

**UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE**  
**FACULTAD DE CIENCIA**  
**Departamento de Física**



**Simulación computacional de la eficiencia óptica de estructuras OLED**

**Iván Abelardo Jara Varela**

Profesor guía: Felipe Herrera Urbina

Tesis para optar al Título Profesional de  
Ingeniero Físico

Santiago – Chile

2019

© **Iván Abelardo Jara Varela** , 2019



• Algunos derechos reservados. Esta obra está bajo una Licencia Creative Commons Atribución-Chile 3.0. Sus condiciones de uso pueden ser revisadas en:  
<http://creativecommons.org/licenses/by/3.0/cl/>.

# **Simulación computacional de la eficiencia óptica de estructuras OLED**

**Iván Abelardo Jara Varela**

Este trabajo de titulación fue elaborado bajo la supervisión del profesor Dr. Felipe Herrera Urbina del Departamento de Física y ha sido aprobado por los miembros de la comisión calificadora del candidato, Dr. Ernesto Gramsch, Dr. Ignacio Olivares y Dr. Dinesh Singh.

Dr. Ernesto Gramsch \_\_\_\_\_

Dr. Ignacio Olivares \_\_\_\_\_

Dr. Dinesh Singh \_\_\_\_\_

---

Dr. Daniel Serafini  
Jefe de Carrera

## RESUMEN

Conocer las características ópticas de un dispositivo LED orgánico antes de su fabricación resulta útil para estudiar diferentes configuraciones y materiales que podrían ser ocupadas para crear nuevas y más eficientes estructuras, utilizando solo una simulación numérica.

Se desarrolló una simulación computacional en el lenguaje MATLAB para obtener la eficiencia radiativa de estructuras OLED de múltiples capas planas, utilizando un modelo de emisión dipolar en conjunto con el método de matrices de transferencia. Dentro de la información extraída de la literatura, se encuentra el índice de refracción de los diferentes materiales y el espectro de fotoluminiscencia del material orgánico emisor; en ambos casos, se deben conocer a lo largo del espectro visible, intervalo en el que se utilizan y para el cual se optimizan estos dispositivos de emisión de luz, en diferentes aplicaciones comerciales.

Se contrastaron los resultados de la simulación con resultados experimentales de la literatura respecto al tema, tanto a nivel cualitativo como cuantitativo, analizando el impacto de las consideraciones del modelo utilizado en la simulación, y también de los procesos físicos involucrados en la eficiencia radiativa de los dispositivos OLED. También se muestran algunas estrategias que podrían servir para aumentar la eficiencia en estructuras OLED, desde el punto de vista óptico.

## **AGRADECIMIENTOS**

Agradezco a

# TABLA DE CONTENIDO

<b>Índice de tablas</b>	<b>iii</b>
<b>Índice de ilustraciones</b>	<b>iv</b>
<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>1 Diodo Orgánico Emisor de Luz</b>	<b>2</b>
1.1 Usos y mercado . . . . .	3
1.2 Principio de operación de un OLED . . . . .	4
1.3 Eficiencia cuántica externa . . . . .	6
1.4 Materiales de un OLED . . . . .	7
1.5 Tipos de OLED . . . . .	8
<b>2 Electrodinámica en una estructura multicapa</b>	<b>12</b>
2.1 Electrodinámica en materiales . . . . .	12
2.2 Modelo de Lorentz . . . . .	14
2.3 Cálculo de matrices de transferencia . . . . .	16
2.4 Método de matrices de transferencia para una estructura multicapa . . . . .	22
<b>3 Modelo de emisión de un OLED</b>	<b>25</b>
3.1 Modelo de emisión dipolar . . . . .	26
3.2 Fotoluminiscencia de moléculas orgánicas . . . . .	33
<b>4 Descripción de la simulación de emisión en un OLED</b>	<b>36</b>
4.1 Sistema monocapa . . . . .	36
4.2 Etapas de la simulación . . . . .	38
<b>5 Modelamiento de un sistema multicapa OLED</b>	<b>40</b>
5.1 estructura OLED PEDOT:PSS . . . . .	40
5.2 Comparación con mediciones experimentales . . . . .	42
5.3 Análisis de potencia disipada en la estructura . . . . .	46
<b>6 Modificación de diferentes parámetros de la estructura OLED</b>	<b>48</b>
6.1 Espesor de la capa de TPD . . . . .	48
6.2 Distancia de la capa emisora al TPD . . . . .	49
6.3 Proporción de dipolos verticales . . . . .	49
6.4 Espesor de las capas de transporte de carga . . . . .	51
<b>Conclusión</b>	<b>52</b>
<b>Referencias bibliográficas</b>	<b>53</b>

## ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 2.1	Parámetros del modelo de Sellmeier para la sílica . . . . .	23
Tabla 2.2	Parámetros del modelo de Lorentz para la plata . . . . .	23

# ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

Figura 1.1	Esquema de un OLED. . . . .	2
Figura 1.2	Pantallas flexibles . . . . .	3
Figura 1.3	Densidad de estados en diferentes tipos de semiconductores . . . . .	4
Figura 1.4	HOMO y LUMO . . . . .	4
Figura 1.5	Esquema de operación de un OLED. . . . .	5
Figura 1.6	Disipación típica . . . . .	6
Figura 1.7	Materiales utilizados en un OLED. . . . .	7
Figura 1.8	Clasificación de OLED por cantidad de capas. . . . .	9
Figura 1.9	Clasificación de OLED por dirección de emisión. . . . .	10
Figura 1.10	Clasificación de OLED por tipo de superficie . . . . .	11
Figura 2.1	Estructura multicapa . . . . .	12
Figura 2.2	Esquema para una sola capa . . . . .	16
Figura 2.3	Diagrama de polarizaciones . . . . .	18
Figura 3.1	Modelo dipolar . . . . .	25
Figura 3.2	Dipolo oscilante . . . . .	26
Figura 3.3	Vector de Hertz para estructura multicapa . . . . .	27
Figura 3.4	Vector de onda paralelo . . . . .	28
Figura 3.5	Esquema de la potencia disipada por el dipolo . . . . .	28
Figura 3.6	Dipolos verticales y horizontales . . . . .	30
Figura 3.7	Canales de disipación . . . . .	31
Figura 3.8	Reflexión total interna . . . . .	32
Figura 3.9	Surface Plasmon Polariton . . . . .	33
Figura 3.10	Singlet-Triplet . . . . .	34
Figura 3.11	Espectro de fotoluminiscencia del Alq <sub>3</sub> . . . . .	35
Figura 4.1	Sistema monocapa . . . . .	36
Figura 4.2	Espectro de potencia de la monocapa . . . . .	37
Figura 4.3	Fracciones de potencia disipada en la estructura monocapa . . . . .	38
Figura 4.4	Estructura de la simulación. . . . .	38
Figura 4.5	Información necesaria para la simulación . . . . .	39
Figura 5.2	Índices de refracción complejos experimentales para materiales inorgánicos	41
Figura 5.3	Índices de refracción complejos experimentales para materiales orgánicos .	42
Figura 5.4	Potencia disipada por la estructura OLED multicapa . . . . .	43
Figura 5.5	Montaje experimental . . . . .	43
Figura 5.6	Simulación vs experimento, TE . . . . .	44
Figura 5.7	Simulación vs experimento, TM . . . . .	44
Figura 5.8	Montaje experimental con prisma . . . . .	45
Figura 5.9	Simulación vs experimento, con prisma, TE . . . . .	45
Figura 5.10	Simulación vs experimento, con prisma, TM . . . . .	45
Figura 5.11	Fracciones de potencia para cada canal de disipación . . . . .	46
Figura 5.12	Fracciones de potencia para polarizaciones TM y TE . . . . .	47
Figura 6.1	Espesor de la capa de TPD . . . . .	48
Figura 6.2	Distancia de los dipolos a la capa de TPD . . . . .	49
Figura 6.3	Proporción de dipolos verticales . . . . .	50
Figura 6.4	Emisión de dipolos verticales y horizontales . . . . .	50
Figura 6.5	Espesor de la capa de TPD vs Alq <sub>3</sub> . . . . .	51



# INTRODUCCIÓN

Las propiedades electroluminiscentes de algunos compuestos orgánicos se conocen desde hace más de 50 años, pero la investigación en dispositivos capaces de aprovecharlos aumentó a partir de 1987, año en el cual se construyó el primer OLED funcional. Sus principales usos comerciales están en el área de la iluminación y la fabricación de pantallas, por lo que la mayor parte de la literatura se enfoca en sus propiedades y eficiencia en el espectro visible.

Se pueden definir eficiencias para cada aspecto del funcionamiento de una estructura OLED, ya sea eléctrica, radiativa (óptica) o cuántica. Un estudio acabado y minucioso de cada uno de estos parámetros es necesario para una optimización efectiva de un dispositivo OLED; la eficiencia radiativa de una de estas estructuras puede ser muy prometedora, pero quizás no cumpla con las características eléctricas que se requieran.

No obstante lo anterior, si se conocen las eficiencias eléctricas y cuánticas de estructuras similares a las analizadas, es posible estimar la eficiencia óptica (radiativa) de una estructura OLED que aún no ha sido fabricada. Para ello, se requieren las propiedades ópticas de la estructura y de los materiales a simular, y también se precisa de un modelo capaz de describir los procesos físicos que ocurran dentro de la estructura después de que la luz es generada.

