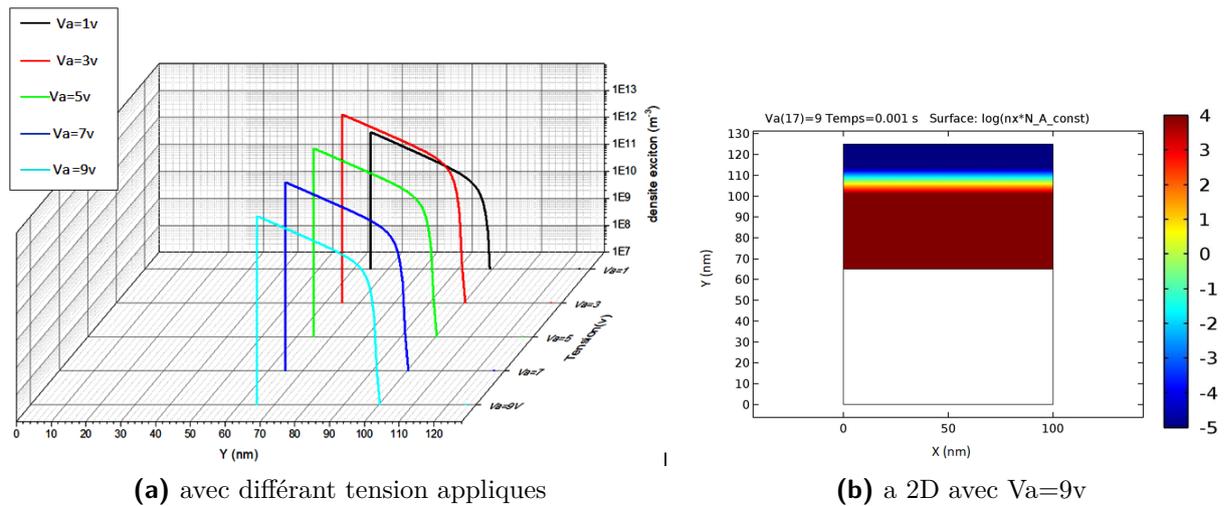
**Figure 3.8:** Caractéristique densité de courant-tension de l’OLED

La figure (3.7) montre l’évolution de la densité de courant en fonction de temps. On remarque une augmentation rapide du courant, puis une légère diminution pour ensuite se stabiliser à une valeur constante. C’est l’état d’équilibre que nous avons signalé plus haut.

Sur la figure(3.8) on retrouve la caractéristique tension-courant de l’OLED. Elle est semblable à la caractéristique d’une LED inorganique. La tension seuil est la tension minimale pour qu’une diode organique fonctionne, elle dépend de la largeur du gap des semi-conducteurs [17]. Ici, elle est d’environ 7V, ce qui est beaucoup plus grand que le seuil des LED inorganique, à savoir 0.6V pour le silicium.

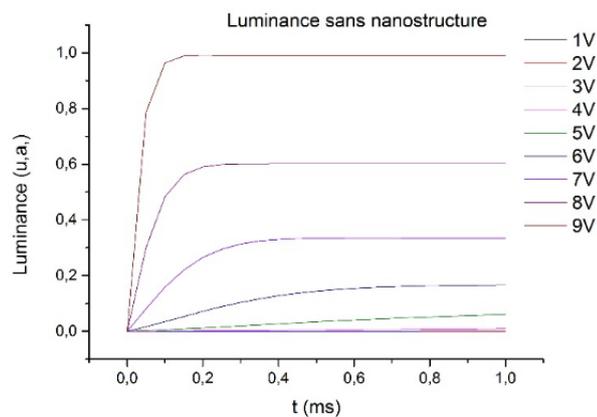
### 3.6 Propriétés optiques

La formation des excitons se fait par l’association d’un électron et d’un trou, l’endroit le plus propice à cela est la région où les électrons sont pratiquement confinés, c’est-à-dire près de l’interface NPB/Alq3, du côté du Alq3. Comme pour les densités des charges, la densité des excitons atteint rapidement un état d’équilibre entre les différents processus que



