

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

République Algérienne démocratique et populaire

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

جامعة سعد دحلب البليدة 1

Université SAAD DAHLAB de BLIDA 1

كلية التكنولوجيا

Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك

Département d'Électronique



# Mémoire de Master

Filière : Télécommunications

Spécialité : Systèmes de télécommunications

Présenté par

BENDJEDDAH Aimen

## Etude et simulation des diodes électroluminescentes organiques(OLED)

Proposé et encadré par : Mme. Mehdi Samira

Année universitaire 2022-2023

## ملخص

في هذا العمل ، نحن مهتمون بمحاكاة الصمام الثنائي العضوي للضوء. الهدف من هذه الرسالة هو دراسة الخصائص الكهربائية والبصرية للديودات العضوية الباعثة للضوء. سمحت لنا المحاكاة العددية لـ OLED باستخراج خصائص كثافة الجهد الحالية JV ، جهد الطاقة الخفيف PV. هدفت الدراسة إلى تأثير تباين كثافة العيوب في الطبقتين HTL و ETL ، كما أن هدف دراستنا هو تحسين سمك المكون على أداء الصمام الثنائي ؛ وهي: التوزيع المكاني للإكسيتونات من نوع المفردة ، ومعدل إعادة تركيب لانجفين. تشير النتائج ، من خلال دراسة الخصائص الكهربائية والبصرية التي تم الحصول عليها من هذه المحاكاة ، إلى أن التوازن الذي يعمل بين آليات الحقن والنقل يضمن الأداء الجيد لهياكل OLED

**الكلمات المفتاحية:** جهد العتبة ، المواد العضوية ، ناقلات الشحنة ، منطقة إعادة التركيب ، الإضاءة.

## Résumé

Dans ce travail, nous intéressons à la simulation d'une diode électroluminescente organique. L'objectif de ce mémoire est d'étudier les propriétés électriques et optiques des diodes électroluminescentes organiques. La simulation numérique de l'OLED nous a permis d'extraire les caractéristiques de densité de courant-tension J-V, La puissance lumineuse-tension P-V. L'étude a visé l'effet de la variation de la densité de défauts dans les deux couches HTL et ETL, également l'objet de notre étude est l'optimisation de l'épaisseur du composant sur les performances de la diode ; à savoir : distribution spatiale des excitons de type singlet, le taux de recombinaison Langevin. Les résultats, en étudiant les propriétés électriques et optiques obtenue à partir de cette simulation indiquent l'équilibre qui s'opère entre les mécanismes d'injections et de transmission assure de bonnes performances des structures OLED.

**Mots clés:** Tension de seuil, matériau organique, porteurs de charges, recombinaison Langevin, la luminance.

## ABSTRACT

In this work, we are interested in the simulation of an organic light-emitting diode. The objective of this thesis is to study the electrical and optical properties of organic light-emitting diodes. The numerical simulation of the OLED allowed us to extract the characteristics of current density-voltage J-V, Light power-voltage P-V. The study aimed the effect of the variation, the density of defects in the two layers HTL and ETL, also the object of our study is the optimization of the thickness of the component on the performances of the diode. ; namely: spatial distribution of singlet-type excitons, the Langevin recombination rate. The results, by studying the electrical and optical properties obtained from this simulation, indicate the balance that operates between the injection and transmission mechanisms ensures good performance of OLED structures.

**Keywords :** Turn-on voltage, organic material, charge carriers, Langevin recombination, luminance.

## DEDICACES

Je dédie ce mémoire à

Toute ma famille, mon père Mustapha, et ma mère Zahia, qui m'ont éclairé sur le chemin de la vie par leur grand soutien et leurs encouragements, par leur dévouement exemplaire et les immenses sacrifices qu'ils ont durant mes études et qui ont toujours aimé me voir réussir, je les remercie pour tout ce qu'ils font pour moi.

Mes chers frères : Mohamed lamine, Otman, Akram et ma sœur adorée : maha et à tout ma famille qui m'ont permis de vivre dans un environnement calme et paisible.

Je dédie également ce travail à tous mes camarades de master 2, en particulier les collègues qui m'ont aidé dans mes études.

Tous les professeurs qui nous ont enseigné car si nous sommes là aujourd'hui c'est grâce à vous tous, alors merci beaucoup.

## REMERCIEMENTS

Je commence par remercier Dieu Tout-puissant de m'avoir donné la volonté et la force d'accomplir ce travail avec succès.

Je tiens particulièrement à remercier ma Promotrice Dr. Mme. Mahdi Samira d'avoir accepté ma supervision et son intérêt constant à me guider dans le développement de mon travail et pour toute l'aide qu'elle m'a apportée, sa patience, ses précieux conseils et ses encouragements.

Je remercie également mon Co-promoteur Pr. Aissat Abdelkader.

Je remercie également tous les professeurs du département d'électronique, en particulier les professeurs qui m'ont aidé à mener à bien ce travail.

Je tiens également à remercier les membres du jury qui m'ont honorés d'avoir accepté le jugement de mon travail.

Je tiens également à remercier tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la bonne réalisation de ce modeste ouvrage

# TABLES DES MATIERES

RESUME

DEDICACES

REMERCIEMENTS

TABLE DES MATIERES

Liste des symboles et abréviations

Liste des figures et tableaux

INTRODUCTION GENERALE.....1

## CHAPITRE I

### GENERALITE SUR LES SEMI –CONDUCTEURS ORGANIQUES

1.1. Introduction.....	3
1.2 Les semi-conducteurs organiques .....	3
1.3. Les familles des molécules conjuguées .....	7
1.4. La notion de semi conducteur de type P et N .....	8
1.5. Définition de l'électroluminescence.....	8
1.6. Les diodes électroluminescentes organiques (OLED) .....	9
1.7. Applications des OLEDs.....	10
1.8. Molécules utilisées pour les OLEDs .....	11
1.9. Conclusion.....	12

## 2. CHAPITRE II

### ETAT DE L'ART DES DIODES ELECTROLUMINESCENTES

ORGANIQUES.....	13
2.1. Introduction.....	13
2.2. Principe de fonctionnement des OLEDs.....	13
2.3. Structure d'une diode électroluminescente organique.....	15
2.4. Injection des charges.....	17
2.5. Transport des charges.....	18
2.6. Recombinaison.....	18

2.7. Modèle de Langevin.....	18
2.8. Le rendement des OLEDs.....	19
2.9. Conclusion.....	19
3. CHAPITRE III	
SIMULATION DES DIODES ELECTROLUMINESCENTES ORGANIQUES.....	20
3.1. Introduction.....	20
3.2. Effet de la variation de densité de défauts sur les propriétés optoélectronique des OLEDs.....	20
3.3. Effet de la variation de l'épaisseur du composant sur les propriétés optoélectronique OLED.....	30
3.4. Conclusion.....	33
CONCLUSION GENERALE.....	34
REFERENCES BIBLIGRAPHIQUES.....	36
Annexe.....	40

## LISTE DES SYMBOLES ET DES ABREVIATION

AL : Aluminium.

Alq 3 : Tris (8-hydroxyquinoline) Aluminium.

BC : Bande de conduction.

BV : Bande de conduction.

ETL : Couche de transport d'électrons (Electron Transport Layer).

EML : Couche d'émission (Emissive Layer).

EQE : Rendement quantique externe.

h : Constante de Planck.

Hill : Couche d'injection de trous (Hole Transport Layer) .

HOMO : Niveau orbital moléculaire le plus haut occupé.

ITO :Oxyde d'indium dopé à l'étain .

K : Constante de Planck.

LED : Diode électroluminescente.

LiF : Fluorure de Lithium.

LUMO : Niveau Orbital moléculaire le plus bas inoccupée.

LCD : Affichage à cristaux liquide.

OPV : Cellule solaire photovoltaïque organique (Organic Light Emitting Diode) .

OLED : Diode électroluminescente organique (Organic Light Emitting Diode)

PLED : Diode électroluminescente organique à base de polymère.

q : charge d'électron.

SCO : Semi-conducteur organique.

TAPC :1 ,1Bis[(di-4-tolylamino)phenyl]cyclohexane .

T : température

V : tension

L : luminance

I : courant

## LISTE DES FIGURES ET TABLEAUX

Figure 1.1	La base structurale des matériaux organiques.....	4
Figure 1.2	Représentation des orbitales électroniques d'une molécule d'éthylène.....	5
Figure 1.3	Représentation des niveaux LUMO et HOMO d'une molécule dans l'état fondamental .....	6
Figure 1.4	Schéma d'une diode électroluminescente organique.....	9
Figure 1.5	Montre des écrans, (a) iPAD OLED arrivait 2023,2024, (b) LG OLED Transparent TV 2023.....	11
Figure 2.1	Structure d'une diode électroluminescente organique.....	14
Figure 2.2.	Principe de fonctionnement d'une OLED monocouche.....	15
Figure 2.3	Structure à couche simple.....	16
Figure 2.4	Structure bicouches.....	16
Figure 2.5	Structure multicouches.....	17
Figure 3.1	Modèle de simulation OLED basée : ITO/TAPC/Bphen/LiF/Al.....	21
Figure 3.2	Caractéristique I-V sous une densité de défauts dans la couche HTL varie entre $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ sous une densité de courant $250 \text{ mA/cm}^2$ à $T=300 \text{ K}$ .....	22
Figure 3.3	Caractéristique J-V pour une densité de défauts dans la couche HTL varie entre $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ sous une densité de courant $250 \text{ mA/cm}^2$ à $T=300 \text{ K}$ .....	23
Figure 3.4	Puissance émise pour une densité de défauts dans la couche HTL varie entre $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ à $T=300 \text{ K}$ .....	24
Figure 3.5	Densité des excitons type singulet de l'OLED pour une densité de défauts dans la couche HTL varie entre $2.10^{16}$ et $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ sous une densité de courant $250 \text{ mA/cm}^2$ à $T=300 \text{ K}$ .....	24
Figure 3.6	caractéristique L-V sous une densité de défauts dans la couche HTL varie entre $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ sous une densité de courant $250 \text{ mA/cm}^2$ à $T=300 \text{ K}$ .....	25
Figure 3.7	Caractéristique I-V sous une densité de défauts dans la couche ETL varie entre $2.10^{16}$ et $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ sous une densité de courant $250 \text{ mA/cm}^2$ à $T=300 \text{ K}$ .....	26

Figure 3.8	Caractéristique J-V sous une densité de défauts dans la couche ETL varie entre $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , densité de courant $250\text{mA}/\text{cm}^2$ à $T=300\text{K}$ .....	27
Figure 3.9	Puissance émise sous une densité de défauts dans la couche ETL varie entre $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , densité de courant de $250\text{mA}/\text{cm}^2$ à $T=300\text{K}$ ...	28
Figure 3.10	Densité des excitons type singulet de l'OLED pour une densité de défauts dans la couche ETL varie entre $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ densité de courant $250\text{mA}/\text{cm}^2$ à $T=300\text{K}$ .....	28
Figure 3.11	caractéristique L-V sous une densité de défauts dans la couche ETL varie entre $2.10^{16}\text{cm}^{-3}$ et $2.10^{19}\text{cm}^{-3}$ sous une densité de courant $250\text{mA}/\text{cm}^2$ à $T=300\text{K}$ .....	29
Figure 3.12	(I-V) caractéristiques pour composant OLEDs (A-E) dont l'épaisseur du composant varie de 40nm à 120nm.....	31
Figure 3.13	Puissance émise pour composant OLEDs (A-E) dont l'épaisseur du composant varie de 40nm à 120nm.....	31
Figure 3.14	Densité des excitons type singulet de l'OLE pour composant OLEDs (A-E) dont l'épaisseur du composant varie de 40nm à 120nm.....	32
Figure 3.15	Caractéristique L-V pour différents pour composant OLEDs (A-E) dont l'épaisseur du composant varie de 40 à 120 nm.....	33
Tableau 3.1	Paramètres de simulation des couches TAPC et Bphen.....	22
Tableau 3.2	comparaison entre les paramètres pour différentes densité de défauts côté HTL.....	26
Tableau 3.3	comparaison entre les paramètres pour différentes densité de défauts côté ETL.....	30

## INTRODUCTION GENERALE

Depuis une vingtaine d'années la recherche dans le domaine de l'électronique organique connaît un essor considérable grâce notamment à la possibilité de réaliser des dispositifs de grandes surfaces et sur substrats flexibles aussi en raison de ses applications innovantes et variées. C'est ainsi que de nouveaux composants à couches actives organiques ont pu être utilisés pour réaliser des dispositifs optoélectroniques pour la génération de la lumière. Ces dispositifs, en occurrence des diodes électroluminescentes organiques (OLED) représentent une grande importance pour la lumière du futur ; elles sont devenues en très peu de temps des produits incontournables grâce notamment aux systèmes permettant de meilleurs rendements, plus lumineux, plus facile à fabriquer, et en parallèle avec une durée de vie plus importante et une consommation réduite d'électricité. Par ailleurs de nouvelles technologies permettent de réduire la consommation électrique des sources d'éclairage qui est considérée comme un problème, surtout dans les lieux publics.

L'utilisation des semi conducteurs inorganiques est plus précisément le silicium (SI) est très répandue dans l'électronique, à cause de leurs excellentes propriétés de conduction électronique de ses semi-conducteurs, inhérents à leurs bonnes organisations structurales, qui sont d'une importance primordiale pour les composants optoélectroniques. Les télécommunication (réception, satellite, téléphone ...) à l'automobile (radar..) et en dernier par l'informatique (processeur, mémoire...). Cependant, les hautes fréquences de fonctionnement sont obtenues grâce à des procédés de fabrications à haute température : ces derniers sont de prix élevés. La préoccupation majeure des industriels est d'abaisser le coût de production : par le développement rapide des semi-conducteurs organiques (SCO). Les SCO ne sont pas destinés à remplacer le silicium, ceci revient à leur faibles mobilités intrinsèques. Cependant, le processus de fabrication des SCO à faibles températures a orienté les chercheurs vers toutes nouvelles faibles applications à faible coût. Car, ces dispositifs peuvent être fabriqués sur tout type de substrat qu'il soit flexible ou pas par des procédés de solution.