El modelo utilizado para simular la emisión de la luz en la estructura OLED es el modelo clásico de emisión dipolar, en el que un dipolo puntual oscilante genera la radiación emitida por el dispositivo OLED. Junto con este modelo, se utiliza el método de matrices de transferencia, que describe la respuesta óptica del conjunto de capas que componen la estructura OLED. Los resultados obtenidos luego son comparados con resultados experimentales de la literatura, y finalmente se plantean posibles estrategias para la optimización de la eficiencia radiativa de dispositivos OLED.

# CAPÍTULO 1. DIODO ORGÁNICO EMISOR DE LUZ

Un OLED (Organic Light-Emitting Diode) es un dispositivo electroluminiscente de estado sólido de varias capas de compuestos orgánicos, formadas por deposición, inyección o impresión sobre un sustrato rígido o flexible transparente, como un vidrio o plástico.

Cada capa cumple una o más funciones en la estructura, ya sea para la inyección, transporte o recombinación de portadores de carga (electrones y huecos), o para entregarle rigidez a la estructura. Dependiendo de la dirección de emisión que se requiera, las capas deben tener una alta transparencia, pero conservar sus características químicas y eléctricas.

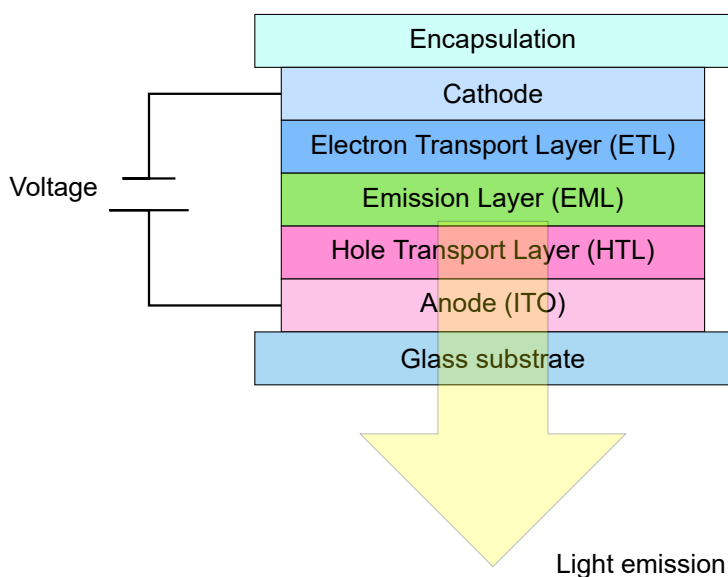


Figura 1.1: En un OLED, la capa de emisión y las de transporte de carga son compuestos orgánicos.

Sus principales ventajas sobre otros dispositivos de generación de luz son la relativa facilidad de construcción, su alta eficiencia en la conversión de corriente eléctrica, y, en sustrato adecuados, una mayor resistencia mecánica.

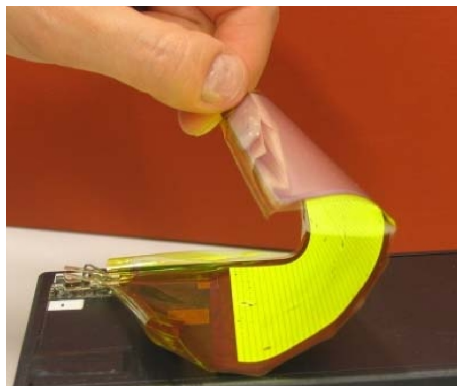
La principal desventaja es su escasa eficiencia externa; gran parte de la energía generada se transforma en modos no radiativos, quedando atrapada dentro de la estructura. Los materiales orgánicos que componen el OLED son muy vulnerables al daño por el agua, y presentan cortas vidas útiles comparadas con otras tecnologías, en especial los OLED de frecuencia azul.

## 1.1 USOS Y MERCADO

El primer OLED funcional se construyó en 1987 [Tang & VanSlyke (1987)], y su producción a nivel comercial se inició en los años 90. Actualmente, sus principales usos se concentran en:

- Teléfonos y relojes inteligentes: Las pantallas OLED son más livianas y delgadas que otras tecnologías, haciéndolas ideales en aparatos portátiles. La relativa facilidad con la que se pueden construir permite incluso integrarlas en la ropa [Choi et al. (2017)]
- Televisores: Ofrecen colores más nítidos y logran negros perfectos, con un mayor ángulo de visión, comparados con un LCD [Chen et al. (2018)]

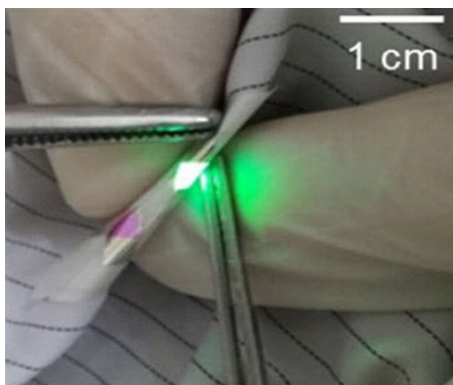
Samsung, a pesar de bajar su representación en el mercado de teléfonos inteligentes, es el responsable del 93.3% de las ventas de pantallas OLED en el mundo [Sohail (2018)].



(a) Matriz OLED flexible en un sustrato plástico.



(b) Teléfono inteligente con pantalla flexible.



(c) OLED sobre un trozo de tela.

Figura 1.2: La aplicación más novedosa y representativa de esta tecnología es la (a) pantalla flexible [Haskal et al. (2007)], como se ve a la derecha (b) en el Samsung Fold [Maring (2019)]. Abajo, (c) una aplicación para la que se requiere aún más flexibilidad y resistencia.

## 1.2 PRINCIPIO DE OPERACIÓN DE UN OLED

En los semiconductores orgánicos se forman los orbitales HOMO y LUMO. La diferencia de energía de estos orbitales determina en gran parte las características eléctricas y ópticas del semiconductor orgánico, como su absorción, emisión y transporte de cargas.

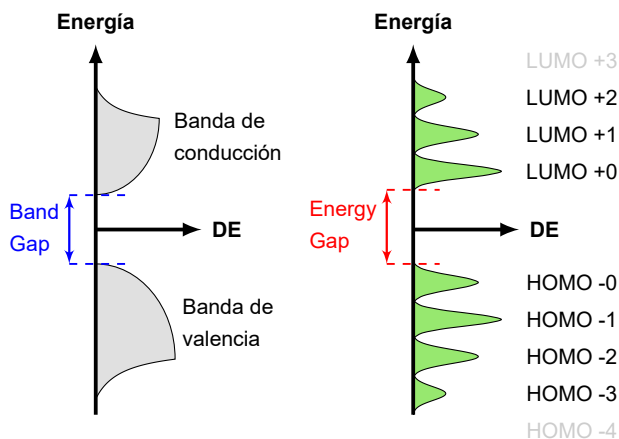


Figura 1.3: Niveles de energía y densidad de estados en semiconductores inorgánicos y orgánicos. La diferencia entre las energías de los orbitales (bandas) se denomina energy (band) gap. Adaptado de [Lee (2017)].

El orbital molecular desocupado más bajo (Lowest Unoccupied Molecular Orbital, LUMO) es el equivalente a la banda de conducción, mientras que el orbital molecular ocupado más alto (Highest Occupied Molecular Orbital, HOMO) es el símil de la banda de valencia, como se ve en la **Fig.(1.3)**.

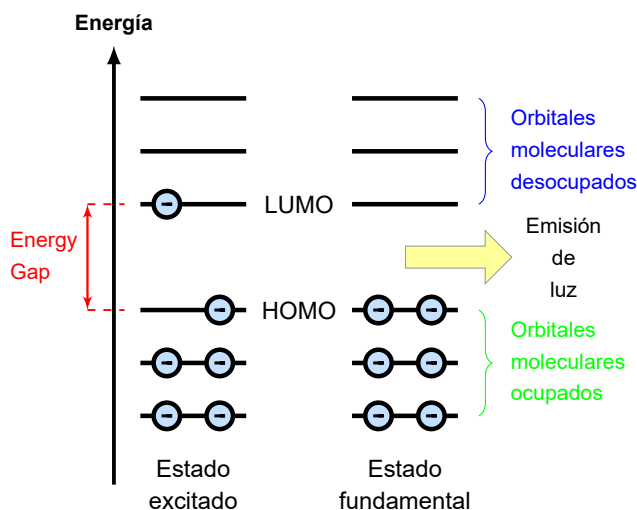


Figura 1.4: Emisión de luz desde un semiconductor orgánico.

Al igual que en un semiconductor inorgánico, cuando un electrón decae a un nivel de energía más bajo lo hace liberando un fotón, como se ve en la **Fig.(1.4)**. Esta energía puede transformarse en luz visible emitida fuera de la estructura OLED, pero hay varios procesos que lo impiden, disminuyendo la eficiencia radiativa.

