

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE MOULOU D MAMMERI DE TIZI OUZOU



FACULTÉ DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

LABORATOIRE DE PHYSIQUE ET CHIMIE QUANTIQUE

Mémoire de Master

Filière: Physique

Spécialité : Nanophysique

Thème :

**Amélioration de la directivité d'une OLED par
incorporation de nanotubes**

Présentée par :

Razika NAMANE

Le jury d'examen composé de :

M. BELKHIR Abderrahmane	Pr.	UMMTO	Président
M. LAMROUS Omar	Pr.	UMMTO	Examineur
M. DJOUDER Madjid	MCA	UMMTO	Rapporteur

Soutenu le : 02/10/2021

Remerciements

Je remercie Dieu le tout puissant de m'avoir donné la santé et la volonté d'entamer ce mémoire

Je tiens à remercier tous ceux qui m'ont aidé, conseillé et encouragé afin de réaliser ce modeste travail.

Ce travail a été réalisé au Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ) de l'Université Mouloud Mammeri de Tizi Ouzou . Je tiens à présenter mes remerciements et ma reconnaissance à tout le personnel du laboratoire, à leur tête le directeur du laboratoire le Professeur Hamid BOUZAR.

Tout d'abord, ce travail n'aurait pas pu voir le jour sans l'aide et l'encadrement de Monsieur Madjid DJOUDER, je le remercie pour la qualité de son encadrement exceptionnel, pour sa patience, sa disponibilité durant ma préparation de ce mémoire.

Je tiens à remercier Monsieur Belkhir Abderrahmane, Professeur à l'université Mouloud Mammeri, d'avoir accepté de présider le Jury. J'adresse toute ma gratitude à Monsieur Lamrous Omar pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail en acceptant de faire partie du Jury de ce mémoire.

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail

A ma très chère mère

Quoi que je fasse ou que je dise, je ne saurai point te remercier comme il se doit. Ton affection me couvre, ta bienveillance me guide et ta présence à mes côtés a toujours été ma source de force pour affronter les différents obstacles.

A mon très cher père

Tu as toujours été à mes côtés pour me soutenir et m'encourager.

Que ce travail traduit ma gratitude et mon affection.

A mon très cher mari Krimo et toute sa famille.

A mes très chers frères Lounes et Nadir et mes sœurs Kahina et Fatiha

Puisse Dieu vous donne santé, bonheur, courage et surtout réussite.

Introduction

Le phénomène d'électroluminescence des molécules organiques est connu dès le milieu du 20^e siècle. Cependant, ce n'est qu'en 1987 que Tang et van Slyke [2] ont prouvé la faisabilité du premier dispositif OLED à haut rendement avant que les diodes électroluminescentes organiques ne soient prometteuses pour des applications pratiques.

En un peu plus de 20 ans, l'efficacité des OLED a augmenté d'environ 20 fois, approchant la limite théorique de l'efficacité quantique interne. Les OLED sont actuellement de plus en plus utilisées dans la vie courante : téléphones mobiles, appareils photo numériques, moniteurs d'ordinateurs, téléviseurs,...

L'un des problèmes qui se pose avec les OLED est que le rendement externe n'est que de 20%. En effet, la majeure partie de la luminescence est piégée à l'intérieur des multicouches. Il existe dans la littérature des méthodes pour améliorer ce rendement. Notre travail s'inscrit dans cette perspective.

Nous proposons d'insérer des nanotubes d'argent dans le multicouche. L'équipe a auparavant constaté que dans ce cas, les dipôles qui oscillent parallèlement à l'axe du tube sont atténués alors que ceux qui oscillent perpendiculairement à l'axe sont exaltés.

Pour notre travail, nous avons simulé la structure 3D d'une OLED simplifiée. Un dipôle électrique oscillant simulant une molécule luminescente est positionné au centre de la couche émissive. On cherche à augmenter la quantité de la lumière extraite, on propose de mettre des nanotubes d'Argents de différentes dimensions, en des positions différentes. Nous ferons toutes les simulations pour les deux cas : dipôle parallèlement à l'axe Ox puis parallèlement à l'axe Oz. Le spectre d'oscillation correspond au spectre visible : de 400nm à 800nm. L'effet du nanotube sera quantifié par le calcul du facteur de Purcell.

Le développement de la technologie nous a facilité le travail, notamment après la parution des ordinateurs de haute capacité qui nous permettent d'utiliser des logiciels performant qui nous simplifient la programmation tel que le logiciel COMSOL Multiphysics.

Le logiciel cité précédemment est COMSOL Multi physiques est un logiciel de simulation numérique basé sur la discrétisation par la méthode des éléments finis. Il permet de simuler de nombreux phénomènes physiques et applications et ingénierie.

Notre manuscrit est structuré de la façon suivante :

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

Le deuxième chapitre est consacré aux rappels des équations de Maxwell. On décrira le rayonnement d'un dipôle électrique oscillant et nous donnerons une définition du facteur de Purcell. A la fin de ce chapitre nous parlerons un peu plus en détails de notre modèle.

Dans le dernier chapitre, nous allons présenter nos résultats de simulation qui portent sur l'étude de l'effet du nanotube en fonction de sa position, son diamètre et de son épaisseur. Ce manuscrit se termine par une conclusion générale.

Chapitre 1. Généralités sur les OLED

1- Introduction

L'électroluminescence dans les matériaux organiques a été découverte en 1963 par l'équipe de Pope [1]. La première démonstration de l'applicabilité de ces matériaux à un dispositif pratique est due à Tang et Van Slyke en 1987 [2]. Ils ont réussi à fabriquer la première diode électroluminescente organique (OLED pour *Organic Light-Emitting Diode*) fonctionnant à une tension relativement faible de quelques volts.

Depuis, la recherche a permis de faire passer les OLED à une technologie commercialement viable utilisée dans plusieurs applications dans le domaine de l'affichage et de l'éclairage.

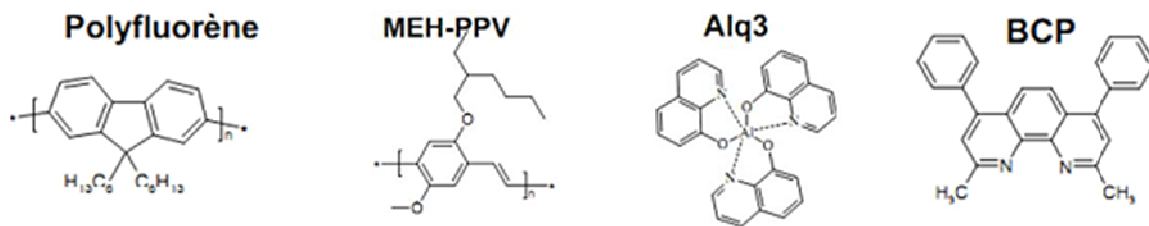
Dans ce chapitre, nous allons intéresser d'abord au caractère de semi-conducteur des matériaux organiques et les différentes théories qui les régissent, et nous aborderons ensuite le fonctionnement d'une OLED.

2- Les semi-conducteurs organiques

Les matériaux organiques sont composés essentiellement de carbone C, d'hydrogène H, d'oxygène O et d'azote N. Ils sont souvent connus pour être des matériaux isolants, cependant, on distingue deux types :

Les matériaux organiques isolants : Appelés non conjugués, se caractérisent par une énergie de gap très large et souvent la présence des liaisons (C-C) simples (liaisons σ) [3].

Les matériaux organiques conjugués sont des composés carbonés possédant des propriétés semi-conductrices, ils se caractérisent par un gap assez faible (2-3 eV) et l'alternance des liaisons simples (C-C) et doubles (C=C) figure (1).



Figure(1):Structure moléculaire des matériaux organiques conjugués utilisés dans les OLED.

Entre deux atomes de carbone, il y a deux types de liaisons possibles :

- Liaison σ : c'est le fort recouvrement entre les deux orbitales sp^2 selon l'axe de la liaison;
- Liaison π : c'est le recouvrement latéral plus faible entre les deux orbitales 2p.

Sur la figure 2 on représente les niveaux d'énergie possibles pour les deux électrons de la liaison σ et les deux électrons de la liaison π . Une liaison est d'autant plus forte que le niveau d'énergie de ses électrons est plus bas. On constate qu'il y a deux niveaux d'énergies possible pour chacune des deux liaisons : un de basse énergie dit liant et un autre d'énergie plus grande dit anti-liant (notés avec exposant + et – respectivement).

Les électrons de la double liaison $C=C$ ont tendance à se localiser en une paire par orbitales dans les niveaux d'énergie les plus bas. Les orbitales anti-liantes sont vides, cependant avec un apport d'énergie, les électrons peuvent les occuper.