La recherche dans le domaine de l'électronique organique s'est considérablement développée en raison de ses applications originales et variées, on cite :les diodes électroluminescentes organiques (OLEDs),occupent un des premiers rangs, les transistors organiques en couches minces (OTFT),les cellules solaires organiques (OPV),les capteurs chimiques (OCS)et les photodétecteurs (OPD) .

L'objectif de ce projet est de faire l'étude et la simulation des diodes électroluminescentes organiques.

L'utilisation des OLEDs pour l'émission de la lumière (éclairage), et pour l'affichage et principalement, une conception par simulation en utilisant le logiciel SILVACO-ATLAS.

Ce manuscrit est constitué de trois chapitres, il est organisé comme suit :

Le premier chapitre est consacré à l'étude théorique des semi-conducteurs organiques et leurs propriétés, ainsi que les diodes électroluminescentes organiques (OLEDs) : principe de fonctionnement de LEDs, domaines d'applications des OLEDs, molécules utilisées pour la fabrication des OLEDs.

Le deuxième chapitre présente l'état de l'art des diodes électroluminescentes organiques .Ce chapitre est basé sur le principe de fonctionnement d'une OLED monocouche .Ainsi que le rendement des OLEDs .

Le troisième chapitre est consacré pour l'étude de l'effet de la densité de défauts côté HTL et côté ETL sur les performances de l'OLED. Également, on a étudié l'effet de la variation de l'épaisseur sur l'OLED.

# CHAPITRE I

## GENERALITES SUR LES MATERIAUX ORGANIQUES

### 1.1. Introduction

En guide d'introduction pour ce premier chapitre, a pour but de présenter l'état de l'art des connaissances actuelles qui concerne la physique de semi conducteurs organiques, ainsi que leurs domaines d'application.

Les diodes électroluminescentes organiques sont des composants réalisés par les superpositions de matériaux semi-conducteurs organiques et les couches minces. La composition des matériaux organiques est l'atome de carbone, et bien souvent associés à des atomes d'hydrogène, d'oxygène, d'azote et éventuellement des métaux. L'électronique organique recouvre deux types de composants, les molécules de faibles masses molaires appelées « petites molécules » et les polymères. La différence entre ces matériaux se situe au niveau de la taille de la molécule, et leur point commun étant d'être des molécules conjuguées

Dans ce chapitre, nous allons mener une étude théorique des semi-conducteurs organiques. Nous allons parler sur le principe de fonctionnement d'une LED et son domaine d'application, la structure d'une OLED, les molécules utilisées pour les OLEDs. Enfin, nous terminerons le chapitre par une conclusion.

### 1.2. Les semi-conducteurs organiques

Les semi-conducteurs organiques sont la couche active des composants organiques. C'est un composé organique sous la forme d'un cristal, qui présente des propriétés similaires aux semi-conducteurs inorganiques. Ces propriétés de conduction par les électrons et les trous, ces matériaux ont conduit à la naissance de l'électronique organique ou l'électronique sur substrat plastique. Les molécules utilisées dépendent du carbone.

Il ya deux types de semi conducteurs organiques : des petites molécules permettent de réaliser des films électroluminescents par évaporation sous vide et des polymères sont mis en œuvre à partir de solution, leur point commun étant d'être des molécules conjuguées [1-15].

### 1.2.1. L'atome de carbone et la liaison $\pi$

Les semi conducteurs organiques sont constitués principalement par l'atome de carbone comme indiqué sur la figure 1.1, et souvent sont reliés à des atomes d'hydrogène, la nature des liaisons entre les atomes de carbones qui leur donne ce caractère semi conducteur [15-25]. Le carbone est un élément du tableau périodique qui appartient à la classe des semi-conducteurs. Il possède 4 électrons de valence, la configuration électronique de la couche externe de l'atome de carbone ( $2S^2 2P^2$ ) avec 2 électrons non appariés dans les deux orbitales atomiques 2P, la troisième orbitale 2P étant non occupée, est très instable. Ainsi à l'état excité un électron de la couche externe va passer de l'orbitale 2S à l'orbitale 2P [3].

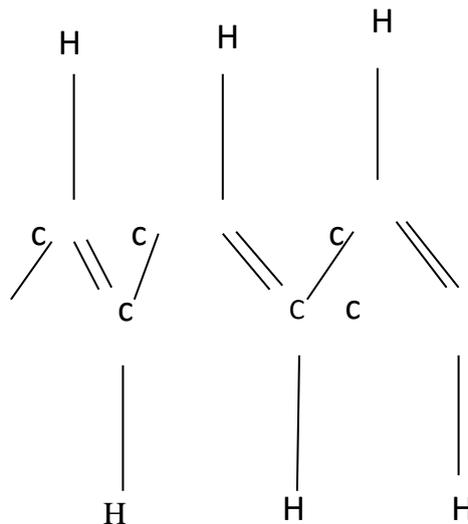


Figure 1.1. La base structurale des matériaux organiques

La création de liaisons covalentes avec d'autres atomes, entraîne pour l'atome de carbone la fusion des orbitales atomiques 2S avec les orbitales atomiques 2P, ce qu'on appelle hybridation pour former des nouveaux orbitaux hybrides. Parmi les différents types d'hybridation qui peuvent survenir ( $SP^3$ ,  $SP^2$ ,  $SP$ ) celle qui nous intéresse est l'hybridation de type  $sp^2$ .

En effet, c'est ce type d'hybridation qui se produit lors de la formation des liaisons doubles entre atomes de carbone qui constitue l'ossature des systèmes conjugués.

Ce type d'hybridation est illustré sur la figure 1.2 dans le cas d'une molécule d'éthylène. Elle est obtenue par la combinaison de l'orbitale atomique 2S avec deux des trois orbitales atomiques 2P ( $2P_x$  et  $2P_y$ ) qui deviennent trois orbitales atomiques hybrides  $SP^2$  formant une géométrie trigonale coplanaire de  $120^\circ$ .

Ainsi, après la formation du double liaison, l'atome de carbone est entouré de trois orbitales hybrides  $sp^2$  et d'une orbitale  $2p_z$  orientée perpendiculairement au plan des orbitales  $sp^2$ .

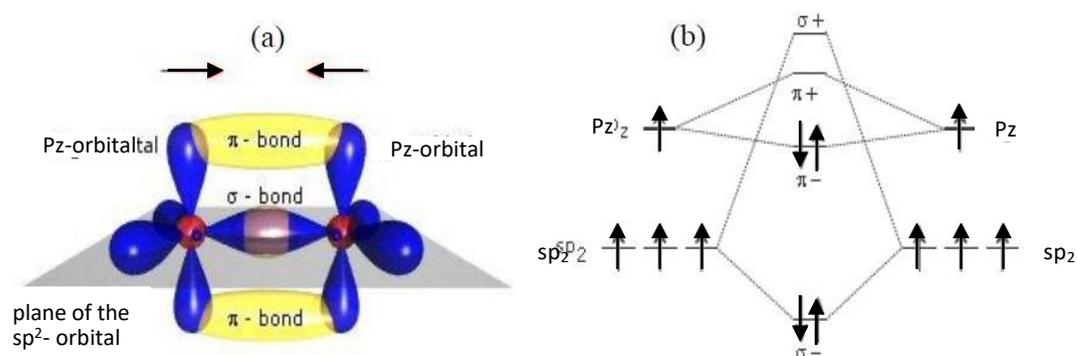


Figure 1. 2. Représentation des orbitales électroniques d'une molécule d'éthylène

Chaque orbitale hybride  $SP^2$  et par recouvrement les orbitales de chacun des atomes forme une liaison covalente. Toutefois, rappelons que l'atome de carbone possède 4 électrons de valence et les orbitales hybrides  $SP^2$  ne forment des liaisons qu'avec trois voisins ; il reste donc un électron non apparié autour de l'atome. Cet électron, se trouve dans l'orbitale atomique  $2P_z$  ; le recouvrement latéral des orbitales  $2P_z$  de chaque atome de carbone contenant chacune un électron non apparié forme l'orbitale moléculaire  $\pi$ . En résumé l'hybridation donnant lieu à la double liaison entre atomes de carbone entraîne la formation de deux types d'orbitales :

- Les orbitales hybrides  $sp^2$ , qui sont au nombre de trois et qui contiennent chacune un électron. Elles se forment par recouvrement axial des liaisons  $\sigma$  entre atomes de carbone.
- L'orbitale  $2P_z$ , perpendiculaire au plan des orbitales  $sp^2$  qui contient un électron; le recouvrement latéral de ces orbitales forme la liaison  $\pi$ .

### 1.2.2. Les niveaux d'énergies HOMO /LUMO dans une OLED

A l'équilibre thermodynamique, les électrons se placent au niveau énergétique  $\pi$ , la liaison est dite liante, les orbitales liantes donnent la bande HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital). Quand des électrons sont injectés dans le système, ils vont occuper des états au niveau des liaisons anti-liantes  $\pi^*$ , les orbitales anti-liantes donnent la bande LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital), La différence entre le niveau LUMO et HOMO définit le band-gap du matériau organique ; elles sont apparentées dans la figure 1.4 respectivement à la bande de valence et à la bande de conduction dans les semi-conducteurs inorganiques [4].

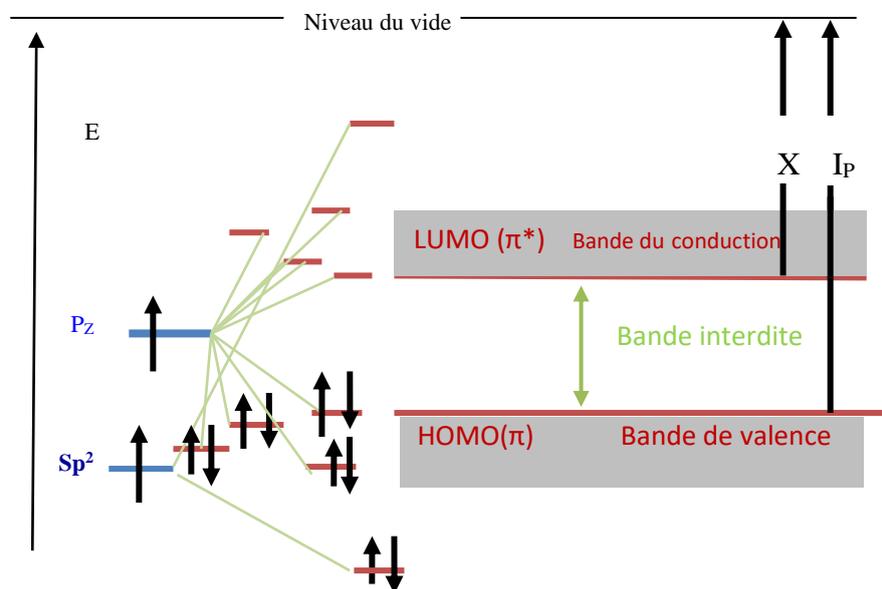


Figure 1.3. Représentation des niveaux LUMO et HOMO d'une molécule dans l'état fondamental.[4]

### 1.2.3. Les polarons et les excitons

#### 1.2.3.1. Les polarons

L'apparition d'une charge sur la chaîne conjuguée (par dopage ou par injection via un champ électrique entre deux électrodes) ne se traduit pas nécessairement par la présence d'un électron dans la bande LUMO (ou d'un trou dans la bande HOMO)[5].

La charge déforme localement la chaîne (la déformation s'étend sur 3 à 4 unités monomériques seulement). Pour déformer la chaîne, d'un point de vue énergétique, est de créer un défaut par permutation des simples et doubles liaisons (on passe donc localement d'une forme aromatique à une forme quinonique). Le défaut issu de cette déformation est appelé polaron[20-26].

#### 1.2.3.2. Les excitons

L'absorption d'un photon ou la recombinaison d'un électron et d'un trou génère une excitation ou une quasi-particule neutre appelée "exciton", qui peut être considérée comme une paire électron-trou associée à une réaction de Coulomb créé par excitation optique ou par double injection de porteurs de charges [6].

### 1.3. Les familles des molécules conjuguées

#### 1.3.1. Les polymères

Les polymères conjugués constituent la grande famille qui s'est développée pour la fabrication des diodes électroluminescentes organiques. La première fabrication de diode a été à base de PVK ou poly (N-vinly)carbazole) associé à un dopant. Ce polymère conjugué émet dans le bleu vers 430 nm. Le pvk est également utilisé pour faire des diodes blanches lorsqu'il est combiné ou dopé avec des petites molécules [7].

#### 1.3.2. Petites molécules

Les petites molécules sont complémentaires des polymères. Ils peuvent être utilisés directement en couche mince, ces matériaux sont souvent peu solubles dans les solvants organiques. Ainsi, les films minces sont fabriqués à l'aide de technique de dépôt par évaporation sous vide thermique, ces dernières permettant dans des conditions optimales de contrôler l'épaisseur des couches avec une précision allant jusqu'à un nanomètre.

#### 1.4. La notion de semi conducteur de type P et N

Les semi-conducteurs organiques ne sont pas intentionnellement dopés .Cependant, on a cru longtemps qu'il pouvait exister, comme en microélectronique classique, des semi-conducteurs naturellement de P ou N .En réalité, le caractère P ou N d'un semi-conducteur organique provienne en fait de la capacité des électrodes à pouvoir injecter des trous ou des électrons dans les semi-conducteurs.

Car, au niveau du contact entre un métal et semi-conducteur, il existe une barrière .Si la barrière pour l'injection des trous est plus faible que celle pour l'injection des électrons, alors le semi-conducteur de type P. Si la barrière d'injection d'électrons est plus faible que la barrière d'injection de trous, le semi-conducteur sera de type N .alors, le caractère P ou N sera distingué par la nature de l'électrode.