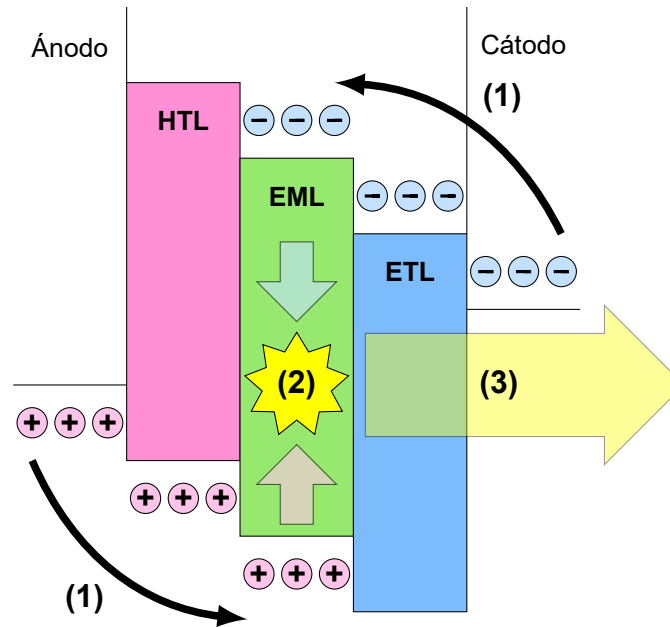


Figura 1.5: Se observan las principales etapas en la generación de luz en un OLED. En (1), los electrones y huecos son inyectados a ETL y HTL, para luego pasar a la capa emisora, EML. Se forma un par electrón-hueco (2), denominado excitón; finalmente, la recombinación del excitón genera un fotón (3). El voltaje aplicado a la estructura debe superar la diferencia de potencial debido a las diferentes funciones trabajo de cátodo y ánodo. Adaptado de [Karzazi (2014)].

La eficiencia de este dispositivo no depende solo de la eficiencia cuántica del material emisor; puede existir un ajuste deficiente de las funciones trabajo de los electrodos con respecto a los HOMO/LUMO de la capas orgánicas, provocando que las cargas queden atrapadas, que las capas limiten el movimiento de los portadores de carga, disminuyendo su concentración y la formación de excitones, etc.

A esta estructura básica se le pueden añadir más capas, por ejemplo, de inyección de cargas, o modificar su geometría y las características de sus superficies, pero la descripción fundamental de su operación es la misma.

### 1.3 EFICIENCIA CUÁNTICA EXTERNA

La eficiencia cuántica externa de un OLED está descrita como:

$$\eta_{EQE} = \gamma \cdot \eta_{S/T} \cdot q \cdot \eta_{out} \quad (1.1)$$

También puede ser descrito como la eficiencia cuántica interna,  $\eta_{IQE} = \gamma \eta_{S/T} q$ , multiplicado por el factor  $\eta_{out}$ .

$$\eta_{EQE} = \eta_{IQE} \cdot \eta_{out} \quad (1.2)$$

- $\gamma$ : Factor que describe la población de portadores de carga y la fracción que se convierte en excitones. Se puede entender como una medida del balance entre la cantidad de electrones y huecos; un valor de 1 indica que la proporción es 1:1.
- $\eta_{S/T}$ : Fracción de excitones que decae radiativamente. Tiene que ver con el tipo de proceso que se da al interior de la capa emisora; un emisor fluorescente tendrá un valor de 1/4, mientras que uno fosforescente puede llegar a la unidad.
- $q$ : Fracción de los excitones que producen un fotón, en vez de disiparse por otros canales dentro de la estructura OLED.
- $\eta_{out}$ : Fracción de fotones que escapan de la estructura hacia el exterior del OLED. Equivale al porcentaje de potencia disipada hacia el aire.

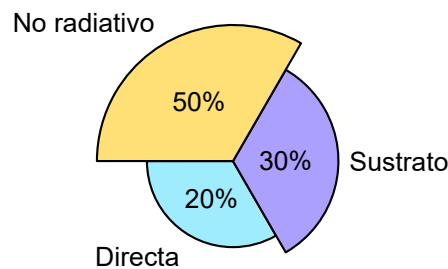


Figura 1.6: Potencias disipadas típicas en una estructura OLED convencional. La potencia disipada al canal directo es equivalente a  $\eta_{out}$ .

## 1.4 MATERIALES DE UN OLED

Los materiales utilizados en un OLED deben cumplir una serie de condiciones; ser capaces de formar capas delgadas, ser relativamente estables al aplicarles corriente eléctrica o luz y poseer propiedades ópticas acordes al uso que se les pretende dar.

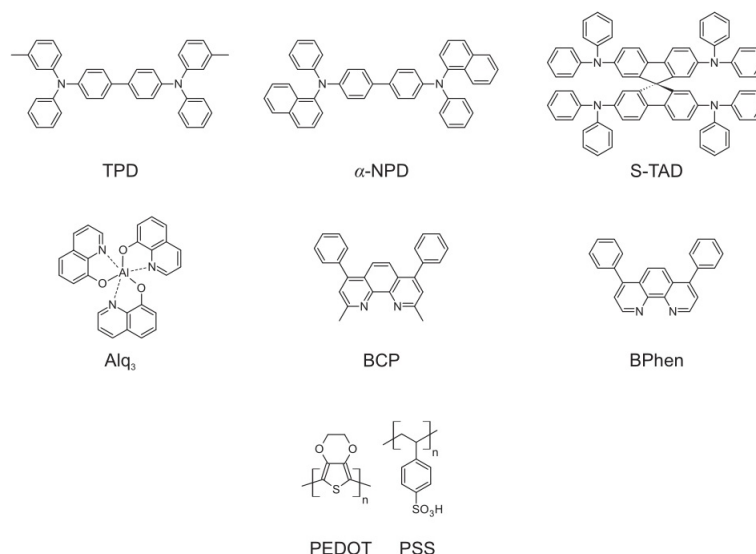


Figura 1.7: Algunos materiales orgánicos que pueden encontrarse en un OLED. Extraído de [Brütting et al. (2013)].

En la **Fig.(1.7)** se pueden ver los materiales TPD,  $\alpha$ -NPD y S-TAD, utilizados para el transporte de huecos. Alq<sub>3</sub>, BCP y BPhen son utilizados para el transporte de electrones. El PEDOT:PSS es un polímero conductor utilizado como un inyector de huecos, porque puede aumentar la función trabajo del ITO.

**Alq<sub>3</sub>** Tris (8-hidroxiquinolato) de aluminio, o Alq<sub>3</sub>, es un material utilizado como transportador de electrones y como emisor de frecuencia verde. Se puede depositar en láminas a través de técnicas de evaporación, gracias a su estabilidad térmica.

La tasa de evaporación determina las características de la superficie de la capa formada y su eficiencia luminosa [Lee et al. (2004)], y también sus características eléctricas y emisivas como transportador de electrones y como emisor [Mu et al. (2004)].

También puede ser depositado en forma de solución por medio de spin coating, lo que combinado con otras técnicas de tratamiento de materiales permiten aumentar la eficiencia y estabilidad de

la estructura, además de ofrecer un método más práctico de fabricación en comparación a la deposición térmica [Mao et al. (2011)].

**PEDOT:PSS** El Poli(3,4-etilendioxitiofeno)-poli(estireno sulfonato) o PEDOT:PSS es una mezcla de dos polímeros; se utiliza como capa inyectora de huecos, HIL, y por su habilidad para nivelar la superficie del ITO, material con el que frecuentemente se coloca en la estructura OLED. También presenta una alta conductividad eléctrica, alta transparencia y tiene un buen comportamiento al formar capas planas.

Es bastante ácido, por lo que corroe el ITO. También absorbe humedad y su función trabajo genera acumulación de carga en la interfaz con la capa transportadora de huecos (HTL) [Ho et al. (2015)].

**TPD** La N,N'-bis(3-metilfenil)-N,N'-difenilbencidina (TPD) es una diamina aromática usada como transportador de huecos. También sirve para bloquear la migración de electrones hacia el ánodo, lo que puede producir recombinación fuera de la capa emisora, un efecto indeseado [Celii et al. (1997)] [Kalinowski & Szybowska (2008)].

Al igual que los demás materiales orgánicos, puede ser depositado por evaporación o spin coating, lo que conlleva diferentes ventajas y desventajas [Shibata et al. (2015)].

**ITO** El óxido de indio y estaño, o ITO (Indium Tin Oxide) es utilizado como inyector de huecos y como electrodo. También es utilizado en otras tecnologías, como LCD. Tiene una alta transparencia y función trabajo comparado con el FTO (óxido de estaño dopado con fluor), pero es menos estable y susceptible a desgaste expuesto al aire [Michael (2012)]. La rugosidad de su superficie influye mucho en sus características eléctricas [Tak et al. (2002)].

## 1.5 TIPOS DE OLED

El diseño y fabricación de OLEDs busca principalmente incrementar su eficiencia externa, esto es, aumentar la energía extraída de la estructura multicapa. Es una tarea compleja, puesto que al modificar algún parámetro se puede perjudicar otro, como la eficiencia eléctrica. Es por esto que se ha experimentado con diferentes materiales, geometrías y procesos de fabricación.



### Clasificación por cantidad de capas

Desde que se construyó el primer OLED funcional en 1987, la cantidad de capas utilizadas en sus estructuras ha ido en aumento, con el fin de mejorar su eficiencia eléctrica y luminosa.