Si une molécule est constituée d'une succession de simples et de doubles liaisons $-C=C-C=C-$, il y a alors possibilité de recouvrement des orbitales liantes entre elles, pour former, d'un point de vue énergétique, une bande de valence, contenant l'ensemble des niveaux totalement remplie d'électrons σ^- et π^- figure(2) et figure (3).

De même pour les orbitales anti-liantes entre elles qui forment l'équivalent d'une bande de conduction, normalement inoccupée.

Comme pour les semiconducteurs classiques, des électrons de la bande de valence pleine peuvent sauter dans la bande de conduction vide si on leur fournit l'énergie nécessaire. Le gap est typiquement de l'ordre de 2eV.

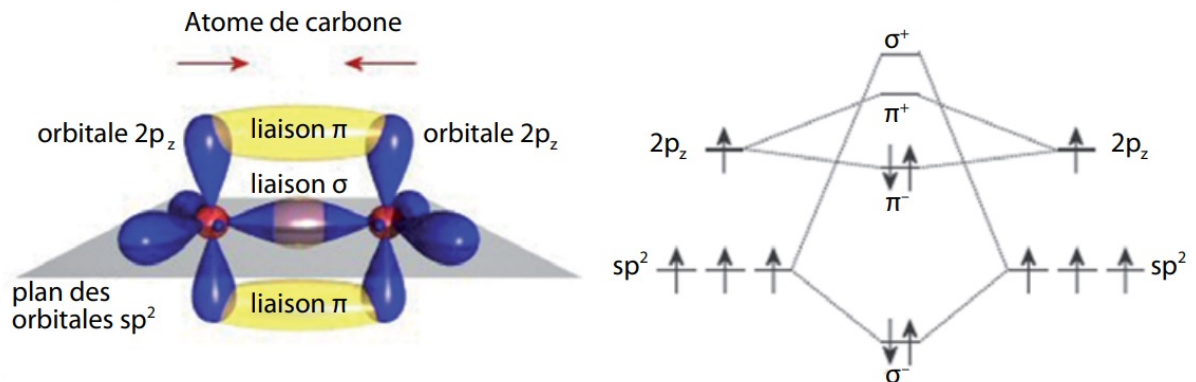


Figure (2) : Représentation des orbitales des électrons de liaison du carbone (molécule d'éthylène) et niveaux d'énergie des électrons de la double liaison C=C.

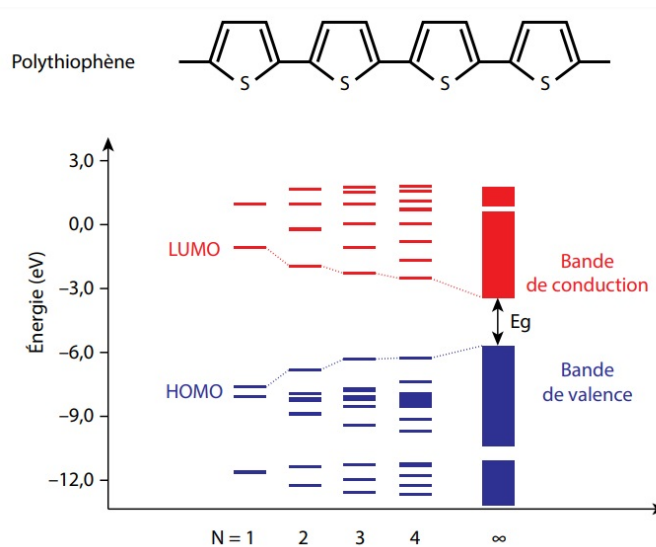


Figure (3) : Diagramme des niveaux d'énergie possibles pour les électrons de liaisons C-C d'un polythiophène.

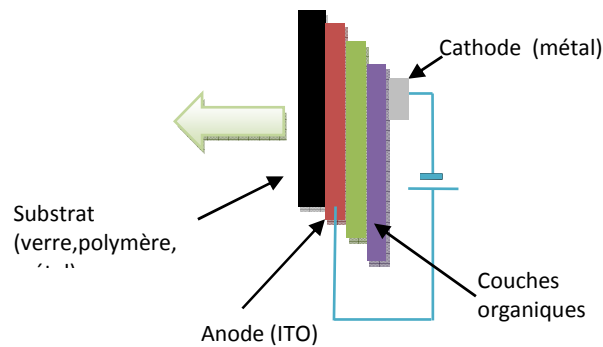
3- Les diodes électroluminescentes organiques (OLED)

a. Principes de fonctionnement des OLED

Une OLED est un empilement de plusieurs couches, la plus simple est représentée sur la figure (4).

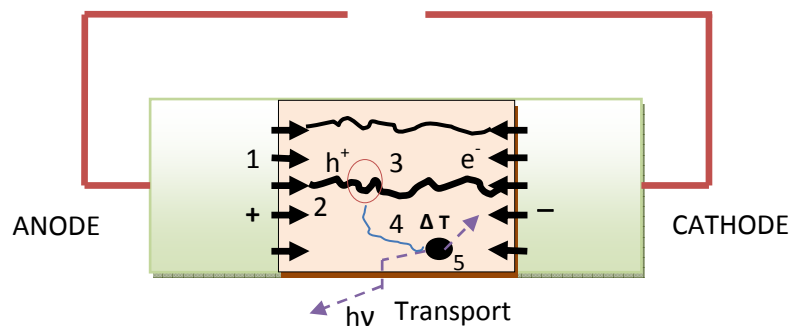
Le principe de fonctionnement de l'OLED est le suivant : une lacune d'électron (un trou) dans une bande de valence est équivalente à une charge positive. Quand un électron de la bande de conduction rencontre un trou de la bande de valence ils forment un couple de charges appelé **exciton**. Cet exciton est une pseudo-particule neutre qui peut se déplacer par

diffusion. La recombinaison électron-trou, ou annihilation d'exciton, entraîne une émission d'énergie sous forme de phonons (chaleur) ou de photons (lumière).



Figure(4) : structure simplifiée d'une OLED : une électrode transparente (anode), une couche organique (-100 nm), de « petites » molécules (dépôt par évaporation) ou de polymères (dépôt par voie humide, à partir d'encre) et une électrode réfléchissante (cathode).

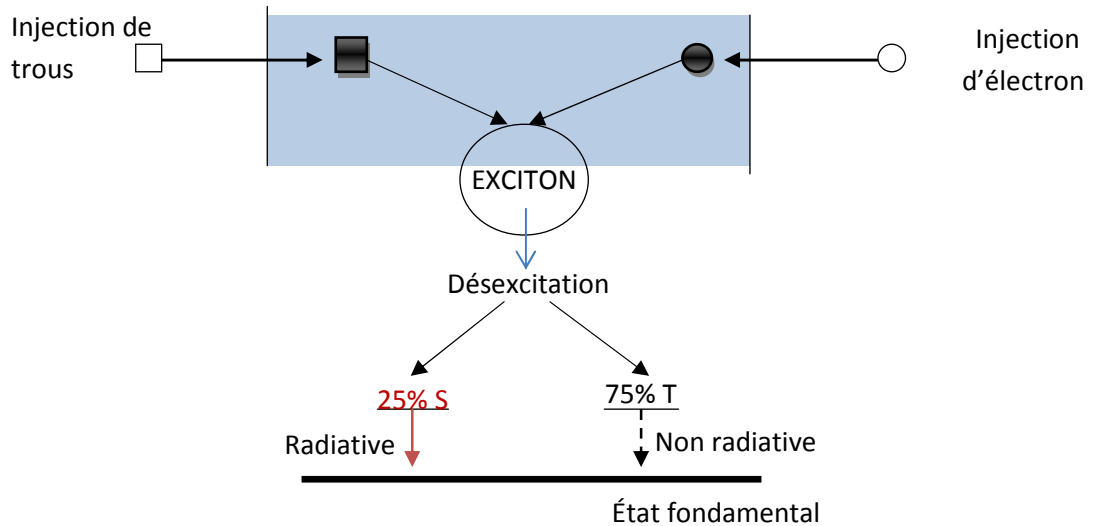
On résume les différents processus qui rentrent en jeu sur la figure (5) : **1** : injection des porteurs de charge à travers les électrodes ; **2** : transport des porteurs de charge ; **3** : formation des excitons ; **4** : diffusion des excitons ; **5** : recombinaison des excitons et émission de photons ou de phonons.



Figure(5) : cette figure représente les étapes du fonctionnement d'une diode électroluminescente.

Dans le cas de semi-conducteurs organiques, la probabilité de formation des excitons (étape 3) est très bonne, près de 100 %, mais la probabilité de recombinaison des charges avec réémission de l'énergie sous forme de lumière (étape 5) dépend du spin total du couple électron-trou. Un seul état de spin 0, appelé état singulet, sur les quatre possibles abouti à

une émission de photon après désexcitation. Autrement dit, il n’y a que 25% des dés excitations qui émettent de la lumière (figure6).