En générale, les métaux permettant d'injecter des électrons, c'est –à-dire ayant un faible travail de sortie, ont tendance à s'oxyder facilement et ne pourront alors pas injecter de porteurs dans le semi-conducteur .C'est pour cela que la majorité des semi-conducteurs organiques, ayant une HOMO de 5 eV, seront des semi-conducteurs de type P[8].

#### 1.5. Définition de l'électroluminescence

On appelle "électroluminescence" la conversion non thermique de l'électricité en lumière. L'électroluminescence organique est obtenue à partir de molécules et polymères contenant des atomes de carbone, azote et oxygène, par opposition à l'électroluminescence inorganique, basée sur des éléments comme l'arsenic, le gallium ou le phosphore [9].

La première fois que le phénomène d'électroluminescence a été découvert en 1936 dans le cas des matériaux inorganiques, lorsque « Destariau et al » [10-11], observe l'électroluminescent on applique un champ important (centaine de volt) à partir de la poudre de Zn phosphore prise en sandwich comme un isolant entre deux électrodes.

En 1960 les LEDs (Light-Emitting Diode) devient commercialisée ; elle était conçue à base de GaAsP et émettait dans le rouge avec un très faible rendement de l'ordre de 0,1 lumen/Watt. Dès 1964, des affichages à base de LEDs étaient disponibles. Cependant, leur production était très limitée et le coût était très élevé. Dans les années 70, des LEDs vertes, orange et jaunes sont apparues sur le marché. Les matériaux généralement utilisées dans les LEDs inorganiques sont des éléments composés du tableaux périodiques III et V comme [6] :

GaAs, GaP, AlGaAs, InGaP, GaAsP, GaAsInP et AlInGaP. À partir du milieu des années 80, avec l'usage du couple GaAsGaAlAs, les performances des LEDs ont permis de les utiliser en extérieur. L'arrivées des diodes à base de : SiC, ZnSe ou GaN pour que la couleur bleu soit disponible, mais avec une faible efficacité comparativement aux d'autres diodes [12].

#### 1.6. Les diodes électroluminescentes organiques (OLED)

Durant les dernières années, la recherche dans le domaine des composants organiques concernant les diodes électroluminescentes organiques(OLED) est considérablement accélérée.

Les investissements nationaux et privés sont largement stimulés par les applications potentielles des composants caractérisés par un faible cout, la légèreté, une faible consommation énergétique, la possibilité de réaliser des écrans couleurs plats. Les diodes électroluminescentes organiques (OLED) ont une structure multicouche avec deux électrodes qui prennent en sandwich un film de matériau organique électroluminescent, elle émet de la lumière lorsqu'elle est traversée par un courant électrique [15].

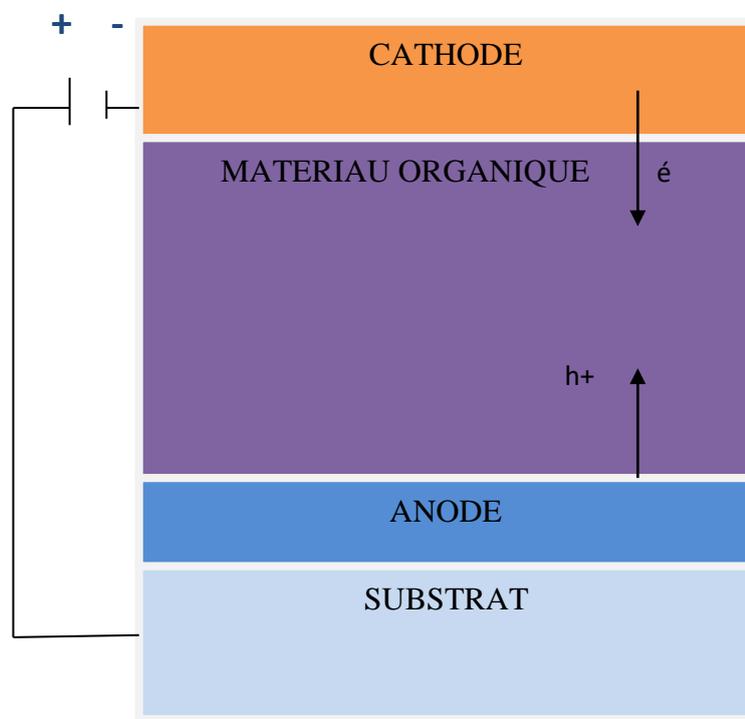


Figure 1.4. Schéma d'une diode électroluminescente organique

## 1.7.Applications des OLEDs

De nos jours, les écrans plats connaissent un succès considérable auprès du public. La technologie actuelle est dominée par les écrans à cristaux liquides (LCD) et ceux à plasma ; une nouvelle technologie émerge, utilisant des diodes électroluminescentes (OLED) à base de matériaux organiques. Ces dispositifs possèdent les propriétés classiques des matières plastiques (élasticité, ductilité, résistance à la rupture...), permettant ainsi d'obtenir des écrans extra-plats et souples. Les domaines d'utilisation de cette nouvelle technologie sont nombreux (téléphone portable, ordinateur, télévision...).

Ces applications portables favorisent le rendement lumineux élevé d'OLED pour une meilleure lisibilité en plein soleil et en effet les OLED ont l'avantage de consommer moins d'énergie lors du développement de la haute luminance. Des recherches intensives ont donnés des OLED avec des couleurs remarquables, le rendement du dispositif et la stabilité opérationnelle [16-17] .

- ✓ Petits écrans souples divers (portables, appareils photos, baladeurs, porte photo...), la console portable PlayStation Vita de Sony.
- ✓ Écrans plats de plus grande dimension (*home-cinema* 8K)
- ✓ Affichage tête haute (*head up display* ou HUD) à destination des avions ou des automobiles,
- ✓ Éclairage d'ambiance.
- ✓ Gadgets en tout genre (vêtements lumineux, stylos lumineux, ruban dépliant).

OLED trouve pour le moment des applications d'écran pour des équipements de petite taille (téléphones mobiles, appareils photos numériques, cadre photo numérique), ou dédiés à la flexibilité (bracelet numérique, oreillette bleu tooth...)

La technologie OLED est même utilisable en guise d'éclairage écologique.

Les progrès de la recherche et des constructeurs franchiront tôt ou tard les obstacles actuels pour porter OLED au firmament des technologies qui nous entoureront demain. La figure 1.5.Montre des écrans iPad OLED arrivait 2023 et LG OLED Transparent TV 2023.



Figure 1.5 .Montre des écrans, (a) iPad OLED arrivait 2023, (b) LG OLED TV 2023.

### 1.8. Molécules utilisées pour les OLEDs

Les semi-conducteurs organiques utilisés dans les OLEDs se répartissent en plusieurs catégories selon leur fonction. Ainsi, les OLEDs à hétérojonctions sont constituées de diverses couches appelées [18] :

- Couche d'injection de trous (Hole Injection Layer, HIL)
- Couche de transport de trous (Hole Transport Layer, HTL)
- Couche de transport d'électrons (Electrons Transport Layer, ETL)
- Couche émissive (Emitting Layer, EML)
- Couche de blocage des trous (Hole Blocking Layer, HBL)
- Couche de blocage des électrons (Electron Blocking Layer, EBL)

#### 1.8.1. Matériaux de transport d'électrons (ETL)

Il est nécessaire d'introduire des matériaux pour transporter les électrons provenant de la cathode jusqu'à la zone de recombinaison. Les matériaux organiques ayant la capacité de conduire des électrons, sont nommés accepteurs ou transporteurs d'électrons. Un bon matériau transporteur d'électrons se caractérise par une importante mobilité des électrons et un LUMO proche du travail de sortie de la cathode.

Le matériau transporteur d'électrons le plus utilisé dans les OLEDs est le Tri(8-hydroxyquinoline) d'aluminium ( $\text{Alq}_3$ ).

### 1.8.2. Matériaux de transport et d'injection des trous (HTL, HIL)

Les matériaux organiques conduisant les trous sont dits donneurs d'électrons ou transporteur de trous. Un bon transporteur de trous est caractérisé par un HOMO autour de 5.4eV. Une couche d'injection des trous (HIL) optimise les niveaux HOMO et réduit la barrière d'énergie à l'interface avec l'ITO (source de charge positive). Elle est donc bénéfique pour l'injection de charges et pour le rendement de la diode.

Parmi les polymères les plus utilisés pour l'injection des trous est [20] :

- PEDOT: PSS (Polyéthylendioxythiophène dopé par le polystyrène sulfonate)
- TPD: N,N'-diphényl-N, N'-(3-méthylphényl)-N,N'-biphényl-benzidine.
- 1-Naphdata : 4, 4', 4'' –Tris (N-(1-naphthyl)-N-phénylamino)-triphenylamine
- $\alpha$ -NPD : N, N' - di(naphtalène-1-yl)- N,N' –diphénylibenzidine

### 1.9. Conclusion

Le premier chapitre a été consacré à la description des polymères  $\pi$  conjugués, par la suite on a fait une représentation du phénomène de l'électroluminescence, et le principe de fonctionnement des diodes électroluminescentes organiques en générale, également une représentation des familles des polymères électroluminescents été faites.

## CHAPITRE II

# ETAT DE L'ART DES DIODES ELECTROLUMINESCENTES ORGANIQUES

### 2.1. Introduction

Dans cette partie nous présenterons le principe de fonctionnement des diodes électroluminescentes organiques. Dans un premier temps, nous définirons le phénomène de l'électroluminescence au sein des matériaux organiques puis nous analyserons les applications des OLEDs et mécanismes mis en jeu.

### 2.2. Principe de fonctionnement des OLEDs

Une OLED se compose d'une couche organique électroluminescente prise en sandwich entre deux électrodes. Lorsqu'un courant passe d'une électrode à l'autre, le matériau organique émet de la lumière dont la couleur dépend du matériau utilisé. Pour pouvoir observer l'émission de la lumière, l'une des deux électrodes doit être transparente. L'ITO (Indium Tin Oxide) est bien connu comme anode car il satisfait aux trois milieux : transparence, conductivité et adéquation.

Le processus d'émission de lumière dans les OLEDs est basé sur l'injection de charges positives et de charges négatives depuis l'anode et la cathode respectivement dans les niveaux HOMO et LUMO des couches organiques. Ces derniers se recombinent pour former des excitons qui peuvent se désexciter radiativement et donne naissance à la lumière [21-22]. La figure 2.1 représente une structure d'une diode électroluminescente organique typique.

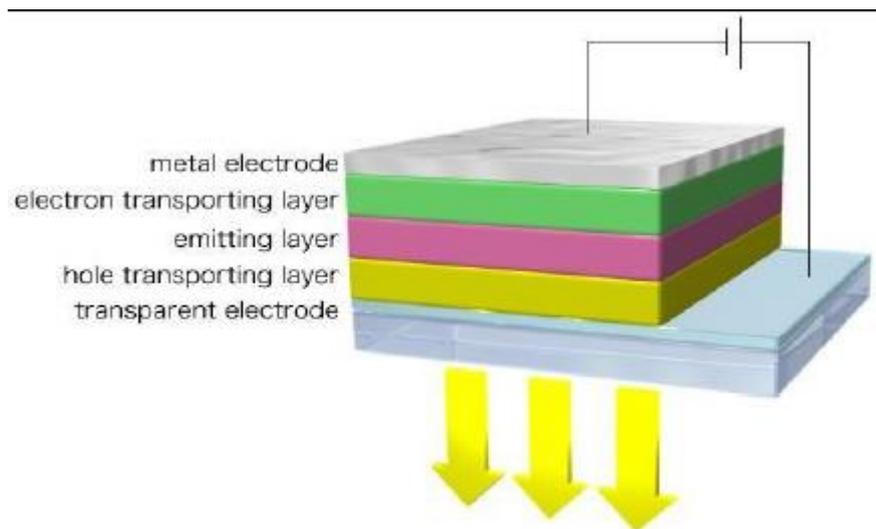


Figure 2.1. Structure d'une diode électroluminescente organique [23].

L'injection des électrons est faite à l'aide d'un matériau de faible travail de sortie, alors que les trous est faite par un matériau à fort travail de sortie. Le matériau organique peut être soit un polymère, soit des petites molécules déposées sous vide. Dans les deux cas, il faut ajouter des couches favorisant le transport des trous (Hole Transport layer, HTL) et des électrons (Electron transport layer, ETL) à la structure de base, en effet, pour une bonne injection de charges, le travail de sortie de l'anode doit être proche du niveau HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital), et celui de la cathode du niveau LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) du matériau organique électroluminescent.

Le principe des OLED est basé sur la recombinaison de charge négative (électron) et charge positive (trous) pour produire une énergie électromagnétique dont la longueur d'onde est directement reliée à la largeur de la bande interdite de la couche active. Les quatre processus physiques fondamentaux conduisant à l'électroluminescence [24] sont : L'injection des porteurs de charges, leurs transport vers la zone d'émission suivie de la formation d'excitons et l'émission radiative comme le montre la figure 2.2.