- Monocapa: El sistema más simple; consta de ánodo, capa emisora y cátodo. Generalmente utilizado solo como ejemplo, puesto que tiene una eficiencia baja comparada con el resto de estructuras.
- Bicapa: Consta de ánodo, capa de transporte de huecos (HTL), capa de transporte de electrones (ETL) y cátodo. Presenta una eficiencia mayor a la monocapa, y menor a la multicapa.
- Multicapa: Muy similar a la bicapa, pero se agrega una capa emisora entre la capa HTL y ETL, disminuyendo la concentración de cargas, pero aumentando la eficiencia radiativa. Es el tipo de estructura que se utiliza en la industria.

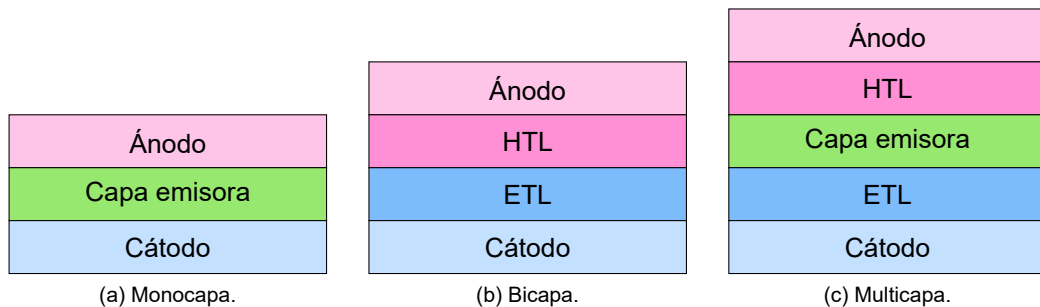


Figura 1.8: De más a menos simple.  
Adaptado de [Uniyal et al. (2016)].

Más capas pueden ser añadidas; se puede potenciar ánodo y cátodo con capas de inyección de cargas, HIL (inyección de huecos) y EIL (inyección de electrones). Generalmente se consideran parte de los electrodos.

### Clasificación por dirección de emisión

La emisión de un OLED ocurre en todas direcciones, pero su estructura y componentes pueden concentrarla hacia una dirección específica. En este caso, son muy importantes la transparencia y reflectancia de las capas involucradas.

- Bottom emission: El sustrato y el cátodo reflectante se encuentran en posiciones contrarias en la estructura. La eficiencia externa para una estructura de este tipo se encuentra entre 20 y 30%.
- Top emission: Se obtiene una mayor eficiencia comparada con un OLED bottom emission [Lu et al. (2002)], pero conlleva problemas de fabricación al depositarse la capa de ITO sobre la capa orgánica; el proceso puede destruir las moléculas orgánicas del compuesto emisor [Wei et al. (2010)].

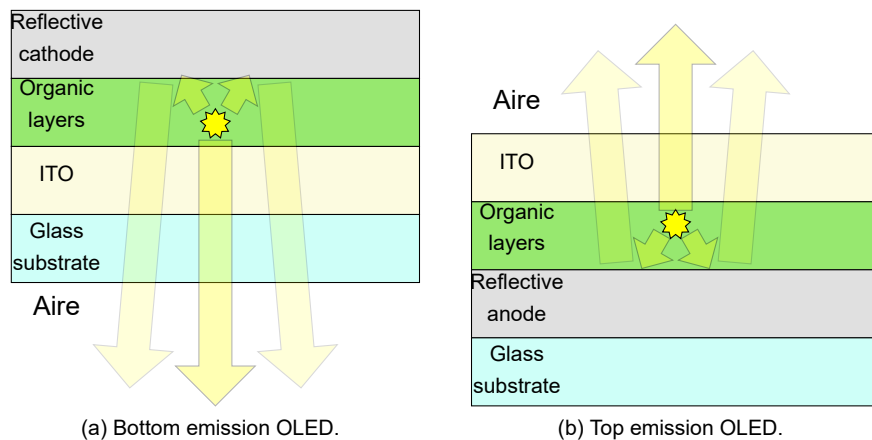


Figura 1.9: Estructuras con diferentes direcciones de emisión.  
Adaptado de [Wei et al. (2010)].

### Clasificación por tipo de superficie

A continuación se presentan algunas estrategias utilizadas para aumentar la extracción de energía hacia fuera de la estructura OLED, a través de la modificación de la geometría de las superficies de las capas involucradas.

- Nanoestructura: Generalmente fabricadas en el sustrato con una distribución aleatoria, para extraer más energía de los modos guiados. La altura de estas nanoestructuras influyen la eficiencia, la que puede llegar a 50%, a diferencia del 20-30% de una estructura convencional [Jeon et al. (2008)], [Lee et al. (2018)].
- Microlentes: Utilizado para extraer parte de la energía atrapada en el sustrato, incrementando el ángulo crítico para el cual la luz queda atrapada en la estructura. Los microlentes se construyen con diferentes geometrías, siendo los semiesféricos los que entregan un mayor aumento en la eficiencia [Kim et al. (2016)]. Otras geometrías se han

probado, como hexagonales [Wei et al. (2008)], así como también otros patrones en los que se disponen los microlentes [Lin et al. (2008)]. En mayor o menor medida, todos aumentan la eficiencia del dispositivo convencional.

- Micro-mesh: Consiste en una estructura OLED donde la mayoría de sus capas son una superficie no plana periódica, para extraer aún más energía atrapada en el OLED. Su fabricación no es tan sencilla como en un OLED convencional, pero es capaz de alcanzar una eficiencia cuántica externa de 22%, que combinado con microlentes, puede llegar a 46% [Chen et al. (2016)].

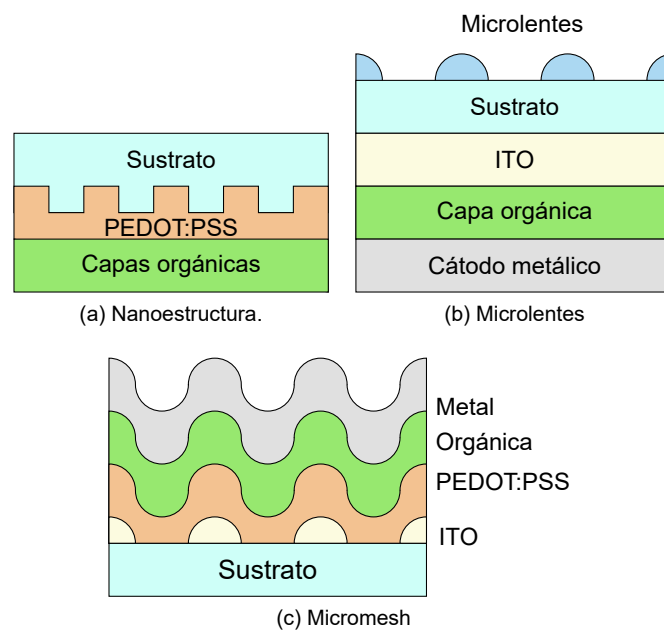


Figura 1.10: Tipos de superficie en una estructura OLED.

## CAPÍTULO 2. ELECTRODINÁMICA EN UNA ESTRUCTURA MULTICAPA

Al caracterizar una estructura multicapa OLED, es necesario tener en cuenta sus características ópticas y geométricas, esto es, el espesor de cada una de sus capas, y sus índices de refracción complejos.

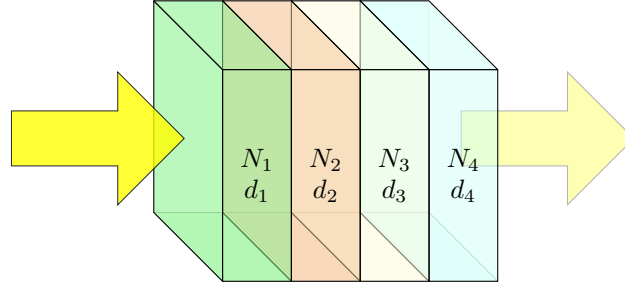


Figura 2.1: Irradiación normal sobre una estructura multicapa, con índices de refracción complejos  $N_i$  y espesores  $d_i$ .

Con los datos que se muestran en la **Fig.(2.1)**, además del ángulo de incidencia, es posible calcular las fracciones de energía transmitidos, reflejados y absorbidos por la estructura, utilizando el método de matrices de transferencia. En este método, cada capa se define mediante una matriz de  $2 \times 2$ , cuya multiplicación entrega las características ópticas del conjunto.

$$M_{\text{conjunto}} = M_1 \cdot M_2 \cdot M_3 \cdot \dots \cdot M_n \quad (2.1)$$

### 2.1 ELECTRODINÁMICA EN MATERIALES

Las ecuaciones de Maxwell son las siguientes

$$\text{Ley de Gauss} \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_o} \quad (2.2)$$

$$\text{Ley de Gauss magnética} \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.3)$$

$$\text{Ley de inducción de Faraday} \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.4)$$

$$\text{Ley de Ampère} \quad \nabla \times \mathbf{B} = \mu_o \left( J + \epsilon_o \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) \quad (2.5)$$

Para el caso que se describirá,  $\rho = 0$ . Sobre la corriente,  $J$ , tenemos

$$J = J_{\text{Conducción}} + J_{\text{Magnetización}} + J_{\text{Polarización}} \quad (2.6)$$