Figure(6) : Schéma récapitulatif du processus de création de lumière par une OLED

b. Injection de charges

Le semi-conducteur organique intrinsèque est en fait un isolant, sauf si des porteurs de charge sont injectés ou générés dans le volume du matériau par excitation lumineuse. En effet, pour que l’OLED fonctionne bien, les porteurs de charge nécessaires doivent être injectés. La barrière de potentiel formée par la différence d’énergie entre le travail de sortie de l’électrode et de la bande d’énergie est un paramètre qui détermine l’efficacité du mécanisme d’injection (effet tunnel ou activation thermique).

Injection de trous :

Les matériaux utilisés comme anode sont généralement un oxyde conducteur transparent avec un travail de sortie inférieur à 5.3 eV. Cette dernière est difficile à aligner directement avec la couche émettrice. Cependant, l’injection de trous à partir de l’anode peut être améliorée en introduisant une couche intermédiaire appelée couche d’injection de trous.

Injection d’électron :

Il est difficile de trouver des matériaux d’injection d’électrons appropriés. Le niveau d’énergie LUMO de la plupart des matériaux organiques est compris entre 2.5eV et 3.5 eV. Pour cette raison, l’aluminium et l’argent sont généralement les métaux sélectionnés comme cathode. Les études ont montré que l’insertion d’une fine couche de LiF, CsF ou Li de

1 à 2 nm entre la cathode et la couche organique peut réduire la barrière que les électrons traversent.

c. Transport de charges

Le transport de charge se fait par des sauts entre les liaisons simples et doubles des molécules du semiconducteur organique. Ces sauts sont accompagnés par l'absorption ou l'émission de phonons.

La différence de mobilité des trous et des électrons, produit un déséquilibre de charge à l'intérieur de la couche organique. Afin de rétablir l'équilibre entre les charges, des matériaux qui favorisent le transport d'électrons et de trous sont insérés entre la couche émissive et les couches d'injection d'électrons et des trous, respectivement :

Transport de trous

Les matériaux organiques couramment utilisés comme couche de transport de trous (HTL) sont : TPD et NPD. Ils sont utilisés pour réduire la barrière potentielle ou les trous doivent traverser la couche émettrice et pour améliorer leur transport.

Transport d'électrons

La couche de transport d'électrons (ETL pour Electron Transport Layer) utilisée pour la couche de transport d'électrons doit répondre aux exigences suivantes : Mobilité électrique élevée et excellente capacité de blocage des trous.

4- La directivité dans les OLED.

De par sa construction, la luminescence produite dans la couche émissive d'une OLED, n'est pas entièrement exploitée. En effet, on estime que 20% uniquement de la lumière produite arrive à sortir de l'OLED, le reste est perdu par réabsorption. Cela est dû à l'indice de réfraction des couches organique supérieur à celui du substrat, ce qui forme un guide d'onde qui piège la lumière (figure 7).

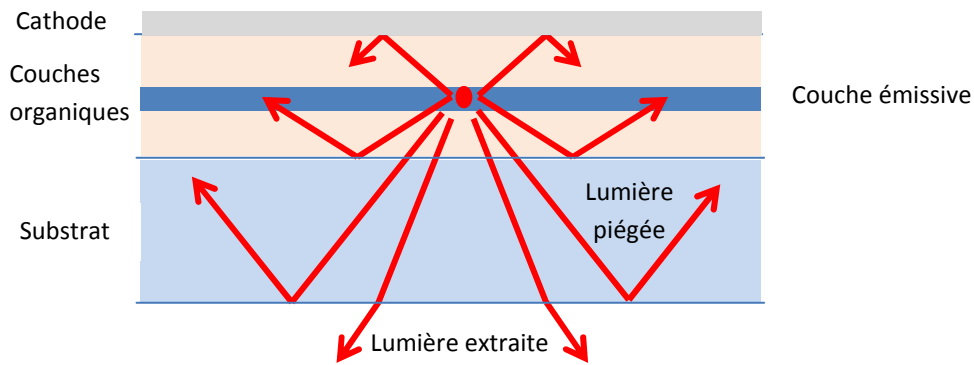


Figure (7): Extraction de la lumière.

Il y a plusieurs techniques pour améliorer la directivité, et ici en va motionné quelques-unes :

Texturisation de la surface du substrat de verre pour la rendre rugueuse. Il s'agit d'un moyen très simple et économique qui a pour effet de diffuser la lumière. L'efficacité d'extraction peut augmenter de 20 %. Cette méthode peut convenir à la production en série d'OLED de grande surface pour les applications d'éclairage (figure.8a) [5].

La texturisation peut aussi être régulière comme des motifs de microlentilles sur la surface du substrat. L'intensité d'émission de l'OLED peut être multipliée par 3 dans ce cas (figure 8b) [6].

Il existe d'autres techniques pour améliorer le rendement extérieur notamment en intercalant des couches avec des indices de réfraction qui minimisent les pertes par guidage d'onde.

Dans le présent travail nous proposons la méthode suivante : insérer des structures présentant une certaine symétrie, faites d'un matériau conducteur, dans les couches organiques afin que le couplage entre le centre rayonnant (molécule) et les modes plasmoniques favorise une direction d'émission sur les autres. Plus de détails seront donnés dans le chapitre suivant.

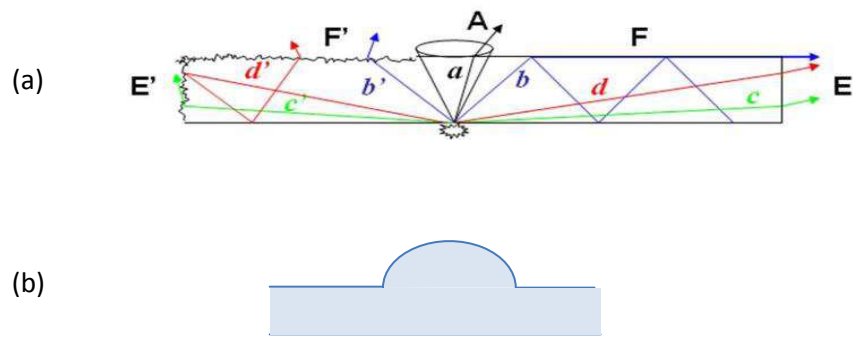


Figure. (8). (a) Illustration schématique de la propagation de la lumière à l'intérieur des dispositifs avec et sans traitement. (b) microlentille.

Chapitre 2. Modélisation

1- Introduction

Dans ce chapitre, on posera les bases de notre modèle. On rappellera en premier, les équations de Maxwell, puis le rayonnement d'un moment dipolaire électrique oscillant qui, dans notre modèle, représente la luminescence d'une molécule. On rappellera l'effet Purcell et la définition de facteur de Purcell qui nous permettra de quantifier l'effet des nanoparticules sur la puissance émise par les dipôles.

On présentera brièvement COMSOL Multiphysics qui est un logiciel de simulation numérique basé sur la discrétisation par la méthode des éléments finis. C'est un logiciel qui est de plus en plus utilisé dans les laboratoires de recherche et d'industrie dans le monde entier.

A la fin, en termine par présenter le modèle est les étapes de notre travail.

2- Les équations de Maxwell

L'interaction des ondes électromagnétiques avec la matière est régie par les quatre équations de Maxwell suivantes :

L'équation de Maxwell-Gauss

$$\mathit{div}\vec{D} = \rho_{\text{libre}} \quad (\text{II-1})$$

L'équation de conservation du flux

$$\mathit{div}\vec{B} = 0 \quad (\text{II-2})$$

L'équation de Maxwell –Faraday

$$\overline{\text{rot}}\vec{E} = \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (\text{II-3})$$

L'équation de Maxwell-Ampère

$$\overline{\text{rot}}\vec{H} = \vec{J}_{\text{libre}} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (\text{II-4})$$

Où \vec{E} représente le champ électrique, \vec{H} le champ magnétique, \vec{D} le vecteur déplacement électrique, \vec{B} l'induction magnétique. ρ_{libre} la densité de charges libres et \vec{J}_{libre} la densité de courant des charges libres.

Les relations sont complètement par les relations constitutives :

$$\vec{D} = \epsilon(\omega)\vec{E} = \epsilon_0\tilde{\epsilon}\vec{E} \quad (\text{II-5})$$

$$\vec{B} = \mu\vec{H} = \mu_0\mu_r\vec{H} \quad (\text{II-6})$$

Et la loi d'Ohm :

$$\vec{J} = \sigma\vec{E} \quad (\text{II-7})$$

Avec ϵ_0 et μ_0 sont la permittivité électrique et la perméabilité magnétique du vide respectivement, σ la conductivité électrique, et $\tilde{\epsilon}$ et μ_r la permittivité et la perméabilité relative du milieu respectivement. Dans la suite de ce travail, on considérera un milieu non magnétique (μ_r sera égale à 1).