**Figure 3.9:** Création des excitons dans l'OLED

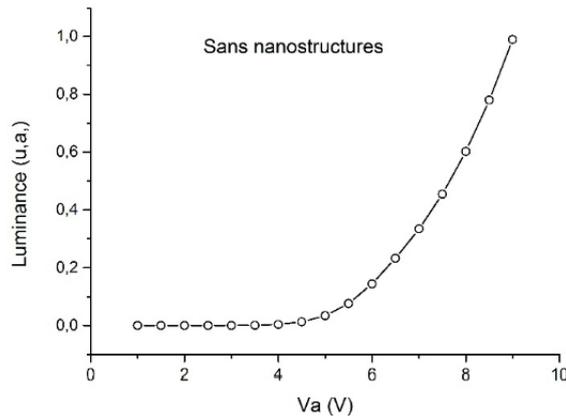
nous avons vus au chapitre 2. Les figures (3.9a) et (3.9b) montrent la distribution de la densité des excitons. On remarque une chute abrupte de cette densité au-delà de la position  $y=100$ nm. Cela est due à l'annihilation non radiative des excitons par effet quenching. En effet, nous avons pris en compte dans notre modèle la technique de dépôt de l'électrode d'aluminium par évaporation qui induit une diffusion des atomes d'Al dans la couche Alq3 [14]. Il est clair que cela constitue un défaut de cette configuration d'OLED à deux couches que nous avons adoptée. Une couche intermédiaire de transport des électrons entre l'Alq3 (couche émettrice) et la cathode éviterait certainement cet inconvénient.



**Figure 3.10:** Luminance en fonction du temps

On déduit la luminance par intégration de la densité des excitons sur tout le volume de la

couche. Nous avons obtenu les courbes des figures (3.10) et (3.11) en fonction du temps et en fonction de la tension appliquée. On retrouve là aussi l'état d'équilibre après un certain temps de l'ordre de quelques dixièmes de milliseconde en fonction de la tension appliquée.



**Figure 3.11:** Luminance en fonction de la tension appliquée

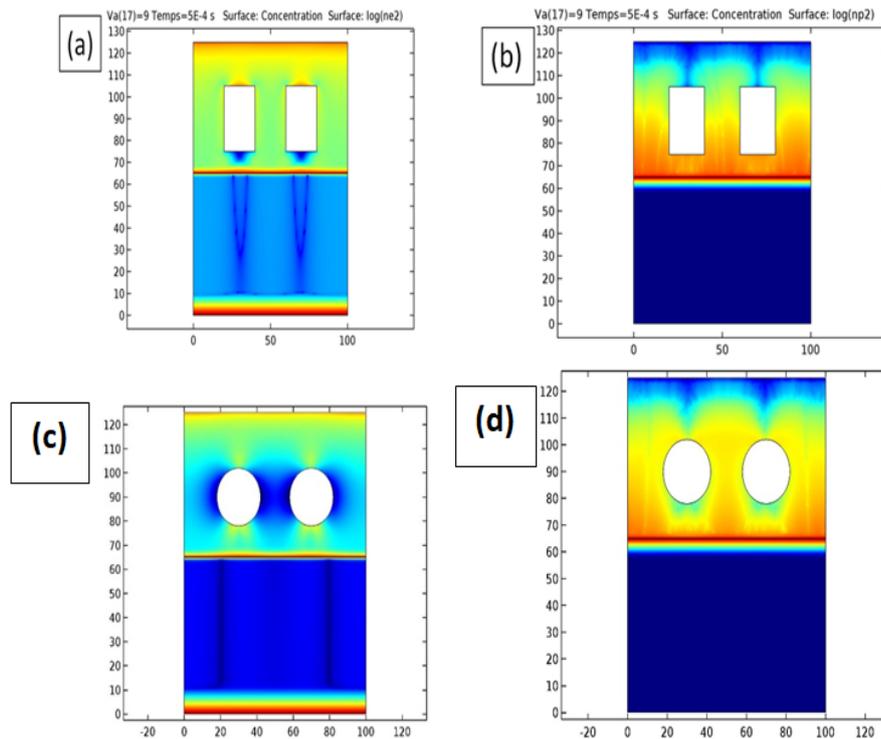
## 3.7 Etude de l'OLED avec nano-structures

Afin de comprendre l'effet de la présence des nanostructures diélectriques dans la couche émettrice, nous avons considéré deux formes de particules : des bâtonnets et des sphères. Dans ce qui suit, nous allons nous concentrer sur les différences qu'on peut observer avec les propriétés de l'OLED sans nanostructures.