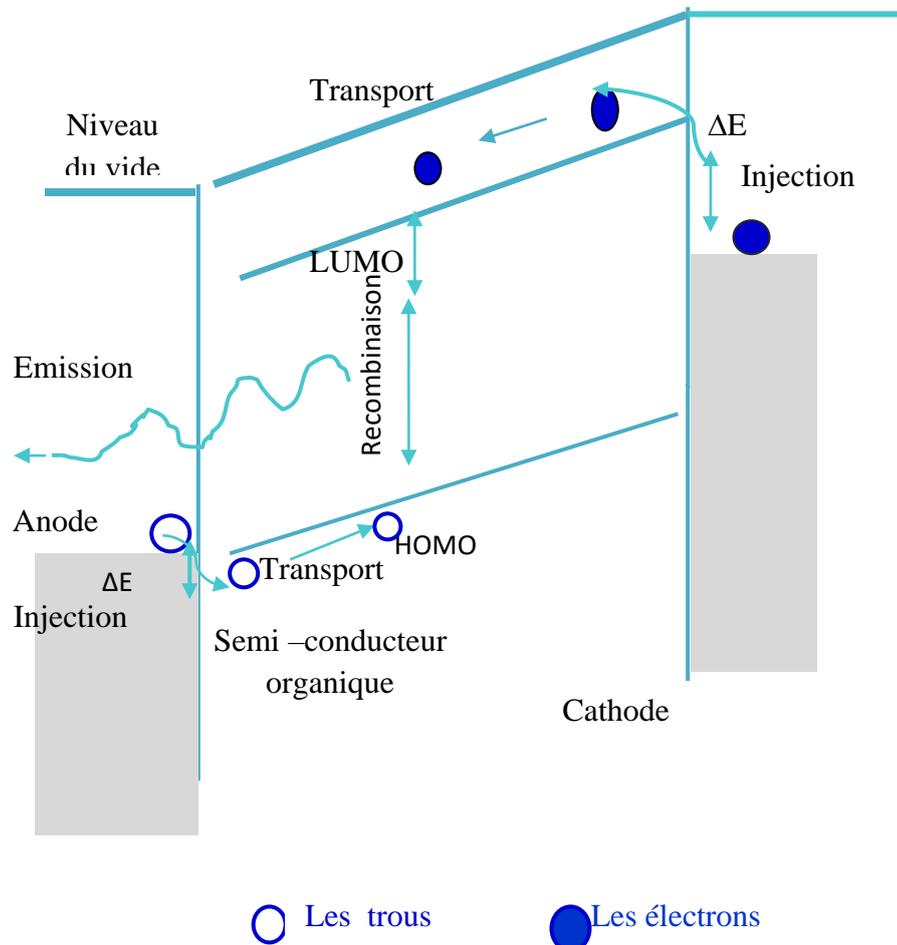


Figure.2.2 : Principe de fonctionnement d'une OLED monocouche [25].

## 2. 3. Structure d'une diode électroluminescente organique

### 2.3.1. Structure à couche simple

Dans une structure à couche simple (figure 2.3), même si les niveaux d'énergies de la cathode et de l'anode sont précisément ajustés aux niveaux moléculaires de la couche organique, le transport des électrons et des trous n'est pas équilibré de fait des différences de mobilité des électrons et des trous. Le porteur majoritaire peut alors traverser l'ensemble de la structure sans rencontrer de porteur de charge de signe opposé, cette situation gaspille de l'énergie et affecte l'efficacité [26].

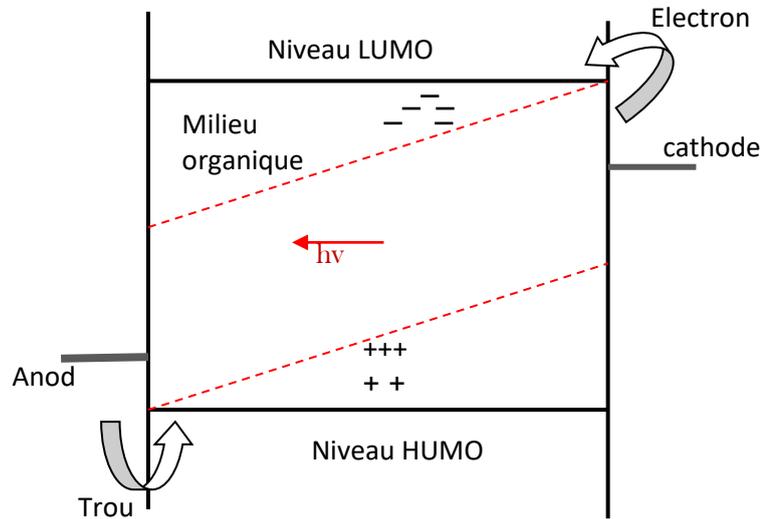


Figure 2.3. Structure à couche simple

### 2.3.2. Structure bicouches

Une structure bicouche permet d'obtenir un meilleur équilibre en optimisant les niveaux d'énergies entre l'anode et la couche conductrice des trous et entre la cathode et la couche de transport des électrons (figure 2.4). L'injection des porteurs et leurs transports sont améliorés.

La structure bicouches permet aussi l'accumulation de charges à l'interface de deux couches organiques actives, facilitant ainsi leurs injections. Les charges de signes opposés sont bloquées à l'interface entre les deux couches organiques ce qui favorise la recombinaison. La recombinaison et la formation de l'exciton intervient dans le matériau organique possédant le gap d'énergie le plus faible. Cette structure bicouche permet d'autre part d'éloigner l'exciton des électrodes ce qui conduirait à une extinction de la luminescence [27].

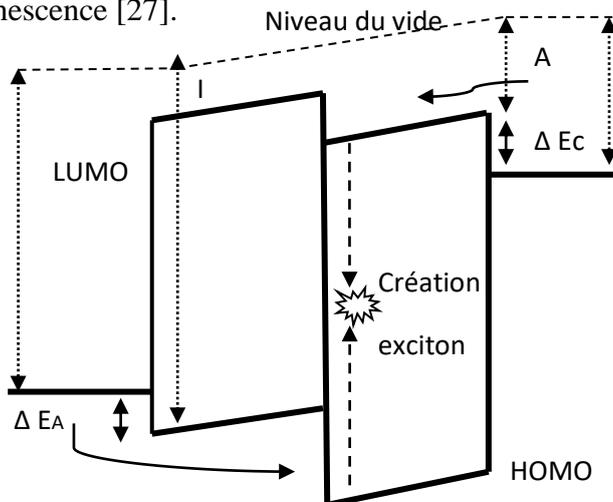


Figure 2.4. Structure bicouches

### 2.3.3. Structure multicouches

Une autre amélioration consiste à introduire un troisième matériau spécialement choisi pour l'efficacité de sa luminescence. Les trois matériaux organiques peuvent être maintenant séparément optimisés pour le transport d'électron, pour le transport de trou et pour la luminescence. Cette structure multicouche (figure 2.5) améliore non seulement les performances d'émission, mais aussi la durée de vie des LEDs organiques [28-30].

D'autres améliorations sont aussi à noter comme :

- L'adjonction de couches de blocage de porteurs de charges.
- Couches d'injection des électrons ou des trous.
- Dopage des couches de transport de charge.

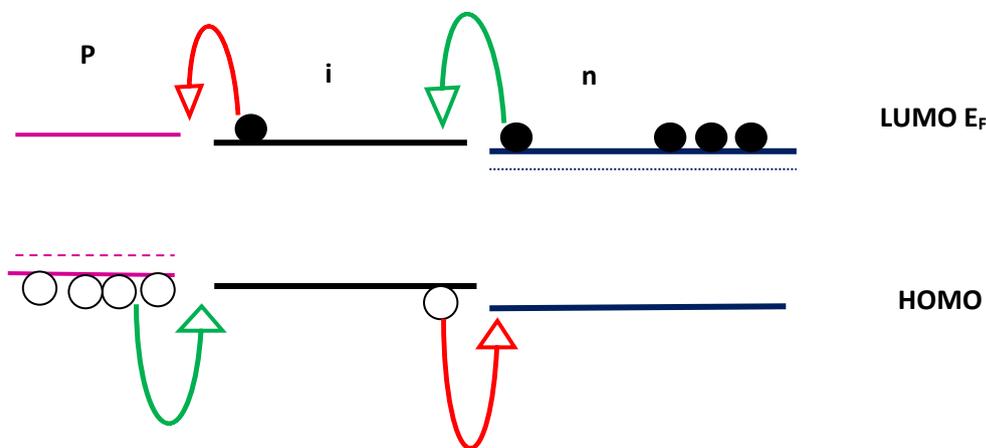


Figure 2.5. Structure multicouches

### 2.4. Injection des charges

Pour aboutir à l'émission de lumière électroluminescente dans les OLED, la première étape est d'injecter des charges électriques depuis les électrodes. Elle consiste à attirer des charges depuis les électrodes vers le matériau organique sous l'effet d'un champ électrique extérieur. Les charges sont soit des électrons (plutôt des 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 [29-30].

## 2.5. Transport des charges

### 2.5.1 Saut entre états localisés

Le transport des charges dans les systèmes  $\pi$  conjugués est assuré par deux bandes de transport distinctes : les bandes HOMO (transport de trous) et LUMO (transport d'électrons). La densité d'états des électrons dans la bande LUMO et des trous dans la bande HOMO y sont décrites par une distribution Gaussienne. Le transport de charges dans les polymères  $\pi$  conjugués s'effectue d'un site à un autre par effet tunnel assisté thermiquement : les porteurs se déplacent par saut (hopping) d'un état à un état voisin. Le hopping assisté thermiquement, contrairement au transport par bandes, est donc favorisé par la présence de phonons. C'est le saut entre chaînes qui est en majorité responsable des faibles mobilités observées ; donc la mobilité est un point faible majeur de l'électronique organique [31].

## 2.6. Recombinaison

Un exciton, assimilé à une quasi-particule neutre, est une paire électron-trou (recombinés) liée par l'interaction coulombienne [32]. La luminescence a lieu lorsque ces excitons se désexcitent. L'emplacement de la zone de recombinaison dans la diode est fonction de la mobilité des charges au sein des semi-conducteurs et du champ électrique. Il faut noter que la mobilité des trous est très souvent différente de celle des électrons dans les semi-conducteurs organiques.

### 2.6.1. Le rapport singlet/triplet

La recombinaison d'une paire électron-trou évolue vers deux états possibles : les singulets ou les triplets. La différence entre ces deux états est qu'un singulet peut se relaxer de façon radiative alors qu'un triplet se relaxe de façon non radiative. Une simple statistique de spin permet d'évaluer le rapport singulet sur triplet à 1 sur 3[33].

## 2.7. Modèle de Langevin

Dans les matériaux organiques la recombinaison se réalise en deux phases. Il y a d'abord la phase de rapprochement des porteurs de charges, puis la formation de l'exciton par capture Langevin dès que la distance électron/trou sera inférieure au rayon de capture critique  $r_c$  appelé distance d'OSANGER, et pour lequel l'énergie d'interaction coulombienne entre

Les deux charges seront égales à l'énergie thermique  $K_B T$ , donné par la relation [34-41]:

$$r_c = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 k_B T} \quad (2.1)$$

où ;

$q$  est la charge électronique élémentaire.

$\epsilon_r$  est la constante diélectrique relative.

$\epsilon_0$  est la permittivité diélectrique du vide.

$K_B$  est la constante de Boltzmann.

## 2.8. Le rendement des OLEDs

### Rendement quantique

Le rendement quantique externe (EQE) est défini par le rapport entre le nombre de photons émis à l'extérieure de l'OLED est le nombre de paires électron trous injectés.

La luminance en ( $\text{cd}/\text{m}^2$ ) est donnée par la relation [35-40] :

$$L = \eta_{\text{coupling}} K(\lambda) \cdot S \cdot h\nu \frac{1}{\pi} \quad (2.2)$$

$(\lambda)$  est la sensibilité de l'œil humaine,  $K(\lambda)$  est la constante qui relie grandeurs énergétiques et grandeurs visuelles ; à  $\lambda = 555 \text{ nm}$ , on a  $K(\lambda) = 683 \text{ lm/w}$ .

$S$  est la densité des excitons type singulet.  $h\nu$  est l'énergie du photon émis.

$\eta_{\text{coupling}}$  sont les pertes due aux guide d'onde et l'absorption dans la couche active.

$$\eta = \frac{1}{2n^2}, \quad n \text{ est l'indice de réfraction du matériau organique } (n = 1,6).$$

## 2.9. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons abordé les différentes structures des diodes électroluminescentes organiques qui peut être existé, le principe de fonctionnement des OLEDs monocouche avec toutes les étapes nécessaires pour leurs bonne fonctionnement ; à savoir : l'injection, le transport, la recombinaison et l'émission de lumière. Ainsi que le rendement.

# CHAPITRE III

## SIMULATION DES DIODES ELECTROLUMINESCENTES ORGANIQUES OLED

### 3.1. Introduction

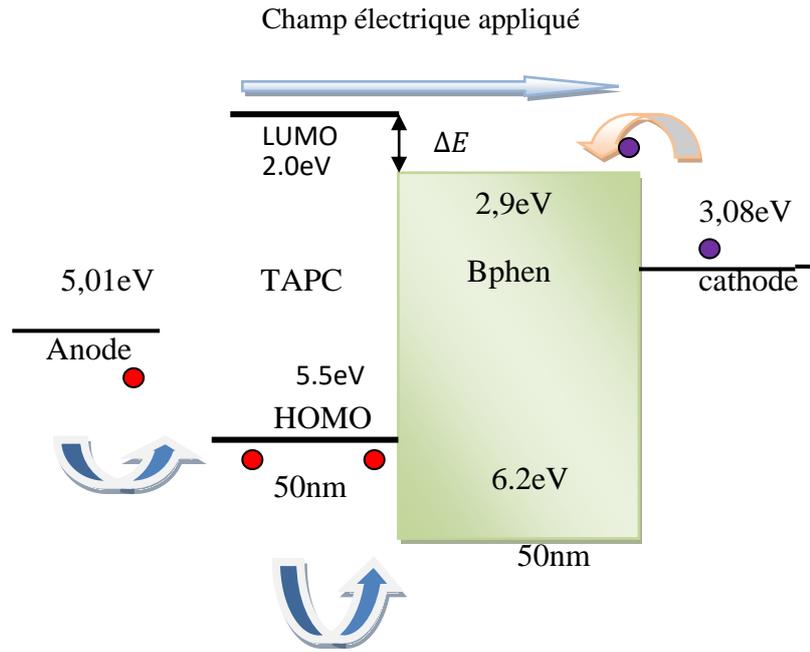
Dans la première partie de ce chapitre, nous allons étudier par simulation les diodes électroluminescentes organiques (Organic Light Emitting Diode ; OLED) à deux couches. Celles-ci sont formées d'une couche d'injection de trous (TAPC) 1,1-Bis[(di-4-tolylamino)phenyl]cyclohexane et une couche de transport d'électrons (Bphen) (4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline). A cet effet, l'étude consiste l'influence de la variation de la densité de défauts sur le mécanisme de dégradation intrinsèque sur les performances des OLEDs. La seconde partie de ce chapitre traite l'étude sur la variation de l'épaisseur du composant.