La fonction diélectrique relative $\tilde{\epsilon}(\omega)$, qui caractérise la réponse optique du milieu à une excitation électromagnétique, est généralement complexe :

$$\tilde{\epsilon}(\omega) = \epsilon_1 + i\epsilon_2 = \tilde{n}^2 \quad (\text{II-8})$$

ϵ_1 et ϵ_2 représentent respectivement les parties réelle et imaginaire de $\tilde{\epsilon}(\omega)$ et \tilde{n} l'indice de réfraction :

$$\tilde{n}(\omega) = n + ik \quad (\text{II-9})$$

Il existe plusieurs méthodes numériques pour la résolution des équations de Maxwell par exemple la FDTD, les éléments finis,.... En ce qui nous concerne, nous allons utiliser un logiciel commercial : Comsol MultiPhysics. Evidemment, en plus de ces équations, il faut ajouter les conditions aux bords. Pour simuler un système ouvert nous adoptons les conditions absorbantes PML.

3- Rayonnement d'un dipôle électrique oscillant

Le modèle le plus simple de l'émission spontanée est le dipôle électrique oscillant : l'électron oscille au sein de l'atome, constitue, avec le noyau un dipôle oscillant.

Si on suppose le noyau immobile et que l'oscillation de l'électron est sinusoïdale, le moment dipolaire est donnée alors par : $\vec{\Pi}(t) = \vec{\Pi}_0 \sin(\omega t)$. (II-10)

L'intensité du rayonnement du dipôle électrique oscillant (c'est à dire l'énergie passant par unité de surface et de temps dans la direction de propagation) vaut :

$$I(r, \theta) = \frac{\Pi_0^2 \omega^4}{32\pi^2 c^3 \epsilon_0} \frac{\sin^2 \theta}{r^2} \quad (II-11)$$

L'intensité rayonnée est maximale dans le plan équatorial et nul le long de l'axe du dipôle électrique oscillant. Cela signifie que le dipôle électrique oscillant ne rayonne pas d'énergie le long de son axe. La dépendance angulaire de $I(\theta)$ est illustrée à la figure (9).

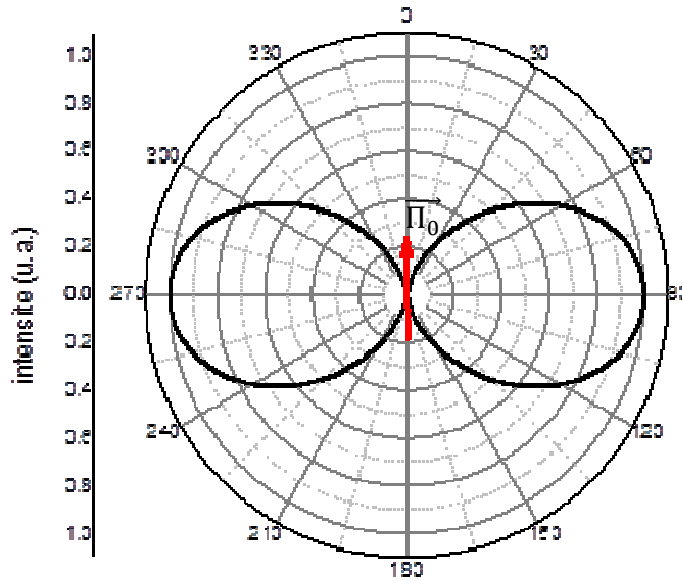


Figure (9) : Le rayonnement d'un dipôle électrique oscillant

La puissance totale émise par le dipôle isolé est donnée par l'intégrale sur tout l'espace de l'intensité $I(r, \theta)$, soit :

$$P_0 = \frac{\Pi_0^2 \omega^4}{12\pi c^3 \epsilon_0} \quad (\text{II-12})$$

4- Facteur de Purcell

L'émission spontanée est due à l'interaction entre un atome et un champ électromagnétique. Ainsi, cet effet n'est pas une caractéristique intrinsèque des atomes et l'émission spontanée est fortement dépendante de l'environnement électromagnétique dans lequel ils évoluent. Par conséquent, en contrôlant la densité locale de mode électromagnétique, il est possible d'augmenter ou de diminuer le taux d'émission spontanée [7]. Le facteur de Purcell mesure l'augmentation ou la diminution du taux d'émission spontanée sous l'effet d'un environnement.

Si on prend un dipôle électrique oscillant, alors le facteur de Purcell est défini comme le rapport entre la puissance émise par le dipôle dans l'environnement considéré par la puissance émise par le même dipôle dans le cas où il est dans le vide [8]

$$F = \frac{P}{P_0} \quad (\text{II-13})$$

Parfois il est plus intéressant de prendre un lieu de référence autre que le vide. Par exemple, une structure multicouche sans nanoparticules, pour étudier l'effet de la présence de ces derniers. C'est effectivement le cas dans le présent travail.

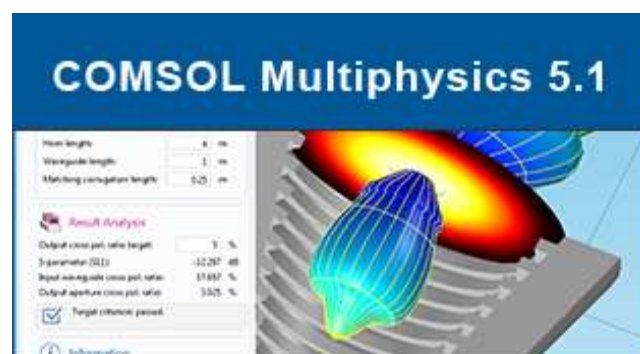
5- Simulation avec COMSOL Multi-physics :

Comsol est un environnement interactif de modélisation et de simulation de problèmes physique et d'ingénierie basés sur des équations aux dérivées partielles. Son langage de programmation est une extension du langage MATLAB associé à une interface graphique. Numériquement, il se base sur la méthode des éléments finis et fournit plusieurs algorithmes de solveur. Ce qui permet son utilisation dans plusieurs domaines : électromagnétisme, mécanique des fluides, structure mécanique,....

Dans notre étude nous avons utilisé la version 5.1 qui apporte un assez bon niveau de clarté à notre simulation.

Les avantages :

- Touche plusieurs domaines (électronique, électrotechnique, Médecine...).
- Étude 0D, 1D, 2D, 3D.
- Programmation directe.
- Utilise une interface graphique [9].



La version COMSOL 5.1

Les inconvénients:

- Nécessité de disposer d'un ordinateur puissant et performant (carte graphique, espace RAM...) [9].
- Coût financier

6- Positionnement du problème

Pour notre travail, nous avons simulé la structure 3D d'une OLED simplifiée (figure 10a). Un dipôle électrique oscillant simulant une molécule luminescente est positionné au centre de la couche émissive. On dispose un nanotube d'Argent de différentes dimensions, en des positions différentes.

Toutes les simulations se feront pour deux cas : dipôle oscillant parallèlement à l'axe Ox puis parallèlement à l'axe Oz. Le spectre d'oscillation correspond au spectre visible : de 400nm à 800nm. Des couches PML entours la totalité de la structure afin de simuler un dipôle isolé.

Les propriétés optiques des différents matériaux sont tirées de la référence [3] pour les matériaux organiques et de [4] pour l'argent (figure 10b).

Notre but est d'étudier l'effet du nanotube sur la puissance émise (facteur de Purcell) par un dipôle oscillant parallèle à Ox (ou Oy) et un autre parallèle à Oz. Ce qui est recherché est de réduire l'émission du second (émission principalement transversale) et d'augmenter l'émission du premier dipôle (intensité maximale émise vers l'extérieur)