### 3.7.1 Propriétés électriques

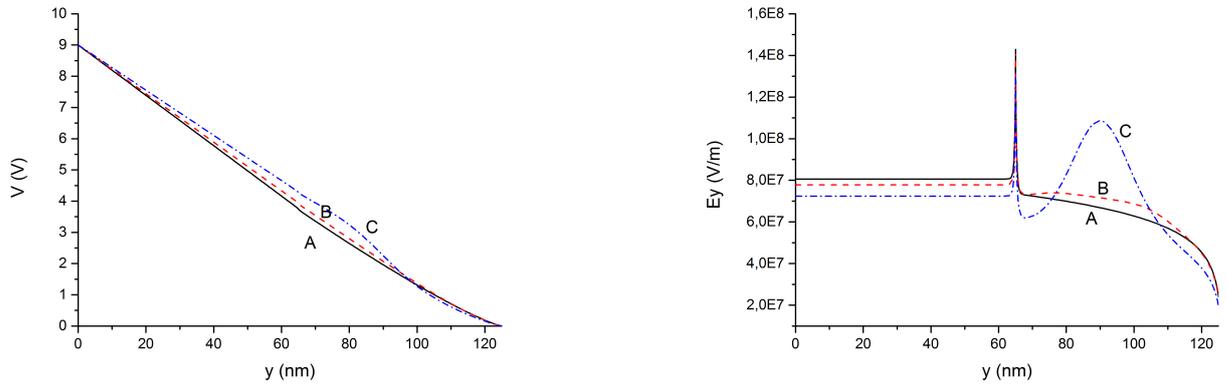
On peut voir sur la figure (3.12), les densités des électrons et des trous pour une tension de 9V. On remarque sur la densité des électrons l'apparition d'un effet « d'ombre » derrière les bâtonnets, qui s'étendent pratiquement sur toute la couche NPB sous forme de deux cônes. On observe le même comportement dans le cas des sphères, sauf que l'ombre est ici sous forme de deux lignes. Cet effet d'ombre s'observe aussi pour la densité des trous derrière les nanostructures. Il est cependant plus important dans le cas des bâtonnets. On pense que cet effet d'ombre est négligeable dans le cas des électrons mais peut avoir une importance dans

le cas des trous. En effet, une diminution de la densité des trous induit une diminution du taux de formation des excitons, ce qui influence directement la luminance.