En nuestro caso, los términos de magnetización y conducción son nulas. Esta polarización se relaciona con el campo eléctrico de la siguiente manera

$$P = P_o + \varepsilon_o \chi^{(1)} E + \varepsilon_o \chi^{(2)} E^2 + \varepsilon_o \chi^{(3)} E^3 + \dots \quad (2.7)$$

donde  $\chi$  es la suceptibilidad eléctrica. Como nuestro caso es lineal, resulta

$$P = \varepsilon_o \chi E \quad (2.8)$$

La relación entre la corriente de polarización y la polarización es la siguiente

$$J = J_{\text{Polarización}} = \frac{\partial P}{\partial t} \quad (2.9)$$

De las consideraciones anteriores, las ecuaciones de Maxwell para este caso son

$$\nabla \cdot E = 0 \quad (2.10)$$

$$\nabla \cdot B = 0 \quad (2.11)$$

$$\nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t} \quad (2.12)$$

$$\nabla \times B = \mu_o \frac{\partial P}{\partial t} + \mu_o \varepsilon_o \frac{\partial E}{\partial t} \quad (2.13)$$

Aplicando el rotacional a la **Ec.(2.12)**, se tiene lo siguiente

$$\nabla \times (\nabla \times E) = -\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times B) \quad (2.14)$$

Utilizando la propiedad  $\nabla \times (\nabla \times E) = \nabla (\nabla \cdot E) - \nabla^2 E$  y la **Ec.(2.13)** en la **Ec.(2.14)**, se obtiene

$$\nabla (\nabla \cdot E) - \nabla^2 E = -\left( \mu_o \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} + \mu_o \varepsilon_o \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} \right) \quad (2.15)$$

con la **Ec.(2.8)** y **Ec.(2.10)**, la **Ec.(2.15)** queda

$$\nabla^2 E = \mu_o \varepsilon_o \chi \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} + \mu_o \varepsilon_o \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} \quad (2.16)$$

También sabemos que  $\chi = \varepsilon - 1$ , siendo  $\varepsilon$  la constante dieléctrica. Reordenando, se obtiene

$$\nabla^2 E = \frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} \quad (2.17)$$

En general,  $\chi$ , y por consiguiente  $\varepsilon$ , es un número complejo. Definiendo una onda plana en una dimensión de la siguiente forma

$$E = E_o e^{i(\kappa x - \omega t)} \quad (2.18)$$

y aplicando esta solución a la **Ec.(2.17)**

$$-\kappa^2 E_o e^{i(\kappa x - \omega t)} = -\omega^2 \frac{\varepsilon}{c^2} E_o e^{i(\kappa x - \omega t)} \quad (2.19)$$

$$\kappa^2 = \omega^2 \frac{\varepsilon}{c^2} \quad (2.20)$$

$$\left( \frac{c\kappa}{\omega} \right)^2 = \varepsilon \quad (2.21)$$

identificamos el número  $\frac{c\kappa}{\omega}$  como el índice de refracción complejo  $N$ , entonces

$$N^2 = \varepsilon \quad (2.22)$$

$$N^2 = (n + ik)^2 \quad (2.23)$$

$$N^2 = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \quad (2.24)$$

Con  $n$  el índice de refracción real y  $k$  el coeficiente de extinción, relacionado a la absorción. Aplicando algunas propiedades de los números complejos, finalmente se tiene

$$n = \sqrt{\frac{|\varepsilon| + \varepsilon_1}{2}} \quad (2.25)$$

$$k = \sqrt{\frac{|\varepsilon| - \varepsilon_1}{2}} \quad (2.26)$$

$$\text{con } |\varepsilon| = \sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2}$$

## 2.2 MODELO DE LORENTZ

En un primer acercamiento al problema, se estimaron los índices de refracción complejos a través del modelo de Lorentz. Para considerar la dependencia entre la frecuencia,  $\omega$ , y la susceptibilidad (y por ende el índice de refracción),  $\chi$ , es necesario un modelo que de cuenta de la respuesta de los electrones frente a una onda. Al igual que antes, consideramos los cálculos en una dimensión,

relacionando la polarización,  $P$ , con la cantidad de electrones,  $N_e$ , y un pequeño desplazamiento del electrón desde su posición de equilibrio en el átomo,  $r$ , como se puede observar en la **Ec.(2.27)**.

$$P = qN_e r \quad (2.27)$$

Utilizando las ecuaciones de Newton, se tiene que la masa por la aceleración del electrón es igual a la suma de las fuerzas sobre el electrón

$$m\ddot{r} = qE - m\gamma\dot{r} - \kappa r \quad (2.28)$$

en este caso,  $k$  es la constante del "oscilador", y el segundo miembro de la derecha da cuenta de la absorción (disipación). Reordenando, se obtiene

$$\ddot{r} + \gamma\dot{r} + \omega_o^2 r = \frac{q}{m} E \quad (2.29)$$

con  $\omega_o = \sqrt{\frac{k}{m}}$  la frecuencia de oscilación natural asociada a esta constante y a la masa del electrón. La solución de la **Ec.(2.29)** es la siguiente

$$r = \frac{q}{m} \left( \frac{E}{\omega_o^2 - i\omega\gamma - \omega^2} \right) \quad (2.30)$$

Volviendo a la **Ec.(2.27)** tenemos

$$P = \frac{q^2 N_e}{m} \left( \frac{1}{\omega_o^2 - i\omega\gamma - \omega^2} \right) E \quad (2.31)$$

entonces, la susceptibilidad es

$$\chi = \frac{q^2 N_e}{\varepsilon_o m} \left( \frac{1}{\omega_o^2 - i\omega\gamma - \omega^2} \right) \quad (2.32)$$

Como  $\varepsilon = 1 + \chi$ , la constante dieléctrica es

$$\varepsilon = 1 + \frac{q^2 N_e}{\varepsilon_o m} \left( \frac{1}{\omega_o^2 - i\omega\gamma - \omega^2} \right) \quad (2.33)$$

De manera general, se tiene lo siguiente

$$\varepsilon = 1 + \frac{q^2}{m\varepsilon_o} \sum_j \frac{f_j N_{ej}}{\omega_{oj}^2 - i\omega\gamma_j - \omega^2} \quad (2.34)$$

con  $f_j$  la fuerza de oscilación de la especie  $j$  – ésima de electrones activos en el material.

## 2.3 CÁLCULO DE MATRICES DE TRANSFERENCIA

A continuación, se describe el método de matrices de transferencia, desarrollado desde el enfoque de las interfaces entre capas [Macleod (2010)].

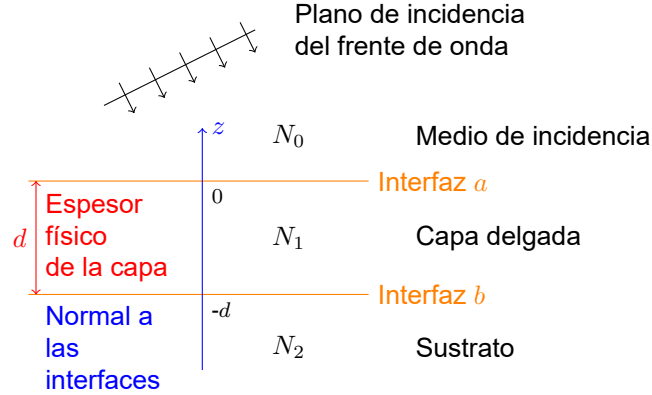


Figura 2.2: Esquema de la situación de una capa.

### Incidencia oblicua

Para el caso de incidencia oblicua en modo TM, las componentes del campo eléctrico y magnético en el eje  $x$  son las siguientes

$$E_{ix} = E_i \cos \theta_o \quad (2.35)$$

$$E_{rx} = E_r \cos \theta_o \quad (2.36)$$

$$E_{tx} = E_t \cos \theta_1 \quad (2.37)$$

$$H_i = \zeta_o E_{ix} \quad (2.38)$$

$$H_r = \zeta_o E_{rx} \quad (2.39)$$

$$H_t = \zeta_1 E_{tx} \quad (2.40)$$

donde  $\theta_o$  es el ángulo de incidencia,  $\theta_1$  el ángulo en el medio con índice de refracción  $N_1$ , y  $\zeta_o$  y  $\zeta_1$  factores directamente proporcionales a  $N_o$  y  $N_1$ , respectivamente. Como estamos interesados en encontrar razones ( $R$ ,  $T$  y  $A$ ), la constante que hace  $\zeta_o = \xi N_o$  se considerará igual a uno,



entonces

$$\zeta_o = N_o \quad (2.41)$$

$$\zeta_1 = N_1 \quad (2.42)$$

Las ecuaciones de continuidad en la interfaz  $a$  son

$$E_i + E_r = E_t \quad (2.43)$$

$$\zeta_o E_{ix} - \zeta_o E_{rx} = \zeta_1 E_{tx} \quad (2.44)$$

y de la última ecuación, se tiene

$$\frac{\zeta_o}{\cos \theta_o} H_i - \frac{\zeta_o}{\cos \theta_o} H_r = \frac{\zeta_1}{\cos \theta_1} H_t \quad (2.45)$$

llamamos a  $\frac{\zeta_o}{\cos \theta_o}$  como  $\eta_o$ .