### 3.2. Effet de la variation de densité de défauts sur les propriétés optoélectronique des OLEDs

Plusieurs sources de pièges ont été identifiées dans les solides organiques comme les impuretés liées au « dopage », à la synthèse du matériau et aux défauts de structures dus au désordre des molécules. Le transport des charges électriques est toujours accompagné de la capture de porteurs de charges dans des états d'énergie localisés. Les porteurs de charge peuvent être libérés après une période de rétention (de l'ordre de  $\mu\text{s}$ ) ou peuvent être recombinaisonnés avec des charges de signe opposé.

Les porteurs de charges piégés ne participant plus à la conduction électrique, les pièges affectent fortement le transport des charges. Le niveau d'énergie des pièges se situe dans un gap d'énergie entre les deux niveaux HOMO et LUMO.

La structure d'une diode électroluminescente à deux couches organiques est représentée sur la figure 3.1 : Le matériau organique, est pris en sandwich entre l'anode et la cathode. L'anode est formée de l'oxyde d'indium et d'étain (ITO) transparent et conducteur avec un haut travail de sortie.



3.1. Modèle de simulation de l’OLED basée : ITO/TAPC/Bphen/LiF/Al

En effet, le schéma de bande représenté sur la figure (3.1) de la structure bicouche ITO/TAPC /Bphen/LiF/Al, montre que le niveau HOMO 5.5eV de la couche HTL (TAPC) est l’intermédiaire entre celui de la couche 6.2 eV et le travail de sortie de l’anode 5.01eV (ITO), celui-ci facilite l’injection des trous dans la structure.

Dans cette partie, on va appliquer une variation de la densité de défauts côté HTL et côté ETL de :  $2 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$ ,  $2 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$ ,  $2 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ,  $2 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$  sur les paramètres de optoélectriques de l’OLEDs.

La recherche bibliographique effectuée sur les matériaux des couches considérées : ITO/TAPC/Bphen/LiF/Al couche HTL et d’Alq<sub>3</sub> couche ETL. Nous a permis de sélectionner les propriétés qui s’affichent dans le tableau 3.1.

En effet, en appliquant une différence de potentiel de 7 V entre l’anode et la cathode, les électrons sont injectés de la cathode vers le niveau LUMO de la couche ETL et en même temps, les trous sont injectés de l’anode vers le niveau HOMO de la couche HTL, et sous l’influence d’un champ électrique externe ces charges injectées migrent au sein du matériau organique.

Tableau 3.1 : Paramètres de la structure étudié TAPC/Bphen

Matériaux	TAPC(HTL)	Bphen(ETL)
[Ref]	[46]	[46]
HOMO(eV)	5.5	6.2
LUMO(eV)	2.0	2.9
Tg(C°)	89	62
$\mu_h(\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1})$	$1.10^{-2}$	$3.25*10^{-4}$

### 3.2. 1. Effet de la variation de densité de défauts côté HTL sur les OLEDs

La figure (3.2) montre la caractéristique I-V d'une OLED à deux couches à une température de  $T=300\text{K}$ , sous une densité de défauts qui varie entre  $2.10^{16}\text{cm}^{-3}$  et  $2.10^{19}\text{cm}^{-3}$ , respectivement avant et après la dégradation de l'OLED côté HTL. Les courbes, ont montrés que la tension de seuil des OLED augmente de 3 à 5 V. Le courant avant la dégradation est supérieur au courant après la dégradation pour une tension appliqué constante.

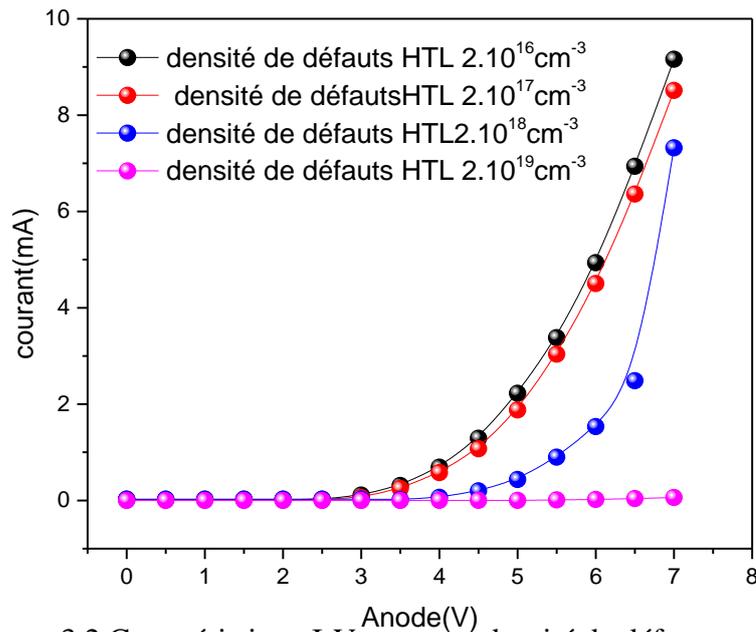


Figure 3.2. Caractéristique I-V sous une densité de défauts

dans la couche HTL varie entre  $2.10^{16}\text{cm}^{-3}$  et  $2.10^{19}\text{cm}^{-3}$  sous une densité de courant  $250\text{mA}/\text{cm}^2$  à  $T=300\text{K}$ .

Les figures (3.3) et (3.4). Montrent que sous une densité de courant constante  $250\text{mA}/\text{cm}^2$  et sous une densité de défauts dans la couche HTL variant entre  $2.10^{16}$

$\text{cm}^{-3}$  et  $2.10^{19} \text{cm}^{-3}$  à  $T=300\text{K}$ .

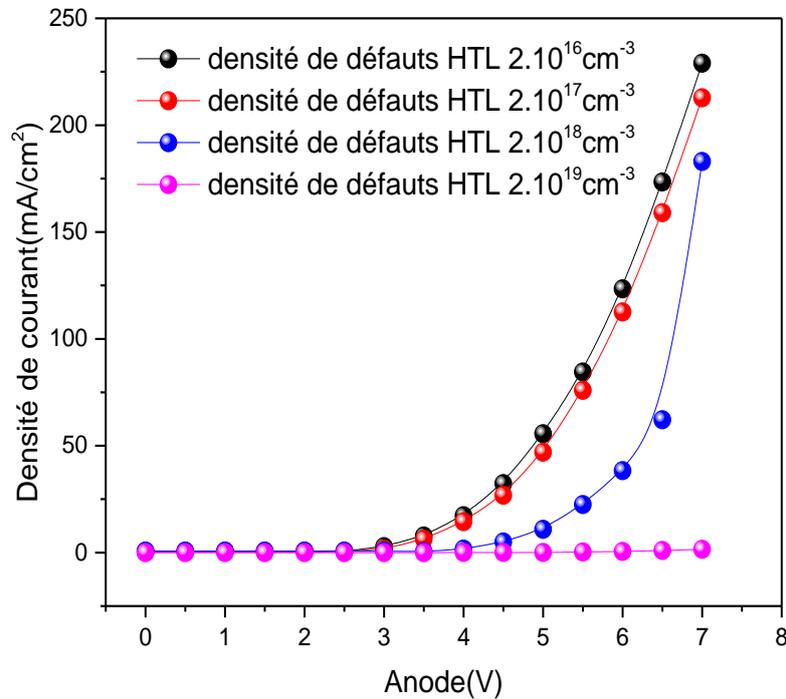


Figure 3.3. Caractéristique J-V pour une densité de défauts dans la couche HTL varie entre  $2.10^{16} \text{cm}^{-3}$  et  $2.10^{19} \text{cm}^{-3}$  sous une densité de courant  $250 \text{mA/cm}^2$  à  $T=300\text{K}$ .

Cette dernière accélère la dégradation du dispositif qui cause une augmentation de la tension pour un courant constant, la puissance optique diminue comme :  $5.31 \times 10^{-3} \text{w}/\mu\text{m}^2$ ,  $4.93 \times 10^{-3} \text{w}/\mu\text{m}^2$ ,  $2.16 \times 10^{-3} \text{w}/\mu\text{m}^2$ ,  $3.55 \times 10^{-5} \text{w}/\mu\text{m}^2$  et ce pour des densités de défauts variées dans la couche HTL comme :  $2.10^{16} \text{cm}^{-3}$ ,  $2.10^{17} \text{cm}^{-3}$ ,  $2.10^{18} \text{cm}^{-3}$ ,  $2.10^{19} \text{cm}^{-3}$  respectivement, M.S.Zaini et al [45], ont attribué cette dégradation à la formation de pièges discrètes au dessus du niveau HOMO de la couche HTL.

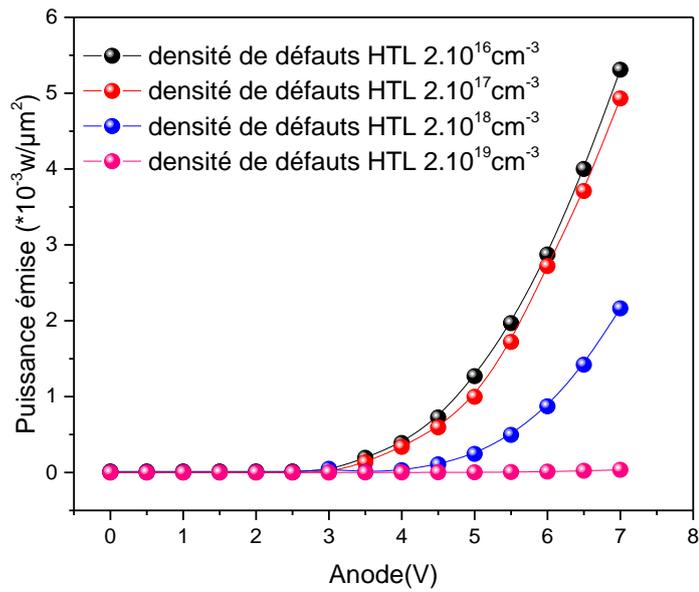


Figure 3.4. Puissance émise pour une densité de défauts dans la couche HTL varie entre  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$  à  $T=300\text{K}$ .

La figure 3.5. Montre la densité des excitons type singulet de l’OLED à l’interface HTL/ETL sous un courant électrique constant  $250\text{mA}/\text{cm}^2$  et pour une densité de défauts dans la couche HTL varie entre  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$  à  $T=300\text{K}$  :

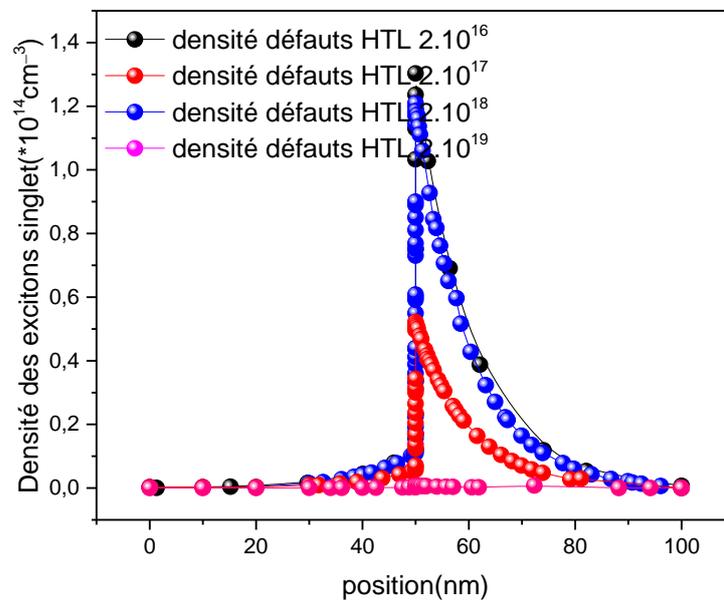


Figure 3.5 : Densité des excitons type singulet de l’OLED pour une densité de défauts dans la couche HTL varie entre  $2.10^{16}$  et  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$  sous une densité de courant  $250\text{mA}/\text{cm}^2$  à  $T=300\text{K}$ .

$1.3 \times 10^{14} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ ,  $1.22 \times 10^{14} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ ,  $5.22 \times 10^{13} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ ,  $7.11 \times 10^{11} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ , respectivement ; pour des  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , pour un composant de 50nm/50nm.

La figure (3.6). Décrit l'évolution de la diminution de la luminance avec l'augmentation de la densité de défauts dans la couche HTL variant entre  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$  à  $T=300\text{K}^\circ$  et sous une densité de courant constante  $250\text{mA/cm}^2$ ; où on distingue une phase de diminution rapide de la luminance pour une densité de défauts supérieurs à  $2.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , cette dernière accélère la dégradation du dispositif qui cause une augmentation de la tension pour un courant constant, la brillance diminue comme :

$2150.41 \text{ cd/m}^2$ ,  $1995.38 \text{ cd/m}^2$ ,  $860.5 \text{ cd/m}^2$ ;  $11.72 \text{ cd/m}^2$  et ce pour des densités de défauts variées dans la couche HTL comme :  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$  respectivement.