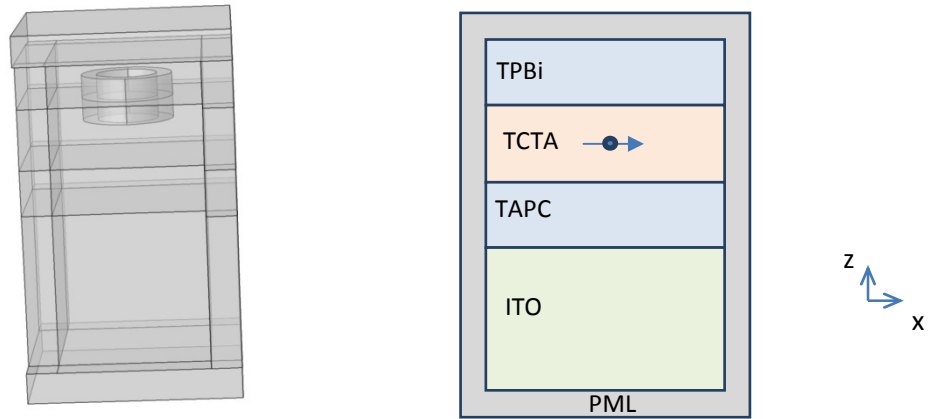
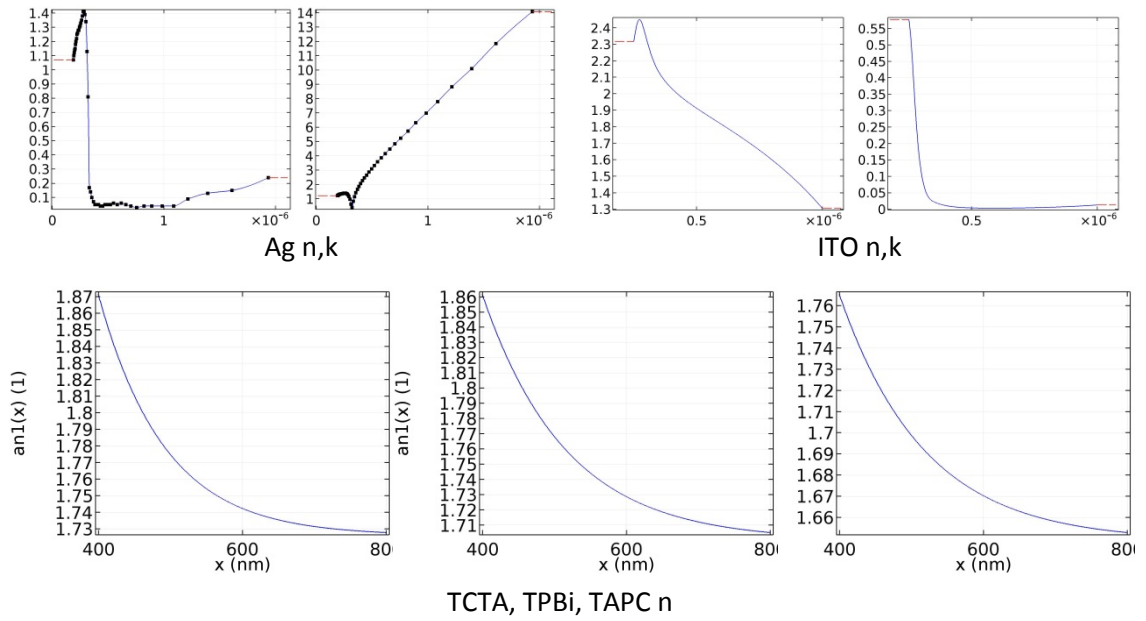


Figure (10): Domaine de calcul avec le nanotube d'Argent et les couches des matériaux organiques d'une OLED.



Chapitre 3. Résultats

1- Introduction

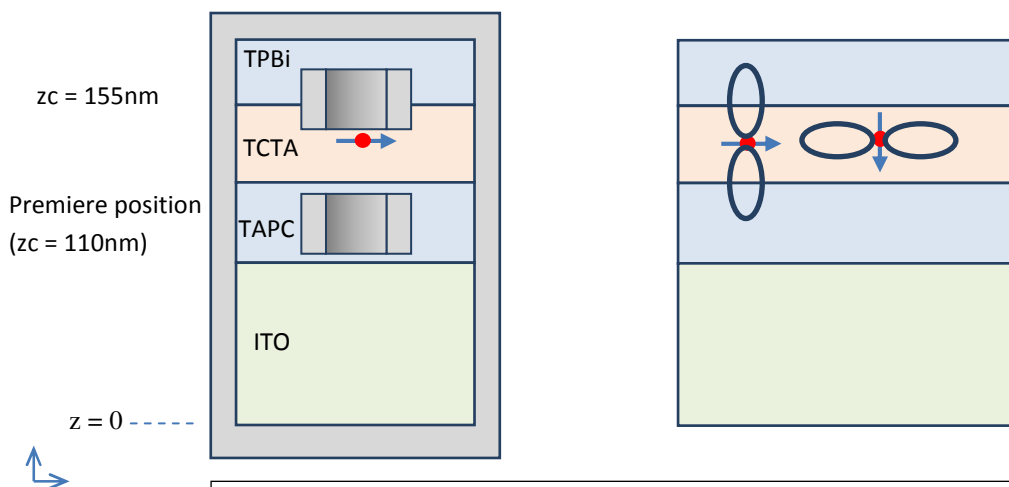
Dans ce dernier chapitre nous présentons les résultats d'une étude paramétrique afin d'optimiser l'effet de la directivité : étude en fonction de la position du nanotube, de son diamètre et de son épaisseur.

2- Étude en fonction de la position

On dispose un nanotube d'Argent d'une hauteur de 30nm, un diamètre intérieur de 20nm et extérieur de 30nm à l'intérieure d'une structure multicouches. Nous avons fait varier sa position de $z_c=110\text{nm}$ à 160nm (la valeur ici est la distance entre la base inférieure du nanotube et l'origine qui est la base inférieure du multicouches, figure (11)). Pour chacune de ces positions, on simule et on calcule les facteurs de Purcell pour un dipôle selon Ox et selon Oz, notés respectivement F_{pxy} et F_{pz} .

Le facteur de Purcell est calculé à travers la puissance totale émise par le dipôle à travers une surface l'entourant en présence et sans la présence du nanotube. Donc le facteur que nous calculons n'est pas normalisé par rapport au vide mais par rapport au multicouche sans nanotube. Pour retrouver le facteur tel qu'il est défini il faut le multiplier par l'indice de réfraction, soit ici environ 1.8.

Le spectre de fréquence d'oscillation est le même pour toute les simulations, c'est le spectre du visible, soit en longueur d'onde de 400nm à 800nm.



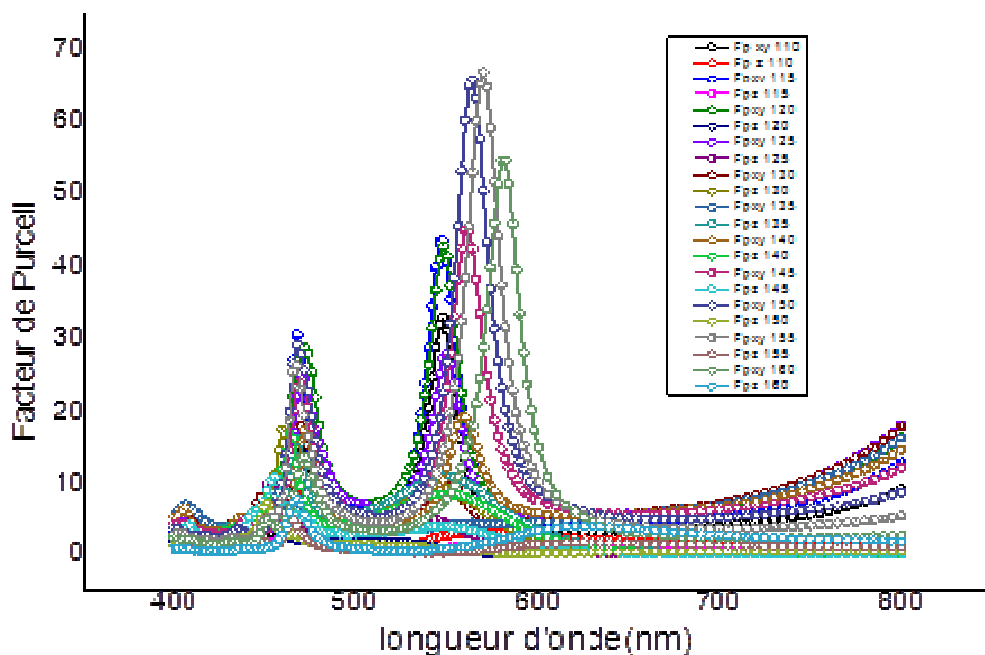
Figure(11) : un nanotube d'Argent à l'intérieure d'une structure multicouches.

Sur la figure (11) on donne toutes les courbes F_{pxy} et F_{pz} pour les valeurs de z_c allant de 110nm à 160nm par pas de 5nm, en fonction de la longueur d'onde. On remarque dans cette figure l'apparition de deux pics autour de 570nm et de 468nm, on les notera pic1 et pic2 respectivement.