Para incidencia oblicua en modo TE, el tratamiento es igual, y se tiene

$$E_{iy} = E_i \quad (2.46)$$

$$E_{ry} = E_r \quad (2.47)$$

$$E_{ty} = E_t \quad (2.48)$$

$$H_i = \zeta_o \cos \theta_o E_{iy} \quad (2.49)$$

$$H_r = \zeta_o \cos \theta_o E_{ry} \quad (2.50)$$

$$H_t = \zeta_1 \cos \theta_1 E_{ty} \quad (2.51)$$

en este caso,  $\eta_o = \zeta_o \cos \theta_o$ . Resumiendo, obtenemos

$$\text{Modo TM}_{\eta_o} = \frac{N_o}{\cos \theta_o} \quad (2.52)$$

$$\text{Modo TE}_{\eta_o} = N_o \cos \theta_o \quad (2.53)$$

Notar que en el caso de incidencia normal los coeficientes  $\eta$  son iguales para TE y TM. En la **Fig.(2.3)** se pueden observar los modos TE y TM. Para el modo TM, o polarización p, tenemos que el campo magnético es paralelo a la interfaz entre la capa 1 y 2, mientras que para el modo TE o polarización s es el campo eléctrico el paralelo a esta interfaz.

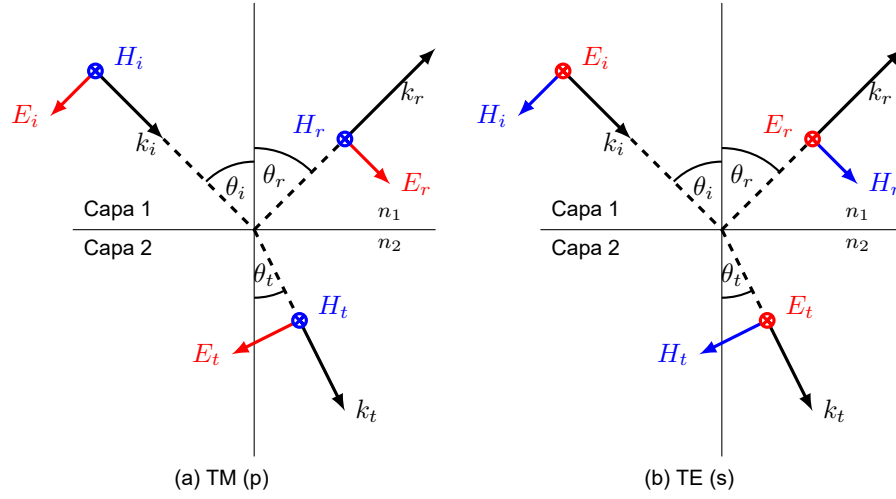


Figura 2.3: En (a) se observa el modo TM, donde el campo eléctrico tiene una componente horizontal sobre la interfaz entre la capa 1 y 2. En (b), el campo eléctrico en modo TE es paralelo a la interfaz entre las dos capas.

### Matriz de transferencia para una capa

Descomponiendo los campos eléctrico y magnético en ondas incidentes a una interfaz (superíndice +) y ondas que se alejan de una interfaz (con -), obtenemos las siguientes ecuaciones

$$E_b = E_{1b}^+ + E_{1b}^- \quad (2.54)$$

$$H_b = -\eta_1 E_{1b}^+ + \eta_1 E_{1b}^- \quad (2.55)$$

Escribiendo  $E_{1b}^+$ ,  $E_{1b}^-$ ,  $H_{1b}^+$  y  $H_{1b}^-$  en términos de  $H_b$  y  $E_b$ , tenemos

$$E_{1b}^+ = \frac{1}{2} \left( -\frac{H_b}{\eta_1} + E_b \right) \quad (2.56)$$

$$E_{1b}^- = \frac{1}{2} \left( \frac{H_b}{\eta_1} + E_b \right) \quad (2.57)$$

$$H_{1b}^+ = \frac{1}{2} (H_b - \eta_1 E_b) \quad (2.58)$$

$$H_{1b}^- = \frac{1}{2} (H_b + \eta_1 E_b) \quad (2.59)$$

La diferencia de fase entre los campos de la interfaz  $a$  y  $b$  es

$$\delta = \frac{2\pi N_1 d \cos \theta_o}{\lambda} \quad (2.60)$$

De la **Fig.(2.2)**, tenemos que

$$E_{1a}^+ e^{i \frac{2\pi N_1 d \cos \theta_o}{\lambda} (-d-0)} = E_{1b}^+ = E_{1a}^+ e^{-i\delta} \quad (2.61)$$

$$E_{1a}^- e^{i \frac{2\pi N_1 d \cos \theta_o}{\lambda} (0-(-d))} = E_{1b}^- = E_{1a}^- e^{i\delta} \quad (2.62)$$

Lo mismo se aplica para el campo magnético, entonces

$$E_{1a}^+ = \frac{1}{2} \left( -\frac{H_b}{\eta_1} + E_b \right) e^{i\delta} \quad (2.63)$$

$$E_{1a}^- = \frac{1}{2} \left( \frac{H_b}{\eta_1} + E_b \right) e^{-i\delta} \quad (2.64)$$

$$H_{1a}^+ = \frac{1}{2} (H_b - \eta_1 E_b) e^{i\delta} \quad (2.65)$$

$$H_{1a}^- = \frac{1}{2} (H_b + \eta_1 E_b) e^{-i\delta} \quad (2.66)$$

y los campos en la interfaz

$$E_a = \frac{1}{2} \left( \frac{H_b}{\eta_1} e^{-i\delta} + E_b e^{-i\delta} \right) + \frac{1}{2} \left( -\frac{H_b}{\eta_1} e^{i\delta} + E_b e^{i\delta} \right) \quad (2.67)$$

$$E_a = E_b \cos \delta - i \frac{H_b}{\eta_1} \sin \delta \quad (2.68)$$

$$H_a = \frac{1}{2} (H_b + \eta_1 E_b) e^{-i\delta} + \frac{1}{2} (H_b - \eta_1 E_b) e^{i\delta} \quad (2.69)$$

$$H_a = -i\eta_1 E_b \sin \delta + H_b \cos \delta \quad (2.70)$$

La matriz de transferencia que resulta es la siguiente

$$\begin{bmatrix} E_a \\ H_a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta & -(i \sin \delta)/\eta_1 \\ -i\eta_1 \sin \delta & \cos \delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_b \\ H_b \end{bmatrix} \quad (2.71)$$

Dividiendo por  $E_b$  para normalizar, obtenemos lo siguiente

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta & -(i \sin \delta)/\eta_1 \\ -i\eta_1 \sin \delta & \cos \delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_2 \end{bmatrix} \quad (2.72)$$

Como se puede observar en la ecuación anterior, la matriz principal contiene toda la información para describir el comportamiento óptico de la capa, como su espesor y el índice de refracción complejo, además del ángulo de incidencia y la longitud de onda de la radiación que traspasa la

capa, como se ve en la **Ec.(2.60)**.

### Reflectancia, Transmitancia y Absortancia, para un sistema multicapa

De la **Ec.(2.72)**, se puede obtener

$$E_i + E_r = B \quad (2.73)$$

$$\eta_o E_i - \eta_o E_r = C \quad (2.74)$$

reordenando, tenemos lo siguiente

$$E_r = \frac{B\eta_o - C}{2\eta_o} \quad (2.75)$$

$$E_i = \frac{\eta_o B + C}{2\eta_o} \quad (2.76)$$

Estableciendo  $\rho$  como la relación entre  $E_r$  y  $E_i$  de la siguiente manera

$$\rho = \frac{E_r}{E_i} = \frac{\eta_o B - C}{\eta_o B + C} \quad (2.77)$$

se tiene que la reflectancia es

$$R = \rho\rho^* = \left( \frac{\eta_o B - C}{\eta_o B + C} \right) \left( \frac{\eta_o B - C}{\eta_o B + C} \right)^* \quad (2.78)$$

Dividiendo por  $B$ , definiendo  $Y = \frac{C}{B}$ , tenemos

$$R = \left( \frac{\eta_o - Y}{\eta_o + Y} \right) \left( \frac{\eta_o - Y}{\eta_o + Y} \right)^* \quad (2.79)$$

La irradiancia neta a la salida de la capa es

$$I_2 = \frac{1}{2} \text{Re}(E_2 H_2^*) \quad (2.80)$$

$$I_2 = \frac{1}{2} \text{Re}(E_2 \eta_2^* E_2^*) \quad (2.81)$$

$$= \frac{1}{2} \text{Re}(\eta_2^*) E_2 E_2^* \quad (2.82)$$

la irradiancia que entra en la capa

$$(1 - R)I_i = \frac{1}{2} \text{Re}(BC^*) E_2 \rightarrow I_i = \frac{\text{Re}(BC^*) E_2 E_2^*}{2(1 - R)} \quad (2.83)$$

La transmitancia es la relación entre la irradiancia incidente y la que sale de la capa

$$T = \frac{I_2}{I_i} = \frac{\text{Re}(\eta_2)(1 - R)}{\text{Re}(BC^*)} \quad (2.84)$$

La relación entre la absorptancia, transmitancia y reflectancia es la siguiente

$$R + T + A = 1 \quad (2.85)$$

entonces

$$A = 1 - R - T = (1 - R) \left( 1 - \frac{\text{Re}(\eta_2)}{\text{Re}(BC^*)} \right) \quad (2.86)$$