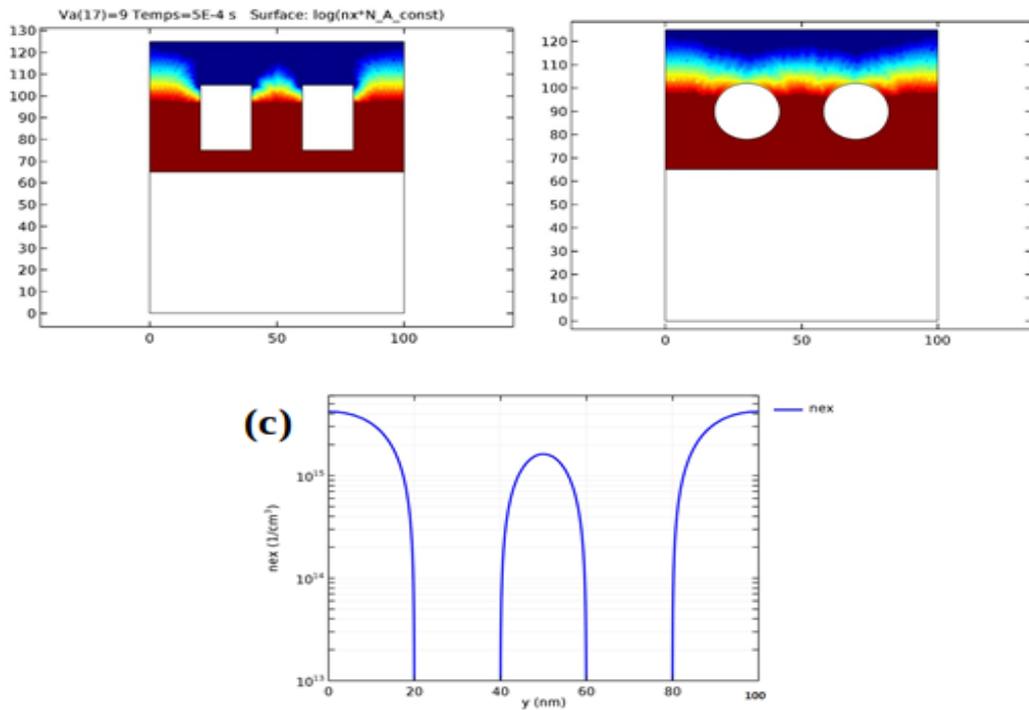


**Figure 3.12:** Densité des charges dans l’OLED avec des bâtonnets (en haut) et des sphères (en bas), (a)et(c) pour les électrons,(b)et(d) pour les trous. Pour pouvoir visualiser les deux couches nous avons utilisé deux échelles logarithmique différentes.

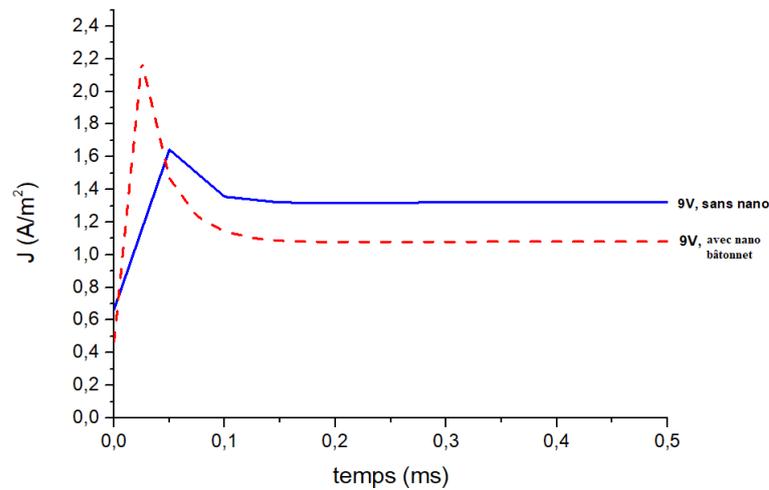
Le potentiel et le champ électrique sur l’axe central de l’OLED sont représentés sur la figure (3.13). On remarque une augmentation significative du champ électrique au centre entre les nanostructures, notamment dans le cas des sphères. Cette augmentation du champ induit une augmentation de la mobilité dans cette région, ce qui induit à son tour une diminution de la densité des électrons entre les nano-sphères. C’est ce que l’on peut observer sur la figure (3.12).



**Figure 3.13:** Coupe du potentiel et du champ électriques pour  $V_a=9V$ . A : Sans nanostructures, B : Bâtonnets, C : Sphères



**Figure 3.14:** Densité des exciton dans l'OLED avec bâtonnets, à gauches, et des sphères à droite ( $V_a=9V$ ). En bas, coupe transversale passant par le centre des bâtonnets.



**Figure 3.15:** Densité de courant sans et avec nano bâtonnets en fonction de temps à  $V_a=9V$

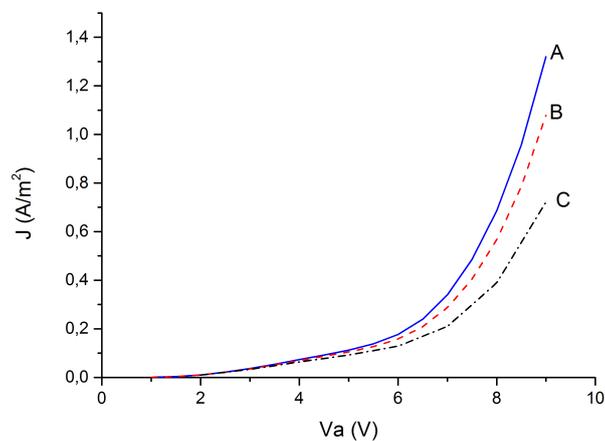
La densité de courant présente, comme dans le cas sans nanostructure, un pic puis un état d'équilibre où le courant est constant. Il est relativement plus faible mais le temps de son établissement est sensiblement le même (figure 3.14). Ce comportement est valable pour toutes les tensions de polarisation que nous avons simulées. On peut le voir sur la figure (3.15) où l'on remarque que le courant dans le cas des nano sphères est encore plus faible.