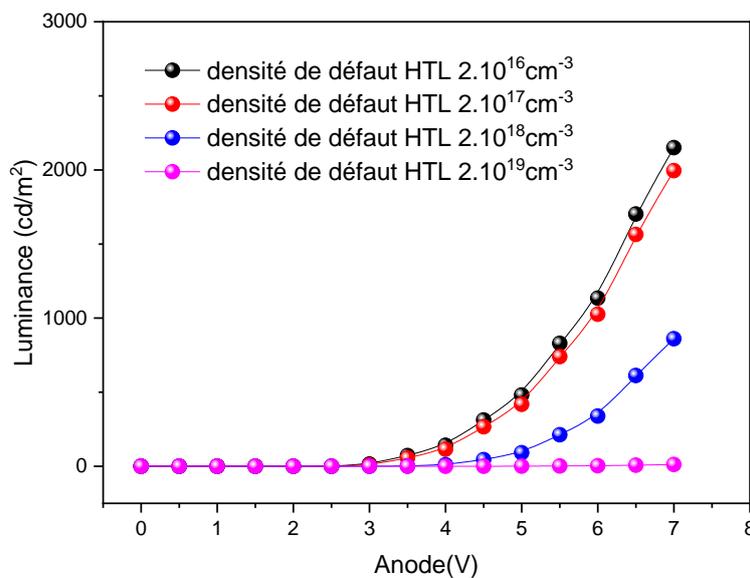


Figure 3.6. Caractéristique L-V sous une densité de défauts

dans la couche HTL varie entre  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$  sous une densité de courant  $250\text{mA/cm}^2$  à  $T=300\text{K}$ .

Nous avons également suivi l'évolution des caractéristiques électriques des OLEDs étudiées durant la période de dégradation accéléré. Nous allons exposer les résultats obtenus qui sont résumés sur le tableau 3.2.

Tableau 3.2 : Comparaison entre les paramètres pour différentes densité de défauts côté HTL

Densité de défauts HTL( $\text{cm}^{-3}$ )	Jmax( $\text{mA}/\text{cm}^2$ )	Vseuil(V)	Puissance émis( $\text{w}/\mu\text{m}^2$ )	Luminance de seuil (V)	Brillance max $\text{Cd}/\text{m}^2$
$2.10^{16}$	228.97	3	$5.31 \times 10^{-3}$	3.5	2150.41
$2.10^{17}$	212.79	3.5	$4.93 \times 10^{-3}$	4	1995.38
$2.10^{18}$	183.01	4	$2.16 \times 10^{-3}$	4.5	860.5
$2.10^{19}$	1.57	/	$3.55 \times 10^{-5}$	/	11.72

### 3.2.2. Effet de la variation de densités de défauts côté ETL sur les OLEDs

La figure (3.7) montre la caractéristique I-V d'une OLED à deux couches à une température de  $T=300\text{K}$ , respectivement avant et après la dégradation côté ETL. Les courbes, ont montrés que la tension de seuil des OLED augmente de 3V à 5 V à cause des dégradations ; dont les densités de défauts dans la couche ETL varies entre  $2.10^{16}$  et  $2.10^{19} \text{cm}^{-3}$ , et le courant avant la dégradation est supérieure le courant après la dégradation pour une tension appliqué constante.

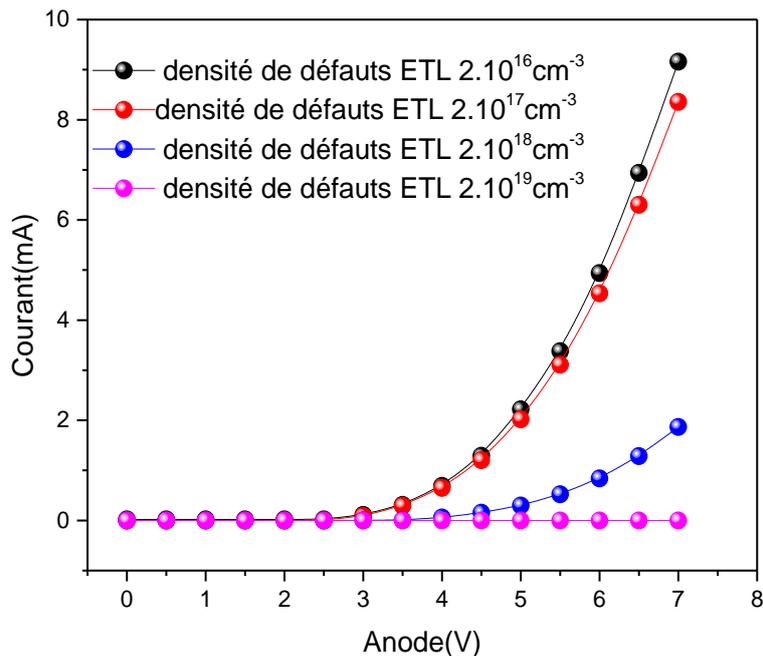


Figure 3.7. Caractéristique I-V sous une densité de défauts

dans la couche ETL varie entre  $2.10^{16}$  et  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$  sous une densité de courant  $250 \text{ mA/cm}^2$  à  $T=300\text{K}$ .

Les figures 3.8 et 3.9. Montrent que sous une densité de courant constant  $250 \text{ mA/cm}^2$  accélère la dégradation du dispositif et qui cause une augmentation de la tension pour un courant constant, la puissance optique diminue comme:

$5.31.10^{-3} \text{ w}/\mu\text{m}^2$ ,  $4.86.10^{-3} \text{ w}/\mu\text{m}^2$ ,  $1.08.10^{-3} \text{ w}/\mu\text{m}^2$ ,  $4.62.10^{-8} \text{ w}/\mu\text{m}^2$  et ce pour de densités de défauts variées dans la couche ETL comme :  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$  respectivement. M.S.Zaini et al [45] ont attribué cette dégradation à la formation de pièges discrets sous le niveau LUMO de la couche ETL.

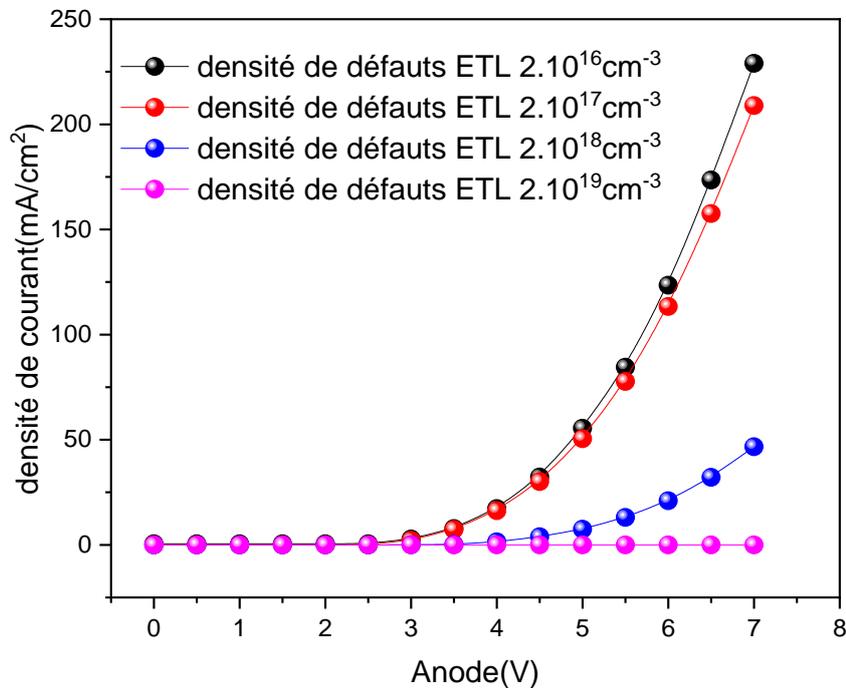


Figure 3.8. Caractéristique J-V sous une densité de défauts

dans la couche ETL varie entre  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , densité de courant  $250 \text{ mA/cm}^2$  à  $T=300\text{K}$ .

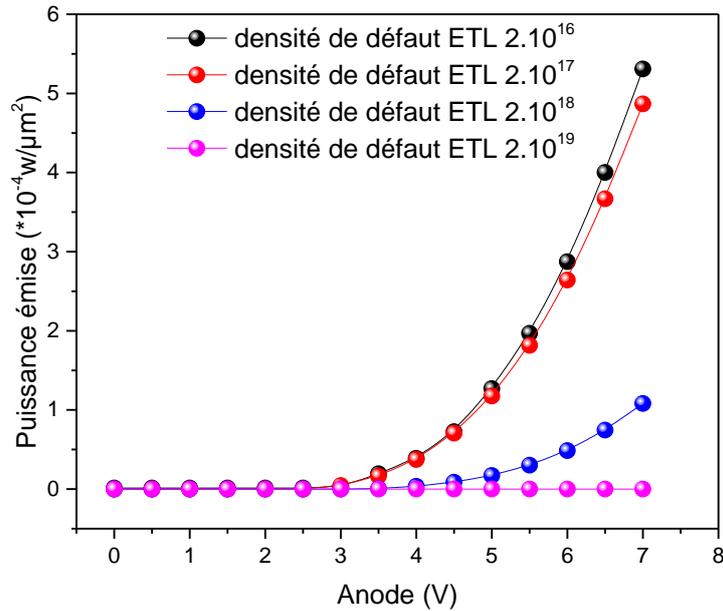


Figure 3.9. Puissance émise sous une densité de défauts dans la couche ETL varie entre  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , densité de courant de  $250 \text{ mA/cm}^2$  à  $T=300 \text{ K}$ .

La figure 3.10 montre la densité des excitons type singlet de l'OLED à l'interface HTL/ETL sous une densité de courant constante  $250 \text{ mA/cm}^2$ , pour une densité de défauts dans la couche ETL varie entre  $2.10^{16}$  et  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$  à  $T=300 \text{ K}$  :  $1.3 \times 10^{14}$  ( $\text{cm}^{-3}$ ),  $1.2 \times 10^{14}$  ( $\text{cm}^{-3}$ ),  $2.57 \times 10^{13}$  ( $\text{cm}^{-3}$ ),  $7.22 \times 10^8$  ( $\text{cm}^{-3}$ ), respectivement ; pour des  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .

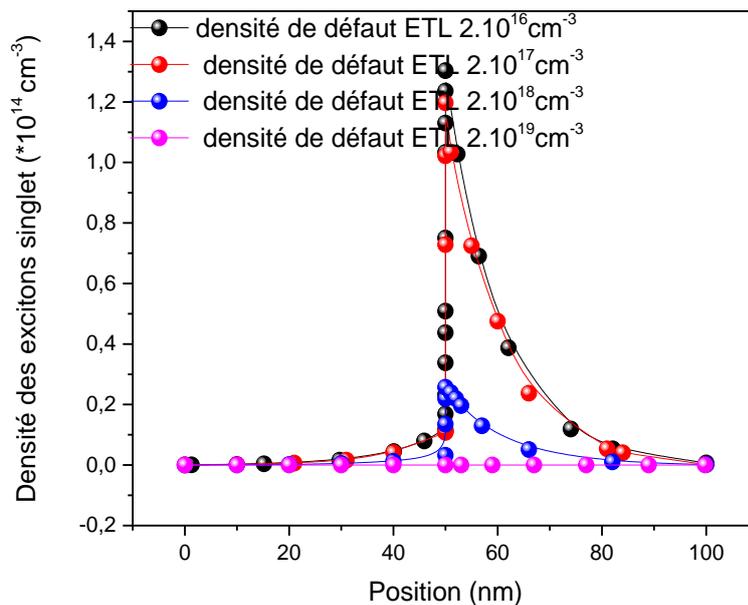


Figure 3.10 : Densité des excitons type singlet de l'OLED pour une densité

de défauts dans la couche ETL varie entre  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$  densité de courant  $250\text{mA}/\text{cm}^2$  à  $T=300\text{K}$ .

La Figure 3.11. Représente l'évolution de la diminution de la luminance avec l'augmentation de la densité de défauts dans la couche ETL variant entre  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$  à  $T=300\text{K}$  et sous une densité de courant constante  $250\text{mA}/\text{cm}^2$ ; où on distingue une phase de diminution rapide de la luminance pour une densité de défauts supérieurs à  $2.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , cette dernière cause la défaillance du dispositif (augmentation de la tension pour un courant constant), la brillance diminue comme:

$2150.41 \text{ cd}/\text{m}^2$ ,  $1966.88 \text{ cd}/\text{m}^2$ ,  $423.53 \text{ cd}/\text{m}^2$ ;  $0.01 \text{ cd}/\text{m}^2$  et ce pour des densités de défauts variées dans la couche ETL comme :  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$  respectivement.

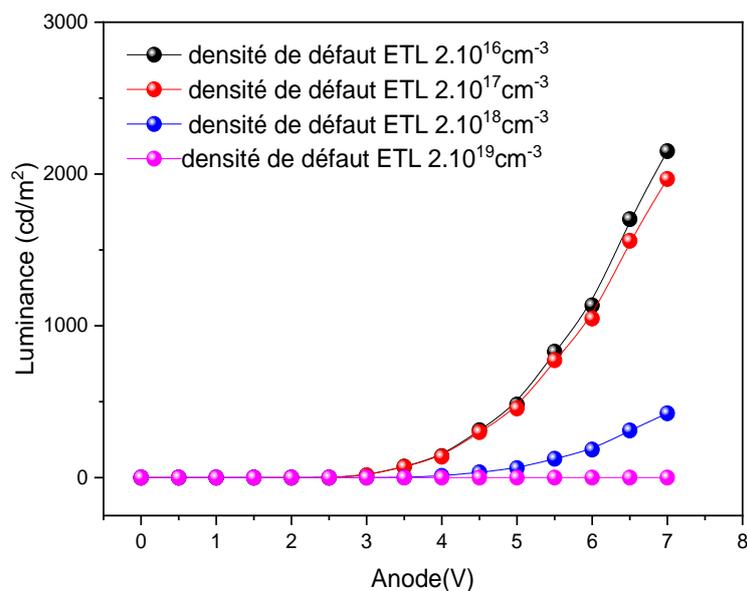


Figure 3.11. Caractéristique L-V sous une densité de défauts

dans la couche ETL varie entre  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$  sous une densité de courant  $250\text{mA}/\text{cm}^2$  à  $T=300\text{K}$ .