Para encontrar una expresión para  $T$  se necesita  $(1 - R)$ , que resulta ser

$$(1 - R) = 1 - \left( \frac{\eta_o B - C}{\eta_o B + C} \right) \left( \frac{\eta_o B - C}{\eta_o B + C} \right)^* \quad (2.87)$$

$$= \frac{(\eta_o B + C)(\eta_o B + C)^* - (\eta_o B - C)(\eta_o B^* - C^*)}{(\eta_o B + C)(\eta_o B + C)^*} \quad (2.88)$$

$$= \frac{\eta_o^2 BB^* + \eta_o BC^* + \eta_o B^* C + CC^* - \eta_o^2 BB^* + \eta_o BC^* + \eta_o B^* C - CC^*}{(\eta_o B + C)(\eta_o B + C)^*} \quad (2.89)$$

$$(1 - R) = \frac{2\eta_o(BC^* + B^*C)}{(\eta_o B + C)(\eta_o B + C)^*} \quad (2.90)$$

Reemplazando **Ec.(2.90)** en **Ec.(2.84)**

$$T = \frac{\text{Re}(\eta_2)}{\text{Re}(BC^*)} \left( \frac{2\eta_o(BC^* + B^*C)}{(\eta_o B + C)(\eta_o B + C)^*} \right) \quad (2.91)$$

De la siguiente relación

$$\text{Re}(BC^*) = \frac{1}{2}(BC^* + B^*C) \quad (2.92)$$

obtenemos la transmitancia

$$T = \frac{4\eta_o \text{Re}(\eta_2)}{(\eta_o B + C)(\eta_o B + C)^*} \quad (2.93)$$

Reemplazando **Ec.(2.90)**, **Ec.(2.93)** y **Ec.(2.92)** en **Ec.(2.86)**, resulta

$$(1 - R) - T = \frac{2\eta_o(BC^* + B^*C)}{(\eta_o B + C)(\eta_o B + C)^*} - \frac{4\eta_o \text{Re}(\eta_2)}{(\eta_o B + C)(\eta_o B + C)^*} \quad (2.94)$$

$$= \frac{4\eta_o \text{Re}(BC^*) - 4\eta_o \text{Re}(\eta_2)}{(\eta_o B + C)(\eta_o B + C)^*} \quad (2.95)$$

Finalmente, la absorción es

$$A = \frac{4\eta_o \text{Re}(BC^* - \eta_2)}{(\eta_o B + C)(\eta_o B + C)^*} \quad (2.96)$$

En el método de matrices de transferencia, a cada capa le corresponde una matriz. La matriz de  $2 \times 2$  de la relación en la **Ec.(2.72)** es la matriz de la capa del problema expuesto. El producto de varias matrices, como en la **Ec.(2.1)**, denominada matriz característica de la estructura, se puede escribir de la siguiente forma

$$\begin{bmatrix} \alpha & i\beta \\ i\gamma & \epsilon \end{bmatrix} \quad (2.97)$$

Una de las propiedades de estas matrices es que su determinante es uno, entonces  $\alpha\epsilon + \gamma\beta = 1$ . Si no hay absorción,  $\alpha, \beta, \gamma$  y  $\epsilon$  son reales, y reemplazando en la **Ec.(2.72)** (en este caso, para una sola capa), obtenemos

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha & i\beta \\ i\gamma & \epsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha + i\beta\eta_2 \\ \epsilon\eta_2 + i\gamma \end{bmatrix} \quad (2.98)$$

Así, tenemos

$$\text{Re}(BC^*) = \text{Re}[(\alpha + i\beta\eta_2)(\epsilon\eta_2 - i\gamma)] = (\alpha\epsilon + \gamma\beta)\text{Re}(\eta_2) = \text{Re}(\eta_2) \quad (2.99)$$

entonces, la absorción en la **Ec.(2.96)** se vuelve nula, y  $T + R = 1$ .

## 2.4 MÉTODO DE MATRICES DE TRANSFERENCIA PARA UNA ESTRUCTURA MULTICAPA

Para un sistema multicapa, el tratamiento es análogo al de una capa. Utilizando el modelo de Lorentz, de la **Ec.(2.34)**, para las capas de plata y TDBC, obtenemos índices de refracción que dependen de la frecuencia (longitud de onda). Para dar cuenta de la dispersión de la luz en la sílica utilizamos la ecuación de Sellmeier.

$$n^2(\lambda) = 1 + \frac{B_1\lambda^2}{\lambda^2 - C_1} + \frac{B_2\lambda^2}{\lambda^2 - C_2} + \frac{B_3\lambda^2}{\lambda^2 - C_3} \quad (2.100)$$

Los coeficientes  $B_i$  y  $C_i$  se encuentran en [Malitson (1965)], y son los siguientes

$i$	1	2	3
$B_i$	0.6961663	0.4079426	0.8974794
$C_i$	0.0684043	0.1162414	9.896161

Tabla 2.1: Parámetros del modelo de Sellmeier para la sílica. Datos extraídos de [Malitson (1965)].

Para la plata, se tiene la siguiente fórmula, basada en la **Ec.(2.34)**

$$\epsilon_{\text{Ag}} = \epsilon_0 + \omega_p^2 \cdot \sum_{j=1}^6 \frac{f_j}{\omega_{0j} - \omega^2 - i\Gamma_j\omega} \quad (2.101)$$

donde  $\omega_p = 9.01$  [eV], y  $\epsilon_0 = 1$ , con los siguientes parámetros, extraídos de [Rakić et al. (1998)]

$j$	1	2	3	4	5	6
$f_j$	0.845	0.065	0.124	0.011	0.84	5.646
$\omega_{0j}$ [eV]	0	0.816	4.481	8.185	9.083	20.29
$\Gamma_j$ [eV]	0.048	3.886	0.452	0.065	0.916	2.419

Tabla 2.2: Parámetros del modelo de Lorentz para la plata. Datos extraídos de [Rakić et al. (1998)].

La fórmula que describe las características dieléctricas del TDBC es la siguiente

$$\epsilon = \epsilon_\infty + \frac{f_o \omega_o^2}{\omega_o^2 - \omega^2 - i\gamma_o \omega} \quad (2.102)$$

donde  $\epsilon_\infty = 1.45$ ,  $f_o = 0.05$ ,  $\gamma_o = 50$  [meV],  $\omega_o = 595$  [nm], extraídos de [Zengin et al. (2013)].

Ag 30 [nm]
Silica 50 [nm]
TDBC 20 [nm]
Silica 50 [nm]
Ag 30 [nm]

Figura 2.4: Sistema de siete capas.

La estructura del método de matriz de transferencia para varias capas es:

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix} = T(\omega) \begin{bmatrix} 1 \\ \eta_m \end{bmatrix} \quad (2.103)$$

Con  $T(\omega)$  la “matriz característica” de este conjunto de capas. Esta matriz característica es el

producto de la matrices de cada capa

$$T(\omega) = M_{\text{Ag}} \cdot M_{\text{Silica}} \cdot M_{\text{TDBC}} \cdot M_{\text{Silica}} \cdot M_{\text{Ag}} \quad (2.104)$$

Para este caso particular, el ángulo de incidencia es cero ( $\theta_o = 0^\circ$ ), el medio de salida es aire, entonces  $\eta_m = 1$ , y la longitud de onda va a de 450 a 800 [nm].

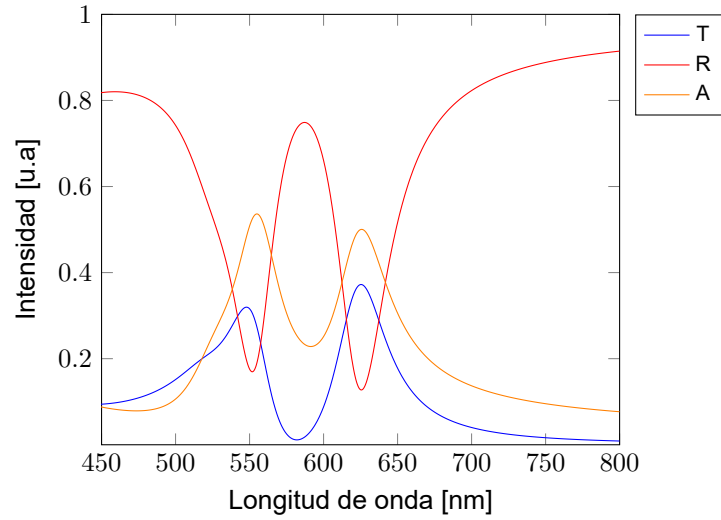


Figura 2.5: Transmitancia, reflectancia y absorbancia del conjunto de capas.

En la **Fig.(2.5)** observamos como la transmitancia cae aproximadamente a los 595 [nm], mientras que la reflectancia sube. Cerca de los extremos del espectro analizado, la reflectancia domina. En esta longitud de onda también se da el máximo de emisión del compuesto TDBC, a partir del cual hay un splitting o separación entre dos máximos, debido a la relación entre la concentración de TDBC en solvente y la absorbancia [Wang et al. (2016)].



### CAPÍTULO 3. MODELO DE EMISIÓN DE UN OLED

La emisión de un compuesto orgánico electroluminiscente en un OLED puede modelarse como un conjunto de dipolos eléctricos oscilantes verticales y horizontales, cuya potencia se disipa hacia varios canales o modos de emisión. A esta estrategia se le denomina modelo dipolar [Barnes (1998)]. Es un modelo clásico, capaz de recrear los resultados de un conjunto de procesos, tanto clásicos como cuánticos, que ocurren en la estructura OLED, como se ve en la **Fig.(3.1)**.