De cette figure (3.16) on peut déduire la tension seuil de l'OLED avec nanostructure, elle sensiblement la même que sans nanoparticule, soit 7V. Cependant, on ne peut pas le confirmer dans le cas des nano sphères car le graphe ne possède pas suffisamment de points de mesure.

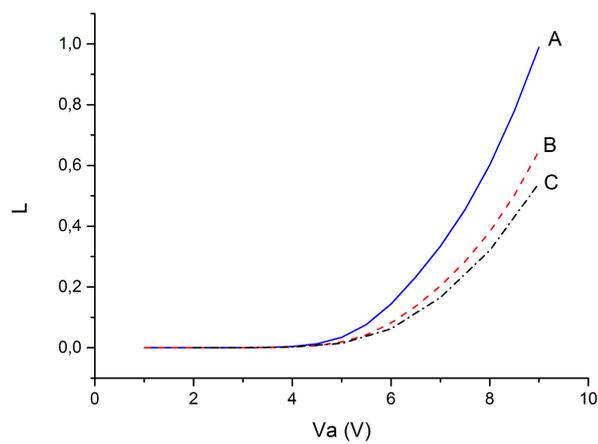
### 3.7.2 Propriétés optiques

La densité des excitons est donnée sur la figure (3.14). On observe une faible densité derrière les structures, cet effet d'ombre est plus important dans le cas des bâtonnets. On constate une autre diminution de la densité au centre entre les structures, que nous avons expliqué par une plus grande mobilité dans cette région (figure 3.14c).

La luminance (figure 3.17) diminue en présence de nanostructures. On trouve, comme pour la densité de courant, que la luminance est plus faible dans le cas des sphères. Sur la figure (3.18) on trace la perte de luminance due à la présence des nano bâtonnets, elle d'environ 35% sous un potentiel de 9V.



**Figure 3.16:** Densité de courant en fonction du  $V_a$  appliqué. A : Sans nanostructures, B : Bâtonnets, C : Sphères



**Figure 3.17:** Luminance en fonction de  $V_a$  (en unité arbitraire). A : Sans nanostructures, B : Bâtonnets, C : Sphères

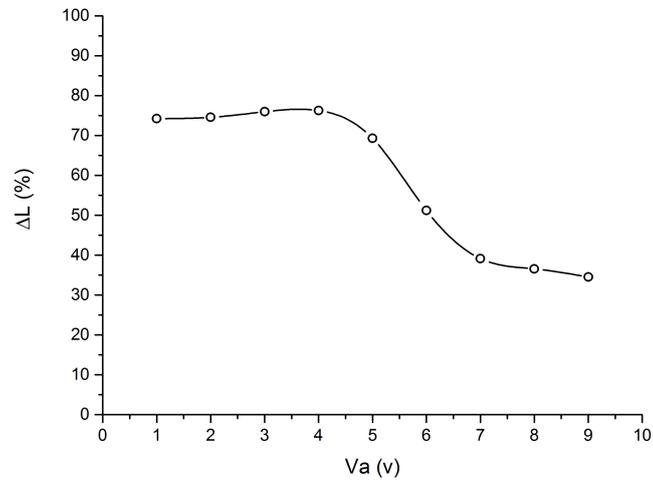


Figure 3.18: Taux de perte de la luminance en présence de nano bâtonnets.