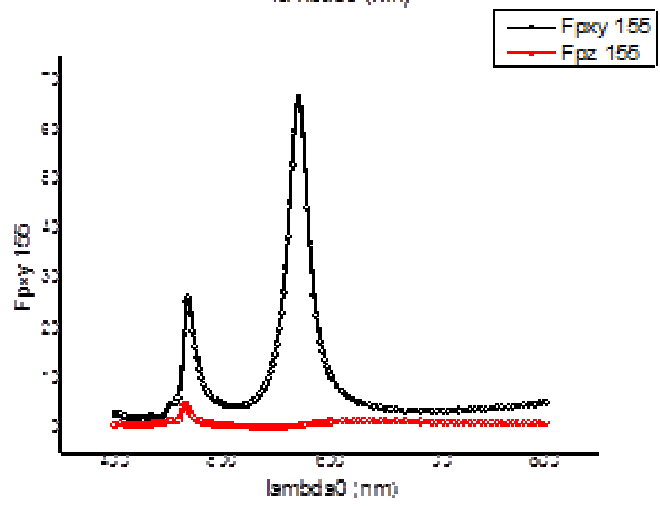
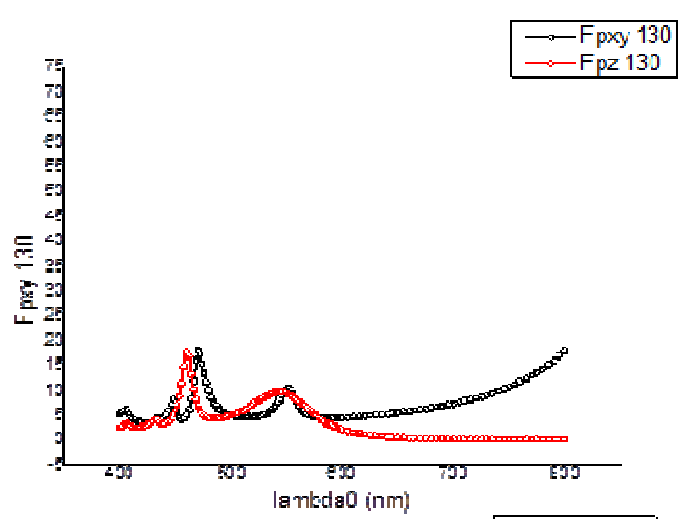
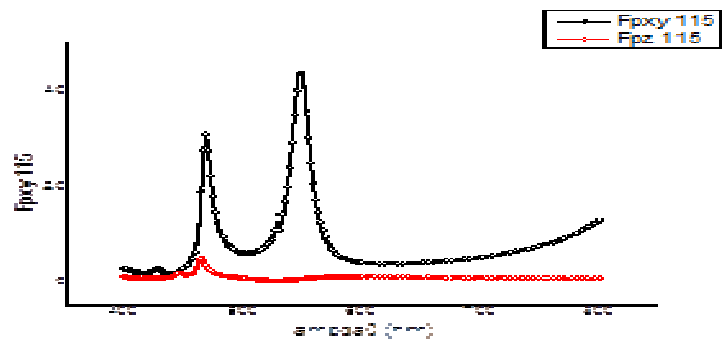
Pour une meilleure clarté, nous avons réduit le nombre de courbes en ne gardant que $z_c = 115\text{nm}$, 130nm et 155nm sur la figure(12). On remarque alors que pour certaines configurations, le facteur de Purcell F_{pxy} est beaucoup plus grand que F_{pz} . Autrement dit, le rayonnement du dipôle suivant Ox est exalté alors que le rayonnement du dipôle suivant Oz est très peu exalté voir atténué sur certains domaine de longueur d'onde.

Cette exaltation anisotropique est beaucoup plus prononcée pour $z_c = 155\text{nm}$ et 115nm , elle est très faible pour $z_c = 130\text{nm}$. On peut voir sur la figure(13) l'amplitude du pic1 de F_{pxy} tracée en fonction de la position z_c du nanotube. On retrouve ici ce maximum d'exaltation en deux positions 110nm et 155nm et un creux autour de 130nm.

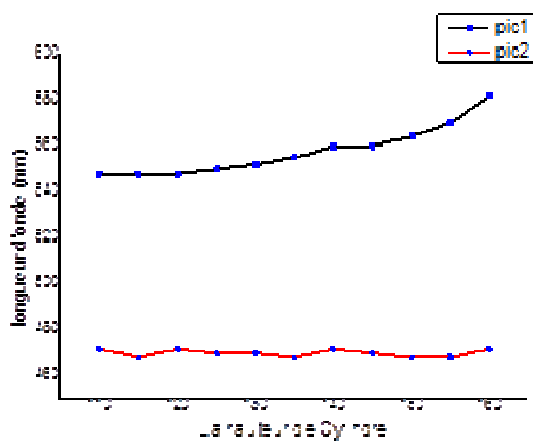
La figure(13) donne les longueurs d'onde de pic1 et pic2 en fonction de z_c . Le pic2 est pratiquement à une longueur d'onde constante alors que le pic1 présente une légère variation monotone entre 545nm et 580nm.



Figure(11) : Facteur de Purcell, la $Z_{cyl} = 110\text{nm}$ à 160nm en fonction de la longueur d'onde.



Figure(12) : Facteur de Purcell F_{xy} en fonction de la longueur d'onde.



Figure(13) : Longueur d'onde en fonction de Hcyl

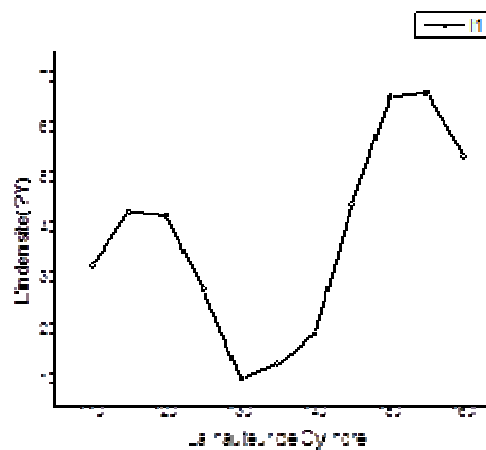


Figure (14) : l'intensité en fonction de Hcyl

3- Étude en fonction du diamètre interne du nanotube

De l'étude précédente, nous avons déduit que la position optimal est obtenue pour $z_c=155\text{nm}$. Dans cette position, on fait varier le diamètre interne sans modifier l'épaisseur du nanotube. On ne s'intéressera ici qu'au pic1.

Les figures (15) représentent la variation de Facteur de Purcell F_{pxy} et F_{pz} en fonction de la longueur d'onde. On remarque que la longueur d'onde de pic1 ne varie pas de manière significative. Alors que son amplitude varie fortement. Elle est inversement proportionnelle au diamètre interne comme on peut le voir sur la figure (15).

Il est donc plus intéressant de diminuer le rayon du nanotube, mais on ignore jusqu'à quelle valeur. On n'a pas pu aller plus loin dans la simulation car cela impliquerai des temps de calcul beaucoup plus grands.

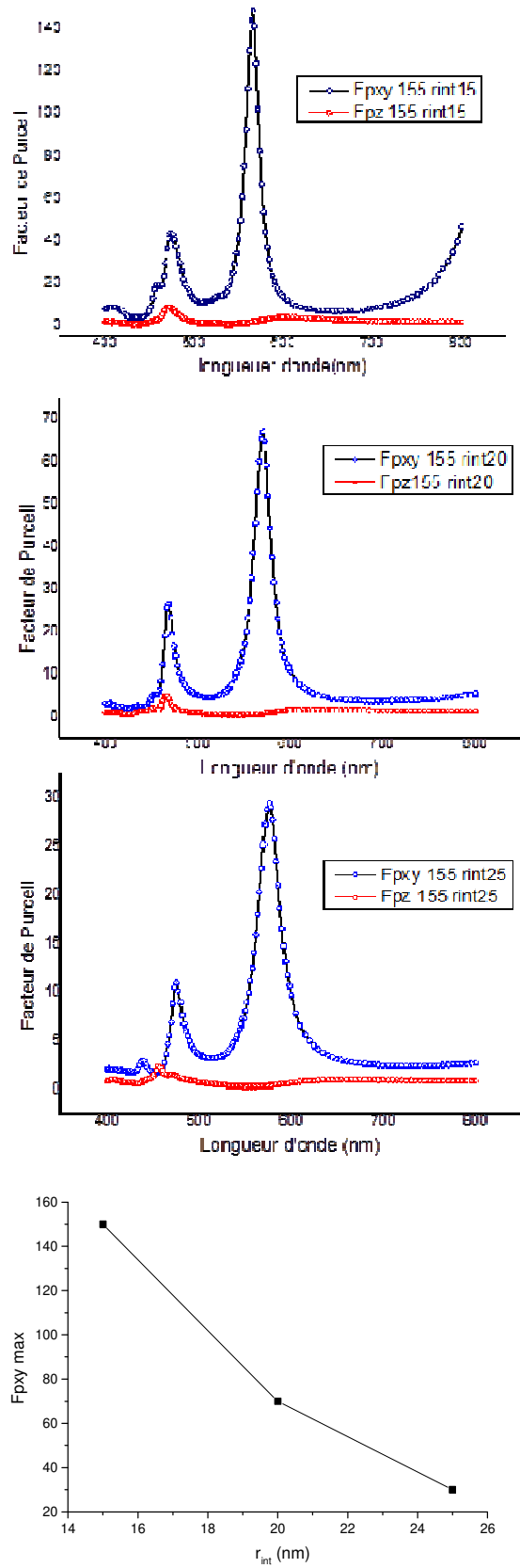


Figure (15) : étude en fonction de diamètre avec un rayon intérieure (rint) différent et la même épaisseur (eps=10 nm).