Nous avons également suivi l'évolution des caractéristiques électriques des OLEDs étudiées durant la période de dégradation accéléré. Nous allons exposer les résultats obtenus qui sont résumés sur le tableau 3.3 ; où on remarque une augmentation de la tension de seuil et une réduction de l'électroluminescence de manière sévère.

Tableau 3.3 : Comparaison entre les paramètres pour différentes densité de défauts  
Côté ETL

Densité de défauts ETL( $\text{cm}^{-3}$ )	Jmax( $\text{mA}/\text{cm}^2$ )	Vseuil	Puissance émise( $\text{w}/\mu\text{m}^2$ )	Luminance de seuil (V)	Brillance Max $\text{Cd}/\text{m}^2$
$2.10^{16}$	229	3	5.31	3.5	2150.41
$2.10^{17}$	208.9	3	4.87	4	1966.88
$2.10^{18}$	46.65	4	1.08	4.5	423.53
$2.10^{19}$	0.0047	/	$4.62 \times 10^{-5}$	/	0.01

De ce fait, on peut conclure que l'augmentation de densité de défauts réduit directement les performances des OLEDs, et leurs présences a plus d'influence sur la couche ETL par rapport à leurs présences dans la couche HTL et c'est dû :

- la décroissance de la performance du dispositif (tension de seuil, tension de fonctionnement.....
- conversion de la lumière.
- au niveau de la couche ETL se produit les recombinaisons radiatives qui sont responsable de l'émission de lumière.
- la présence de densité de défauts joue le rôle de centre tueurs de l'électroluminescence qui sont responsables de la dégradation de dispositif.

### 3.3. Effet de la variation de l'épaisseur du composant sur les propriétés optoélectroniques des OLEDs

Dans cette partie nous allons faire l'étude sur la variation de l'épaisseur du composant de l'OLED de 40nm à 120nm, la structure étudiée est représentée sur le tableau 3.3.

Les figure 3.12 et figure 3.13. Représente la caractéristique (I-V) et la puissance de luminance (L-V), d'une série OLEDs (A-E) pour différentes épaisseurs du composant (40nm-120nm). La tension de seuil est d'environ 3V reste constante et ne dépend pas de l'épaisseur du composant, elle dépend uniquement des travaux de sortie de l'anode et la

cathode. Tandis que la tension de fonctionnement du composant est réduite avec la réduction de l'épaisseur du composant ; celle-ci varie comme :

7.5V pour une épaisseur de composant de 60nm/60nm, 6.5V pour 50nm/50nm, 5.5V pour 40nm/40nm et 4.5V pour 30nm/30nm et 20/20nm 3.5V.

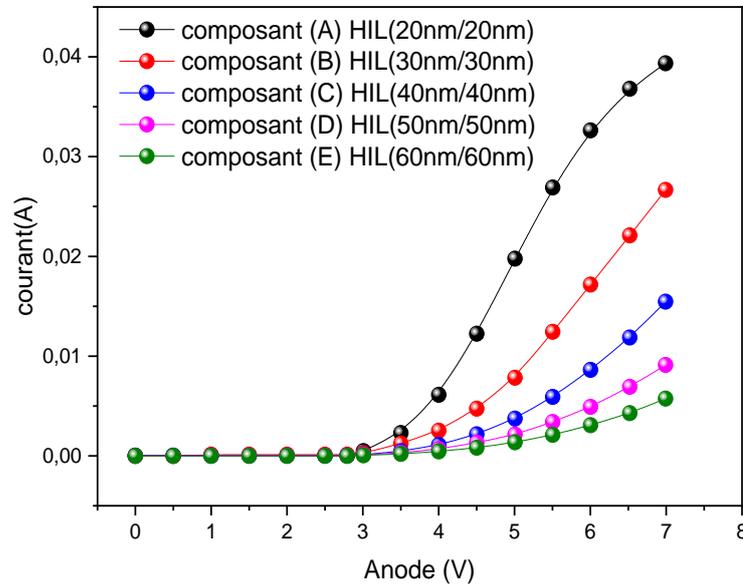


Figure3.12. (I-V) caractéristiques pour composant OLEDs (A-E) dont l'épaisseur du composant varie de 40nm à 120nm

Egalement la luminance du seuil dépend de l'épaisseur du composant et varie comme : 4.5V, 4V, 3.5V, 3V, 2.5V respectivement pour les épaisseurs de composants varie comme : 60nm/60nm, 50nm/50nm, 40nm/40nm et 30nm/30nm, 20nm/20nm.

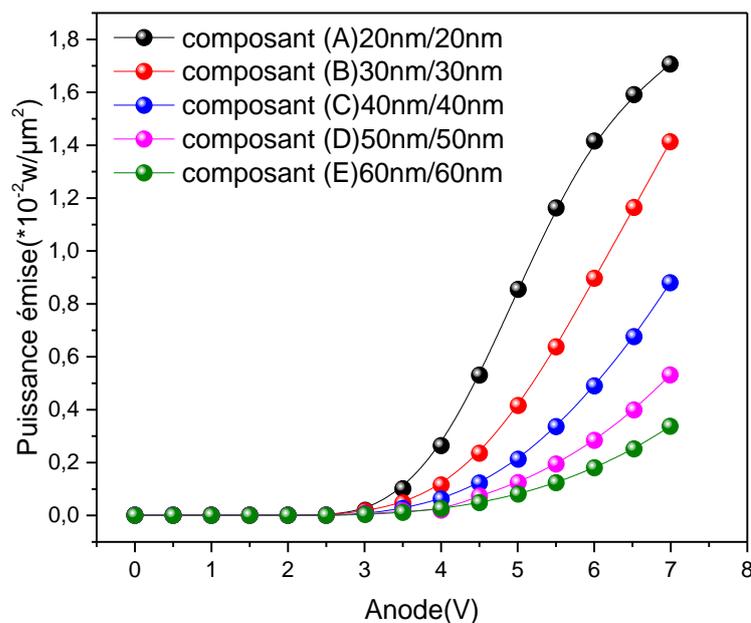


Figure3.13:Puissance émise pour composant OLEDs (A-E) dont l'épaisseur du composant varie de 40nm à 120nm

Notamment, nous avons observé les mêmes résultats pour la densité d'excitons singlet représentée sur la figure 3.14, l'exciton diffuse d'une concentration élevée vers les faibles concentrations, et s'étendra à environ 20 nm de l'interface HTL/ETL et formera la zone émettrice [47]. Cette dernière sera réduite avec l'augmentation de l'épaisseur du composant comme :

$5.55.10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ,  $3.86.10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ,  $2.22.10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ,  $1.3.10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ,  $0.81.10^{14} \text{ cm}^{-3}$  respectivement pour des épaisseurs du composants : 20nm/20nm, 30nm/30nm, 40nm/40nm, 50nm/50nm, 60nm/60nm.

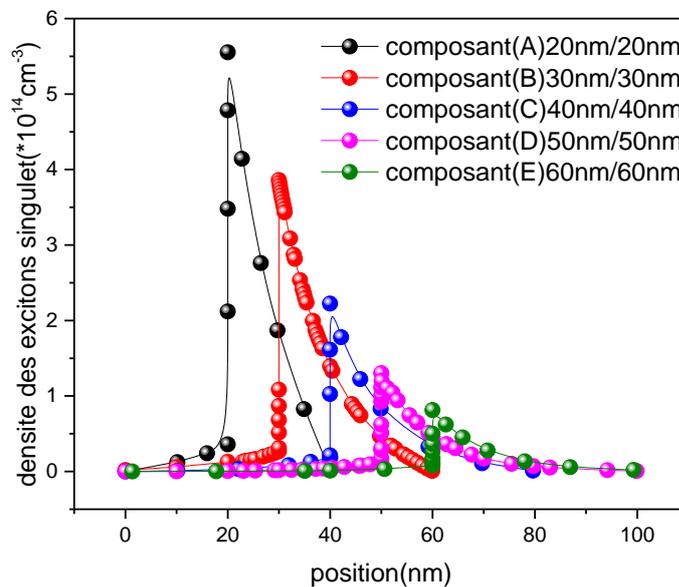


Figure 3.14 : Densité des excitons type singlet de l'OLED pour composant OLEDs (A-E) dont l'épaisseur du composant varie de 40nm à 120nm.

Les caractéristiques optiques des OLEDs, représentées sur la figure (3.15) (L-V), on a obtenu donc une Brillance maximale, dont les valeurs sont :

$9161,34 \text{ cd/cm}^2$ ,  $6364,00 \text{ cd/cm}^2$ ,  $3670,72 \text{ cd/cm}^2$ ,  $2150,03 \text{ cd/cm}^2$ ,  $1343,18 \text{ cd/cm}^2$ , respectivement pour des épaisseurs du composants : 20nm/20nm, 30nm/30nm, 40nm/40nm, 50nm/50nm, 60nm/60nm.

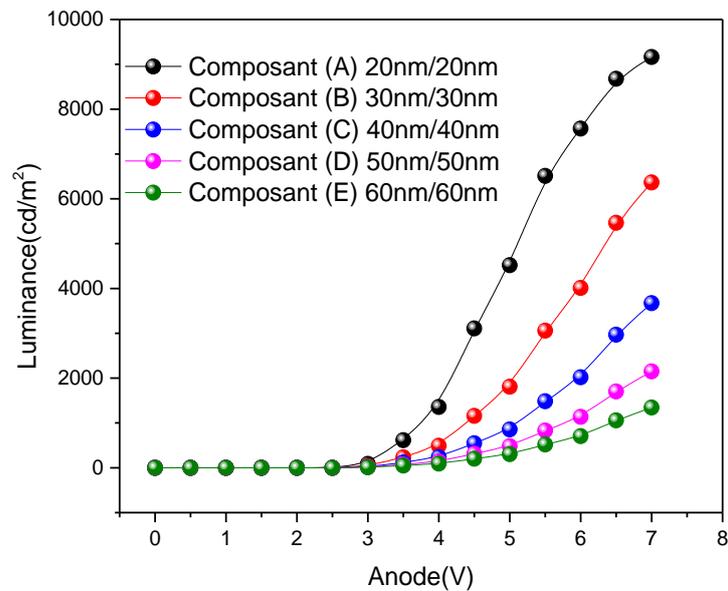


Figure 3.15. Caractéristique L-V pour différents pour composant OLEDs (A-E) dont l'épaisseur du composant varie de 40nm à 120nm

Les résultats de simulation montrent qu'à chaque fois que l'épaisseur du composant est réduite, on obtiendra une augmentation importante de la puissance de luminance émise, réduction de la tension de fonctionnement ainsi qu'une minimisation importante du temps de réponse de la structure, et cela est dû à [46-47]:

- La mobilité des porteurs de charges des matériaux organiques étant très faible, cela convient à réduire au maximum l'épaisseur du composant.
- L'existence de densité de pièges dont leurs présences jouent le rôle de centre de recombinaisons non radiatives (centre tueur d'électroluminescence).

### 3.4. Conclusion

Pour identifier l'un des différentes causes de dégradations et améliorer la fiabilité du dispositif ; notre travail de simulation, a concerné l'effet de la variation de la densité de défauts et qui cause une défaillance soudaine et catastrophique de l'électroluminescence à température ambiante 300K° du dispositif. De ce fait il est indispensable de réduire la densité de défauts à moins de  $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , on a constaté que la couche ETL s'est affectée par les défauts plus que la couche HTL, car au niveau de ETL se produit l'émission de lumière et la présence de densité de défauts jouent le rôle de centre tueurs de l'électroluminescence. Enfin, il a été constaté que la réduction de l'épaisseur du composant améliore directement les performances de l'OLED.

## CONCLUSION GENERALE

L'électronique organique est voué à un avenir brillant, ainsi que la technologie des diodes électroluminescentes organiques, la technologie des OLEDs a considérablement progressée au cours des dernières décennies et ont un grand potentiel pour l'affichage et une source de lumière dans le futur. Les fabricants des différents secteurs s'engagent avec beaucoup d'espoir dans le sens du développement de la technologie des OLEDs.

Dans le cadre de ce projet, nous avons entamés notre étude d'une façon générale sur les matériaux organiques conducteurs, ensuite nous avons établi un état de l'art sur les diodes électroluminescentes organiques, dont nous avons représenté le dispositif comme suit : le principe de fonctionnement des OLED, sa structure qui se présente en trois types : structure à couche simple, structures bicouches et structure multicouches. L'étude a porté également sur l'injection des charges, transport des charges par les polarons, et la recombinaison. Evidemment, une étude bibliographique sur les diodes électroluminescentes organiques, n'a pas été négligée, afin de mieux comprendre les phénomènes physiques observés en utilisant le logiciel Atlas-Silvaco.

Nous a donné part aussi pour l'étude et la simulation des propriétés optoelectriques d'une OLED d'une structure bi-couches : une couche de transport de trous HTL(TAPC) et une couche de transport d'électrons (Bphen) .L'étude s'est focalisée sur l'effet de la variation de densité de défauts, qui ont impact sur les performances électriques et optiques de l'OLED.

Dans les résultats obtenus, nous avons remarqué une augmentation de la densité de courant électriques J-V, une réduction de la puissance lumineuse, du taux de recombinaison Langevin et des densités des excitons singlet avec la température. Mais cette augmentation provoque une diminution de la tension seuil.