### 3.8 Rendement Luminance en fonction de la puissance

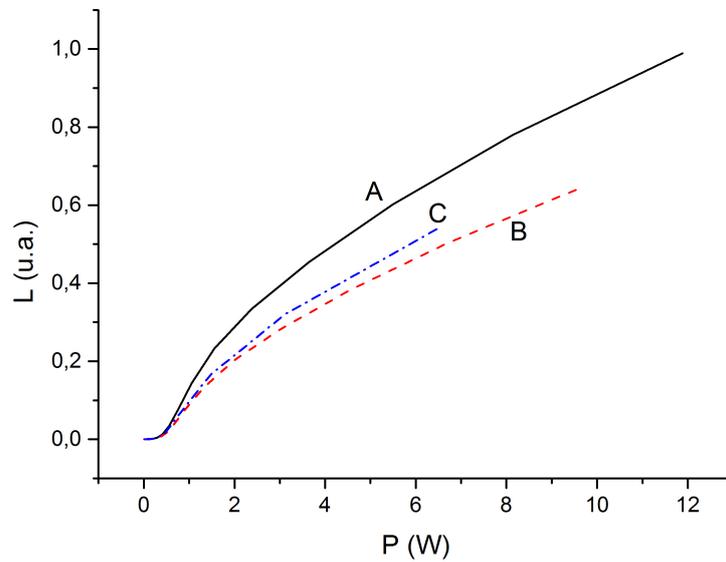
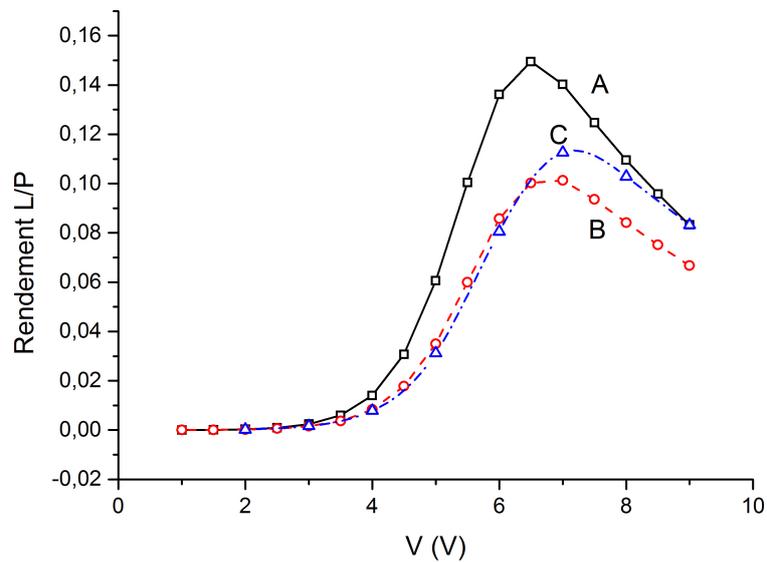


Figure 3.19: la luminance en fonction de puissance électrique



**Figure 3.20:** le rendement de puissance

(A) sans nano-structure

(B) avec nano -bâtonnet

(C) avec nano-sphères

Pour une comparaison plus significative, on compare entre la luminance en fonction de la puissance électrique absorbée par l'OLED. Avec ce critère, on constate un résultat contraire à ce que l'on aurait pu prévoir de prime abord avec les résultats des paragraphes précédents. En effet, la luminance  $L$  en fonction de la puissance électrique fournie à l'OLED montre que les nano-sphères donnent un meilleur résultat (figure 3.19)

Cela est confirmé par la figure (3.20) du rendement  $\frac{L}{P}$  en fonction de la tension appliquée

En remarque que pour  $V_a=9V$  le rendement des nano-sphère est égal a rendement de l'OLED sans nano-structure

# Conclusion générale

Dans un travail précédent, effectué au sein de l'équipe, il a été montré que l'ajout de nanoparticules dans une couche de l'OLED augmente considérablement la puissance émise par les molécules électroluminescentes. Le facteur de Purcell est d'environ 120 si les nanoparticules sont en Argent alors qu'il est d'environ 50 si elles sont en matériau diélectrique. La question s'est posée alors de savoir si la présence de ces nanostructures modifie les propriétés électriques de l'OLED et que le gain de puissance n'est pas perdu par un mauvais comportement électrique.

Pour répondre à cette question, nous avons adopté un modèle de transport appliqué à une OLED à deux dimensions. Nous avons utilisé le logiciel COMSOL pour la simulation.