4- Étude en fonction de l'épaisseur du nanotube

On reprend la même position optimale $z_c=155\text{nm}$ et on fixe le rayon interne à 20nm . On fait varier le rayon externe : 30nm , 35nm et 40nm , soit les épaisseurs : 10nm , 15nm et 20nm .

Sur la figure (16) on trouve les facteurs F_{pxy} et F_{pz} . On constate une différence notable avec l'étude précédente : la longueur d'onde de pic1 diminue et s'approche de pic2 . Ce dernier reste à la même longueur d'onde. Cependant, ce rapprochement s'accompagne d'une diminution de pic1 et une augmentation de pic2 . Ce comportement est indiqué sur la figure (17).

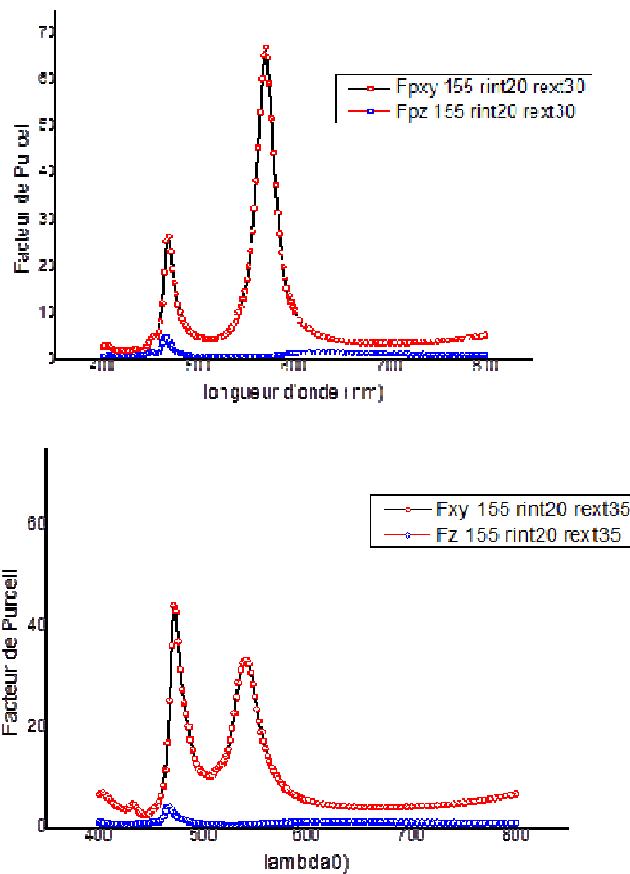


Figure (16) : étude en fonction d'épaisseur avec un même rayon intérieure et des différents rayons extérieurs.

- (a) Rayon extérieure $r_{ext}=30\text{nm}$
- (b) Rayon extérieure $r_{ext}=35\text{nm}$

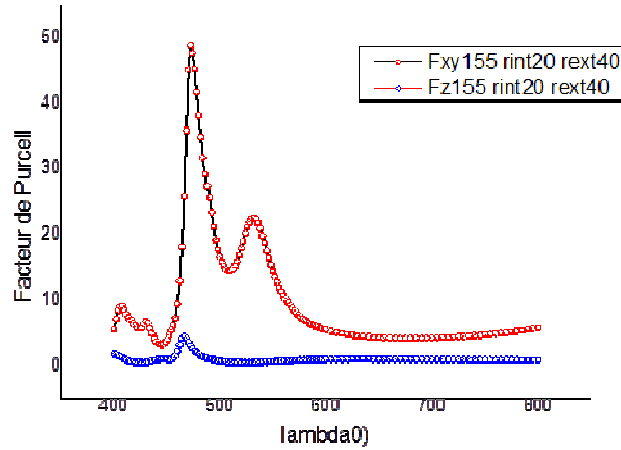


Figure (16) (suite): étude en fonction d'épaisseur avec un même rayon intérieure et des différents rayons extérieurs.

(c) Rayon extérieure rext=40mm

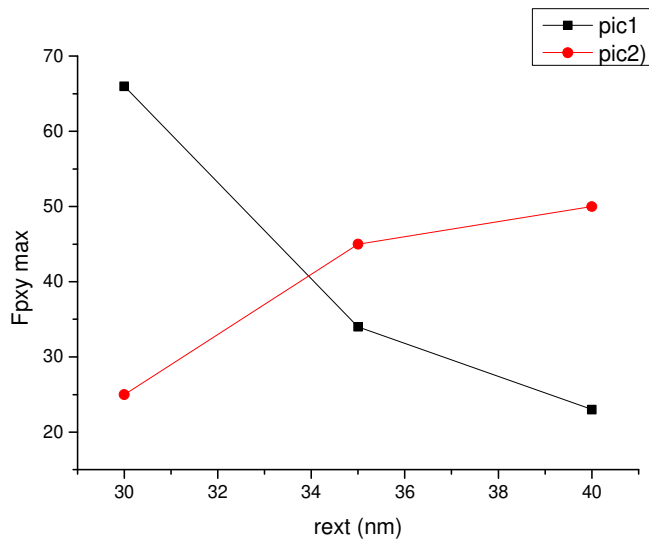


Figure (17) : Facteur de Purcell maximum (Fpxy max) en fonction du rayon extérieur rext (nm).

5- Plasmons et champ lointain

Observons le comportement du champ électrique sur la surface du nanotube pour comprendre l'augmentation du facteur de Purcell. Pour cela on reprend la position optimale déduite des simulations précédente, soit $z_c=155\text{nm}$, et deux longueurs d'onde : 570nm qui correspond à un maximum et 650nm qui correspond à un minimum local du facteur de Purcell figure (18).

On donne sur la figure (18) les modules des champs électriques sur la surface du nanotube dans le cas du rayonnement d'un dipôle parallèle à l'axe Ox. On remarque que l'intensité du champ est beaucoup plus grande lorsque le facteur de Purcell est grand (l'échelle est logarithmique). Nos simulations ont montré aussi que la composante du champ parallèle au dipôle est globalement en phase avec le dipôle dans le premier cas et globalement en opposition dans le second cas.