Enfin, Nous tenons comme conclusion, qu'avec les valeurs de température choisies, notre structure n'a pas subi une importante forte dégradation de ses performances. Et lors de l'étude sur l'effet de la variation de densité des défauts dans les deux couches HTL et ETL ; on remarque que la couche ETL s'affecte plus que la couche HTL en augmentant la densité des défauts. Ce qui veut dire que la couche ETL est la couche

émissive de la lumière, il est donc nécessaire que la densité des défauts doit diminuer dans la couche ETL pour donner une meilleure performance de l'OLED. Tant disque, l'étude de l'influence de changement de l'épaisseur de l'OLED sur sa performance, nous informe qu'on faisant varier les épaisseurs de 40 jusqu'à 120nm, une meilleure performance de l'OLED pour une faible épaisseur a été constaté.

En perspectives, nous suggérons d'étudier :

- L'influence du travail de sortie à l'anode et la cathode sur les performances des OLED
- Le comportement d'une OLED multi jonction et à double couche émissive.

## REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

1. P. Taillepiere, «Diodes Electroluminescentes organiques: Etudes des Efficacités Lumineuses et du Traitement Ionique des Electrodes pour l'Amélioration du Vieillissement», Thèse doctorat, université de Limoges, 2006.
2. F.Reiorffer, «Dégradation des diodes électroluminescentes organiques : analyses électriques et thermiques» .Université de Nantes , thèse de doctorat 2013.
3. P. S. Davids, Sh. M. Kogan, I. D. Parker, and D. L. Smith, “Charge injection inorganic light-emitting diodes: Tunneling into low mobility materials”, Appl. Phys.Lett., vol.69, no.15,pp.2270-2272,7October1996.
4. M.R.SERDOUK, « Etude par simulation numérique des propriétés électriques d'une cellule solaire en silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) », Thèse magister, Université Mohamed Khider – Biskra, 2015.
5. H. KANAAN, « Spectroscopie d'électro-absorption appliquée aux diodes électroluminescentes (OLEDs) et aux cellules photovoltaïques (OPVs). », Thèse de Doctorat, Université de Toulouse, 2009.
6. S.Mehdi.,“ Modélisation et simulation d'une structure électronique OLED pour des applications optoélectroniques”’,université de Blida 1,thèse de doctorat 2023.
7. B. Damilano, b.damilano, J. Brault, A. Dussaigne, J. Massies ., “Diodes électroluminescentes blanches pour l'éclairage „”, 86-91, 2002.
8. U.Mitschke., P.BaÈuerle., “The electroluminescence of organic materials”, J. Mater. Chem., 2000, 1471-1507
9. R. H. Friend, R. W. Gymer, A. B. Holmes, J. H. Burroughes, R. N. Marks, C. Taliani, D. D. C. Bradley, D. A. Dos Santos, J. L. BreÂ das, M. LoÈ gdlund, W. R. Salaneck., “Electroluminescence in conjugated Polymers”, review article, nature , vol 397, 1999, 121-127.
11. D. Ammermann, A. Böhler, J. Schöbel, W. Kowalsky., ” Device Structures and Materials for Organic Light Emitting”. Institut für Hochfrequenztechnik, TU Braunschweig, Annual report 1996.
12. K.Knauer., “High-Performance Single-Unit and Stacked Inverted Top-Emitting Eelectrophosphorence Organic Light-Emitting Diodes”,thèse de doctorat, Georgia Institute of Technology ,2015.

13. C.W.Tang., S.A.Vansylke.,,, Organic électroluminescent diodes“,App.Phys. Lett ,51.12,1987.
14. M. Ben Khalifa., „“Etude du transport et ingénierie de bandes dans les diodes organiques électroluminescente à hétérostructures“, thèse de doctorat, école centrale de Lyon, 2004.
15. A.Djurisic., P.Chui.”Organic Emitting Diode: effect of anode traitement to device efficiency and stability”, these de ,université de Hong Kong
16. M.G.Helander.,”Electrode/OrganicInterfacesinOrganicOptoelectronics”,Doctor of Philosophy, University of Toronto (2012).
17. G.Wantz.,,,“Elaboration, Caractérisation et Optimisation de Diodes Electroluminescentes à Base de Polymères Conjuguées“,thèses de doctorat, Université de BordeauxI,2004.
18. C. A .Chamberlain ., “Etude théorique et expérimentale de micro-OLEDs rapidessurélectrodescoplanairesenrégimed’impulsionsàhautedensitédecourant”“,thèsededoctorat, université Paris 13,(2017).
19. M.Mebarek., ‘‘Etude de nouveaux copolymères dérivés de PPV et PVK et leurs nano composites pour des applications en électronique organique ‘‘, Thèse de doctorat, université de Nantes, 2013.
20. A. Alchaddoud.,’’Etude du comportement électrique et photométrique des diodes électroluminescentes organiques pour l’éclairage ayant subi un vieillissement accéléré’’, thèse de doctorat, Université Toulouse III - Paul Sabatier,2017.
21. A Fakharuddin., K. Mahesh.,Gangishetty, M.Abdi-Jalebi, S.H. Chin, A. R. Bin MohdYusoff., D.N. Congreve, W. Tress., F.Deschler., M. Vasilopoulou., H. J. B. Fakharuddin, A., Gangishetty, M.K., Abdi-Jalebi., Perovskite light-emitting diodes. Nat Electron 5, 203–216 ,2022. <https://doi.org/10.1038/s41928-022-00745-7>.
22. D. Vaufrey - thèse doctorat « Réalisation d’OLED à émission par la surface : optimisation de structures ITO / semi-conducteurs organiques », Ecole Centrale De Lyon- 2003.
23. H. Boukli and T. Benouaz,Influence of charge carrier mobility and surface recombination velocity on the characteristics of P3HT: PCBM organic solar cells,Phys. Status Solidi a 211, No. 4, 862–868,2014.
25. D. Vaufrey, « Réalisation d’OLED à émission par la surface : optimisation de structures ITO / semi-conducteurs organiques », Thèse doctorat Ecole Centrale De Lyon- 2003.
26. A. AINSEBAA, « Diodes électroluminescentes hybrides organiques inorganiques : Mécanismes aux interfaces, courant et lumière », Thèse doctorat, Université Paris 7- 2010.

27. E.R.WINAND - article de conférence « Emission de lumière par une couche mince organique : Les OLEDs (Organic Light Emitting Diodes) », conférence Delta 30 Septembre 2008
28. K.Knauer., “High-Performance Single-Unit and Stacked Inverted Top-Emitting Electrophosphorence Organic Light-Emitting Diodes”,thèse de doctorat, Georgia Institute of Technology ,2015.
29. H.Lin., H.Bai., Z.Yang., Q.Shen., M. Li., Y. Huang., F. Lv., S.Wang., Conjugated polymers for biomedical applications Chem. Commun., 2022,58, 7232-7244 ,DOI [https://doi.org/ 10.1039/D2CC02177C](https://doi.org/10.1039/D2CC02177C)
30. C. A .Chamberlain ,“Etude théorique et expérimentale de micro-OLEDs rapides sur électrodes coplanaires en régime d'impulsions à haute densité de courant” , thèse de doctorat, université Paris 13,2017.
31. R.Stanton.,E.Russell.,H.Brandt.,D.J.Trivedi., Capture of Toxic Oxoanions from Water Using Metal–Organic Frameworks J. Phys. Chem. Lett. 2021, 12, 37, 9175 9181 [https:// doi.org/ 10.1021/acs.jpcclett.1c02550](https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.1c02550)
32. E.R.WINAND,« Emission de lumière par une couche mince organique : Les OLEDs (Organic Light Emitting Diode) », conférence Delta 30 Septembre 2008
33. J. Staudigel., M. F. Stöbel., F. Steuber ., J. Simmerer., ” A. quantitative numerical model of multilayer vapor deposited organic light emitting diode “ J. Appl. Phys. 86, 3895 (1999).
34. A. Moliton., “” Electronique et optoélectronique organiques””,Spinger Verlag France, (2011).
35. J. Boizot.,“Optimisation de la durée de vie de micro-écrans vidéo à diodes électroluminescentes organiques “, thèse de doctorat, Université d Grenoble, 2012.
36. A.Dirck, B.Achim , K.Wolfgang ; “Multilayer Organic Light Emitting Diodes for Flat Panel Displays”; Institut Hochfrequenztechnik, TU Braunschweig (1995).
37. L.Vignau., “ Vers des composants électroniques organiques de grande surface et flexibles „”, thèse de doctorat, Université Bordeaux 1, 2011.
38. S.Sato., M. Takada., D. Kawate., M. Takada., T. Kobayashi., H. Naito.,” Interfacial charges and electroluminescence in bilayer organic light-emitting diodes with different hole transport materials”, Japanese. J. Appl .Phys. 58, SFFA02 .(2019).
39. N.Liu ., S. Mei., D. Sun., W. Shi ., J. Feng ., Y. Zhou ., F. Mei., J. Xu., Y. Jiang.,X. Cao.,”Effects of Charge Transport Materials on Blue Fluorescent Light-Emitting Diodes with a Host-Dopant System”, Micromachines (2019),

40. C. Pinot., "Modélisation des diodes électroluminescentes organiques multicouches dopées. Application à de nouvelles architectures ", thèse de doctorat, Ecole Polytechnique X, 2008.
41. A .Djurisic.,P.Chui., "OrganicEmitting Diode : effect of anode traitement to device efficiency and stability", thèse de doctorat, université de Hong Kong
42. A. Alchaddoud," Etude du comportement électrique et photométrique des diodes électroluminescentes organiques pour l'éclairage ayant subi un vieillissement accéléré", Université Toulouse III - Paul Sabatier,2017.
43. M. Schaer, F. Nüesch, D. Berner ,W.Leo, L. Zuppiroli W .Verlag, "Water Vapor and Oxygen Degradation Mechanisms in Organic Light Emitting Diodes", *Funct. Mater.* 2001, 11, No. 2, April
44. J.R.Ribé, E. Gracia-Espino, S. Jenatsch, P. Lundberg, A. Sandström, S. Tang, C. Larsen, L .Edman, "Elucidating Deviating Temperature Behavior of Organic Light-Emitting Diodes and Light-Emitting Electrochemical Cells", *Adv. Optical Mater.* 2021, 9, 2001405.
45. M. S. Zaini1 · M. A. Mohd Sarjidan1 · W. H. Abd. Majid,"The Effect of Trap Density on the Trapping and De-trapping Processes in Determining the Turn-On Voltage of Double-Carrier Organic Light-Emitting Devices (OLEDs)", *Journal of Electronic Materials*, 2021.
46. N.Liu., S. Mei., D. Sun.,W. Shi ., J. Feng.,Y. Zhou .,F. Mei., J. Xu., Y. Jiang., X. Cao.,"Effects of Charge Transport Materials on Blue Fluorescent Organic Light-Emitting Diodes with a Host-Dopant System", *Micromachines* (2019), 10, 344.
47. M. Wei., C. Lin., C. Yang.,Y. Kiang., J. Lee., H. Lin., "Emission Characteristics of Organic Light-Emitting Diodes and Organic Thin-Films with Planar and Corrugated Structures", *Int. J. Mol. Sci.* 11, (2010), 1527-1545.

## Annexe

Le simulateur Silvaco se base sur la résolution des équations du courant et de continuité couplé à l'équation de poisson comme suit :

- Le formalisme du courant dérive/ diffusion

La modélisation se fait en une dimension (1-D). Le transport des électrons et des trous dans les OLEDs est décrit par les équations de continuité, de courant de conduction/diffusion couplée à l'équation de Poisson [44,52-53] :

$$\frac{\partial E(x)}{\partial x} = \frac{q}{\epsilon_r \epsilon_0} (p(x) - n(x)) \quad (2.35)$$

$\epsilon_0$  est la permittivité du vide.

$\epsilon_r$  est la permittivité relative du matériau.

Le champ électrique à travers le composant est calculé par la relation :

$$V_{applied} - V_{bi} = \int_0^d E(x) dx \quad (2.36)$$

Avec  $V_{applied}$  le potentiel électrique appliqué,  $V_{bi}$  le potentiel de diffusion dû à la différence des travaux de sortie de la cathode et de l'anode respectivement,  $d$  est l'épaisseur du composant dans notre cas est  $100nm$ .

Les porteurs de charges se déplacent par conduction (présence d'un champ électrique) et par diffusion suite au gradient de concentration. Les équations de transport d'électron et du trou respectivement sont données :

$$\overrightarrow{J_n(x)} = e \left( \mu_e \overrightarrow{E(x)} \cdot n + D_e \frac{\partial n}{\partial x} \right) \quad (2.37)$$

$$\overrightarrow{J_p(x)} = e \left( \mu_h \overrightarrow{E(x)} \cdot p - D_h \frac{\partial p}{\partial x} \right) \quad (2.38)$$

$\mu_e$  (resp  $\mu_h$ ) est la mobilité des électrons respectivement des trous.

$D_e = \mu_e \frac{k_B T}{e}$  (resp  $D_h$ ) est la constante de diffusion d'électron (respectivement de

trou).

$n$  (resp  $p$ ) est la concentration des électrons libres qui participe à la conduction (resp.

trou).

La recombinaison des électrons libres avec les trous libres forment un exciton calculé en accordance avec la théorie de Langevin [52]:

$$R = \frac{e}{\epsilon\epsilon_0} (\mu_e + \mu_h) n \cdot p \quad (2.39)$$

Rest le taux de recombinaison Langevin.

Les équations de continuités'expriment de la manière suivante :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} - R - \frac{\partial n_t}{\partial t} \quad (2.40)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \frac{\partial J_p}{\partial x} - R - \frac{\partial p_t}{\partial t} \quad (2.41)$$

$n_t$ ,  $p_t$  sont les denses de pièges à électrons et à trous respectivement.

Les équations de densités de pièges électrons et trous sont données par les équations [55] :

$$\frac{\partial n_t}{\partial t} = r_c n (N_t - n_t) - r_e \cdot n_t \quad (2.42)$$

$$\frac{\partial p_t}{\partial t} = r_c p (N_t - p) - r_e \cdot p_t \quad (2.43)$$

$N_t$  est la densité totale de pièges.

$r_c$  est le taux de capture.

$r_e$  est le taux d'émission.