Nous avons en premier validé le code en le comparant aux résultats d'un article publié. Nous n'avons pas présenté cette étape dans ce manuscrit à cause de la limitation du nombre de pages.

Nous avons simulé trois OLED identiques en terme de dimensions et de couches : une sans nanostructures comme référence, une avec des bâtonnets et une dernière avec des sphères. Ces nanoparticules sont d'un matériau diélectrique. Le cas de nanoparticules en argent est plus complexe, la durée du stage est insuffisante pour le modéliser et le simuler.

Nous avons analysé les résultats afin de déterminer les effets des nanostructures. Ainsi nous avons constaté une diminution globale de la luminescence, dont la valeur dépend de la forme des nanoparticules. Cette perte est de l'ordre de 35% sur la plage de potentiel de fonctionnement normale de la diode. Le tension seuil est, cependant, resté inchangée.

Ce travail n'est qu'une première étape pour pouvoir répondre à la question posé plus haut. Beaucoup de travail reste à faire, notamment comparer les pertes d'ordre électrique avec le

gain de puissance électromagnétique.

Signalons finalement que ce travail présente, à notre connaissance, une certaine originalité dans l'application du modèle de transport à un domaine 2D et en présence de nanostructures. En effet, dans notre recherche bibliographique nous n'avons trouvé que des applications à 1D, donc sans pouvoir simuler nanoparticules.

# Bibliographie

- [1] C. W. Tang and S. A. Vanslyke, "Organic Electroluminescent Diodes," *Applied Physics Letters*, vol. 51, pp. 913-915, 1987.
- [2] Sarra MITICHE, Exaltation de l'émission des OLED par plasmon de surface localisé, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, 2015.
- [3] BENOIT Blondel, Complexes de platine (II) pour des diodes organiques électroluminescentes (OLEDs) rouges et bistable, Université de Toulouse, 2017.
- [4] Samira KHADIR, Modélisation et caractérisation d'un dispositif plasmonique pour des applications OLEDs, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, 2013.
- [5] HAMDAD Sarah, Synthèse et étude des nanoparticules métalliques fonctionnalisées pour l'exaltation de l'électroluminescence des OLEDs, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, 2017.
- [6] Hakim Choukri, Contrôle de la couleur d'émission d'une Diode Electroluminescente Organique (OLED) multicouche via la diffusion des excitons, Université Paris-Nord - Paris XIII, 2008.
- [7] P. S. Davids, I. H. Campbell, and D. L. Smith, *J. Appl. Phys.* 82, 6319 (1997).
- [8] O. Sergiyenko, *Optoelectronic Devices and Properties* (Intech, Rijeka, 2011).
- [9] T. Ning, *Fundamentals of Modern VLSI Devices* (Cambridge University Press, Cambridge, 2010).
- [10] M. Pope and C. E. Swenberg, *Electronic Processes in Organic Crystals* Oxford University Press, New York, 1982.

- [11] R. H. Fowler and L. Nordheim, Proc. R. Soc. London, Ser. A 119, 173 (1928).
- [12] S. M. Sze, Physics of Semiconductor Devices Wiley, New York, 1981
- [13] J. C. Scott and G. G. Malliaras, Chem. Phys. Lett. 299, 115 (1999).
- [14] Chih-Chien Leea, Mei-Ying Chang, Ping-Tsung Huang, Yen Chun Chen, and Yih Chang, Shun-Wei Liu, Electrical and optical simulation of organic light-emitting devices with fluorescent dopant in the emitting layer, journal of applied physics 101, 114501 (2007).
- [15] Sadiara FALL, Etude du transport de charges dans les polymères semi-conducteurs à faible bande interdite et de son impact sur les performances photovoltaïques. Université de Strasbourg, 2013. France
- [16] Jung-An Cheng, Pi-Ju Cheng, Crystal Study of N, N0 -diphenyl-N, N0 -bis (1-naphthyl)-1,10 - biphenyl-4,40 -diamine, J Chem Crystallogr 40(2010).
- [17] GHALEM SALIM, Etude et simulation d'une diode électroluminescente organique blanche, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, .2016