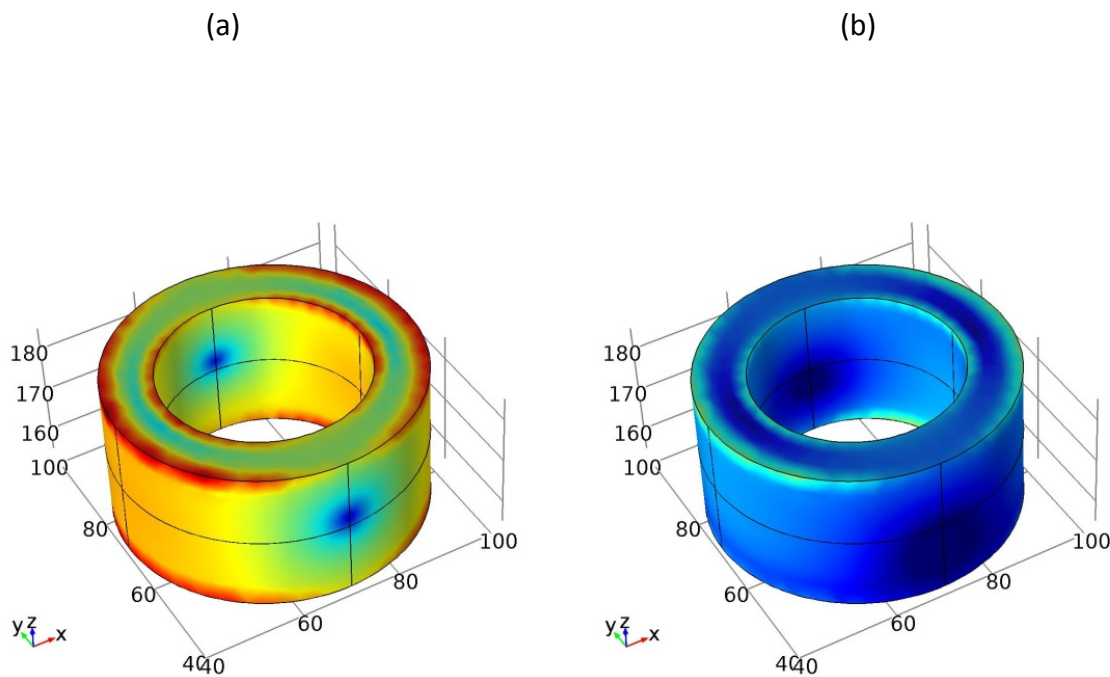
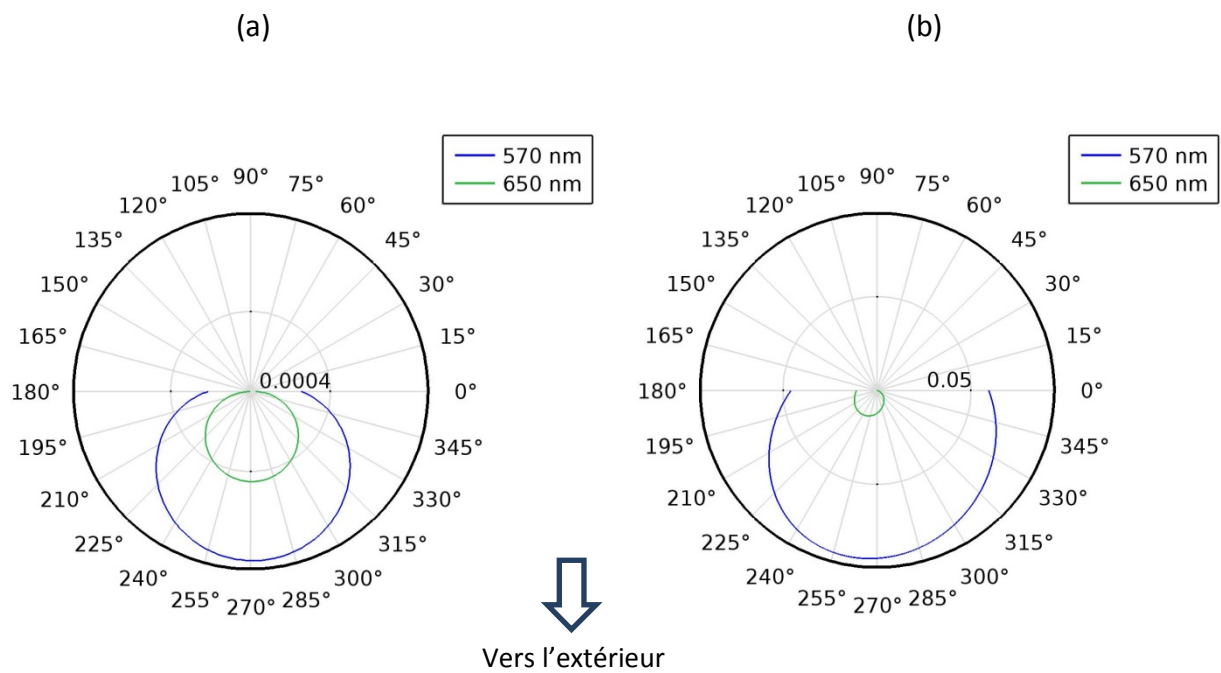


Figure (18): Module champ électrique sur la surface du nanotube pour les longueurs d'onde (a) 570nm et (b) 650nm . L'échelle est logarithmique et est la même pour les deux figures.



Figure(19): Diagramme polaire du champ lointain (a) sans nanotube et (b) avec nanotube.

La figure (19) montre la distribution angulaire de champ lointain. On constate en premier l'intensité du champ qui est beaucoup plus grande en présence du nanotube que sans. Ce qui est cohérent avec la grande valeur du facteur de Purcell.

On peut remarquer aussi l'augmentation de la diffusion dans les directions latérales ce qui peut être intéressant dans les applications d'éclairage.

Conclusion

Une partie non négligeable de la luminescence produit dans la couche émissive d'une OLED est perdue par des diffusions et des réflexions qui ne permettent pas son extraction. Pour diminuer ces pertes, on propose d'inclure dans le multicouche des nanotubes d'Argent. Notre objectif est trouver les propriétés optimales concernant la position, le diamètre et l'épaisseur, qui favorisent le rayonnement vers l'extérieure de l'OLED.

Nous avons montré que la présence du nanotube augmente fortement la puissance émise des dipôles qui émettent vers l'extérieur (dipôle Ox) au détriment des dipôles qui émettent principalement vers l'intérieur (dipôle Oz).

Nous avons trouvé deux positions optimales du nanotube (115nm et 155nm) juste au-dessus et juste au-dessous du dipôle. Le facteur de Purcell (normalisé) est d'environ 70 (soit 126 réellement).

Nous avons montré aussi que la diminution du diamètre du nanotube, avec la même épaisseur, induit une augmentation du facteur de Purcell. Cependant l'augmentation de l'épaisseur induit une diminution du facteur de Purcell. Dit autrement, le facteur de Purcell est inversement proportionnel au diamètre et à l'épaisseur.

Références

- [1] M. Pope, H.P Kallmann, Magnante, "Electroluminescence in organic crystals," *J.Chem.Phys.* **38**. 2042 (1963).
- [2] C. W. Tang and S. A. Van Slyke , " Organic Electroluminescent Diode," *Appl. Phys. Lett.* 51, 913 (1987).
- [3] W.K.Lee, Y.H. Huang, K.C. Pan, T.A. Lin, T. Chatterjee, K.T. Wong, C.C. Wu, "Quantitative analyses of high electroluminescence efficiency of thermally activated delayed fluorescence emitters based on acridine–triazine hybrids" *J. Photon.* **3**, 032105 (2018).
- [4] P. B. Johnson and R. W. Christy. Optical constants of the noble metals, *Phys. Rev. B.***6**.4370 (1972)
- [5] S.Chen et H. Sing Kwok*Center for Display Research, Department of Electronic et Computer Engineering, The Hong Kong University of Science & Technology, Clear Water Bay, Kowloon, Hong Kong. **18**. 1 (2010).
- [6] C. F. Madigan, M.-H. Lu, and J. C. Sturm) Center for Photonics and Optoelectronic Materials, Department of Electrical Engineering, Princeton University, Princeton, New Jersey 08544.**76**.1956 (2000).
- [7] L. Ferrari, D. Lu, D. Lepage, and Z.Liu, Department of Electrical and Computer Engineering, University of California, San Diego, 9500 Gilman Drive, La Jolla, California 92093, USA, **22**, 4301 (2014).
- [8] R. E. Krasnok, C. R. Simovski, P. A. Belov, et Y. S. Kivshar, *Nanoscale.* **6**, 7354 (2014).
- [9] A.BOULGHEB, A.KROUM, Initiation à l'utilisation du logiciel de simulation COMSOL Application à la structure MOS, Mémoire présenté pour l'obtention du Diplôme de Master en Electronique, Université de JIJEL, Promotion (2016).

Table des matières

Dédicaces.....	3
Introduction.....	4
Chapitre 1. Généralités sur les OLED.....	6
1- Introduction.....	6
2- Les semi-conducteurs organiques.....	6
3- Les diodes électroluminescentes organiques (OLED)	8
a. Principes de fonctionnement des OLED	8
b. Injection de charges	10
c. Transport de charges.....	11
4- La directivité dans les OLED.....	11
Chapitre 2. Modélisation	14
1- Introduction.....	14
2- Les équations de Maxwell	14
3- Rayonnement d'un dipôle électrique oscillant	16
4- Facteur de Purcell.....	17
5- Simulation avec COMSOL Multi-physics :.....	18
6- Positionnement du problème	19
Chapitre 3. Résultats	21
1- Introduction.....	21
2- Étude en fonction de la position	21
3- Étude en fonction du diamètre interne du nanotube.....	24
4- Étude en fonction de l'épaisseur du nanotube	26
5- Plasmons et champ lointain	28
Conclusion	30
Références.....	31

Résumé

L'OLED est un composant optoélectronique, composé de nano-couches de matériaux semi-conducteurs organiques. Une partie non négligeable de la luminescence générée dans la couche électroluminescente est perdue en raison de la diffusion et de la réflexion qui ne permettent pas son extraction. Afin de réduire ces pertes, On propose d'inclure dans la couche une structure de matériau conducteur (Ag, Au, Cu, Al...) dont le but est de favoriser le rayonnement vers l'extérieur de l'OLED. Les résultats préliminaires sont encourageants et des études paramétriques sont encore nécessaires pour optimiser l'effet de directivité.

Mots clés : OLED, Comsol, Facteur de Purcell.

Abstract

OLED is a type of optoelectronic element, made up of nano-layers of organic semiconductor materials. A significant part of the luminescence generated in the electroluminescent layer is lost due to scattering and reflection which does not allow its extraction. In order to reduce these losses, we propose to include in the layer a non-structural structure of conductive materials (Ag, Au, Cu, Al ...) whose purpose is to promote the radiation towards the outside of the OLED. Preliminary results are encouraging and parametric studies are still needed to optimize the directivity effect.

Keywords: OLED, Comsol, Purcell factor.