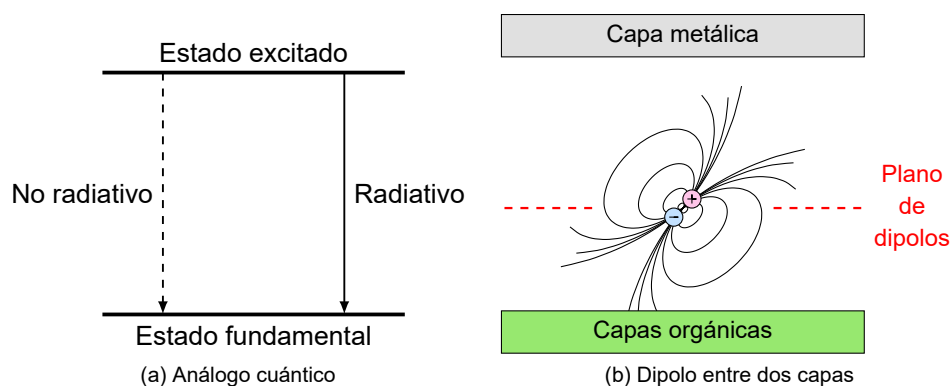


Figura 3.1: El proceso de emisión de un compuesto electroluminiscente puede ser modelado como una distribución de dipolos. Adaptado de [Brütting et al. (2013)].

El modelo de emisión dipolar también es capaz de distinguir entre los dos tipos de polarización vistas en el Capítulo (2), los modos TM y TE, que junto con las orientaciones de los dipolos, determinan en gran medida la potencia radiativa y no radiativa disipada por la estructura OLED multicapa.

Entre las desventajas del modelo, se cuentan la necesidad de que el medio en el que se encuentra el dipolo debe ser no dispersivo, o sea, no presentar absorción. Las interfaces entre las capas de la estructura se consideran perfectamente lisas, y el tamaño del dipolo es mucho más pequeño que la longitud de onda [Barnes (1998)].

### 3.1 MODELO DE EMISIÓN DIPOLAR

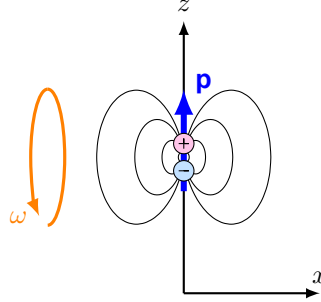


Figura 3.2: El modelo utiliza un dipolo puntual. Para efectos demostrativos se pueden ver las cargas positiva y negativa oscilando con una frecuencia  $\omega$ , generando campos electromagnéticos que propagan la energía lejos del dipolo.

Si suponemos un dipolo eléctrico que oscila de manera sinusoidal  $\mathbf{p}e^{-i\omega t}$  paralelo al eje  $z$ , como el de la **Fig.(3.2)**

$$\mathbf{p} = p\mathbf{e}_z = p\hat{z} \quad (3.1)$$

Podemos definir el siguiente vector de Hertz [Wasey & Barnes (2000)]

$$\Pi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p} \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{e^{i(kr - \omega t)}}{r} \quad (3.2)$$

donde  $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$ . Al ser el producto de una onda esférica y un vector constante,  $\Pi$  es una solución de la ecuación de Helmholtz

$$\nabla^2 \Pi + k^2 \Pi = 0, \quad (3.3)$$

y también una solución de la ecuación de onda

$$\nabla^2 \Pi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Pi}{\partial t^2} = 0 \quad (3.4)$$

Los campos obtenidos por medio de este potencial vectorial son

$$\mathbf{E} = \nabla(\nabla \cdot \Pi) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Pi}{\partial t^2} \quad (3.5)$$

$$\mathbf{B} = \frac{1}{c} \left( \nabla \times \frac{\partial \Pi}{\partial t} \right) \quad (3.6)$$

### Expansión del vector de Hertz para una estructura multicapa

Consideremos a las capas como una serie de planos infinitos en la dirección  $x$ , como en la **Fig.(3.3)**.

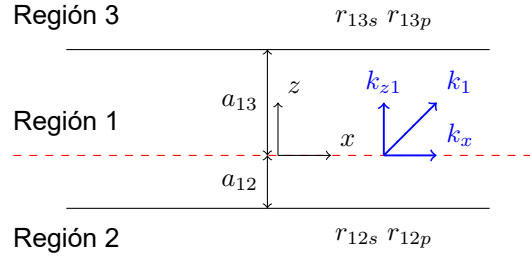


Figura 3.3: Las reflexiones con las interfaces entre las regiones se consideran mediante los coeficientes de fresnel, definidos para polarizaciones TE (s) y TM (p). La línea roja muestra la capa emisora.

El vector de Hertz se puede expandir en términos de funciones de Bessel [Sommerfeld (1949)], tomando la siguiente forma

$$\Pi = \frac{i\mathbf{P}_0}{4\pi\epsilon} \int_0^\infty \frac{k_x}{k_z} J_0(k_x \rho) e^{ik_z|z|} dk_x \quad (3.7)$$

donde  $k_z$  es el vector de onda normal a las interfaces,  $J_0$  la función de Bessel de orden cero,  $\mathbf{P}_0$  el momento dipolar,  $\epsilon$  la constante dieléctrica del medio en el que se encuentra el dipolo.

### Sobre el vector de onda paralelo a las interfaces

Al traspasar de una capa a otra, la luz conserva tanto su frecuencia,  $f$ , como el vector de onda paralelo a las interfaces,  $k_x$ . Lo anterior se sigue de leyes de conservación, cuya representación usual es a través de la ley de Snell [Joannopoulos et al. (2008)]. Dado esto, solo varía el vector de onda y su componente vertical. En la región 1 de la **Fig.(3.3)**, el número de onda está dado por

$$k_x = k_o n_1 \sin(\theta_1) \quad (3.8)$$

donde  $k_o = \frac{2\pi}{\lambda}$  y  $\lambda$  es la longitud de onda del campo electromagnético.

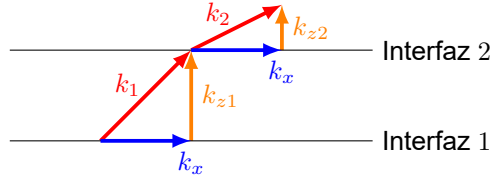


Figura 3.4: El vector de onda paralelo,  $k_x$  (en azul), se mantiene constante a través de toda la estructura durante la propagación de la luz, a diferencia de los vectores de onda y su componentes verticales (en rojo y anaranjado).

Al ser constante a través de la estructura OLED,  $k_x$  es útil como parámetro en la simulación, puesto que solo varía con la longitud de onda,  $\lambda$ , y con el ángulo de incidencia,  $\theta_1$ , como se observa en la **Ec.(3.8)**.

### Potencia disipada en la estructura

El vector de Poynting señala la dirección del flujo de energía de un campo electromagnético. En el caso de un dipolo oscilante, el flujo de energía se concentra en la dirección horizontal, y va decayendo a medida que se acerca a la dirección vertical, como se observa en la **Fig.(3.5)**.

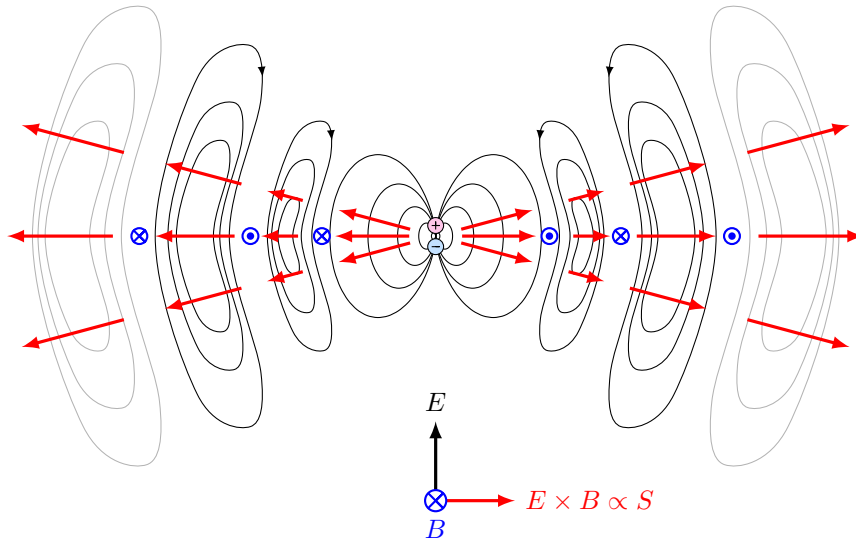


Figura 3.5: Esquema cualitativo de un dipolo oscilante y los campos electromagnéticos propagados. En azul, el campo magnético, en negro los campos eléctricos y en rojo la dirección del vector de Poynting.

Utilizando el vector de Poynting  $\vec{S}$  [Novotny (1997)], la potencia irradiada por un dipolo oscilante

en una estructura similar a la mostrada en la **Fig.(3.3)** está dada por

$$P = \text{Re} \left\{ \int_{A_{\uparrow}} \mathbf{S}^* \cdot \mathbf{n} dA \right\} + \text{Re} \left\{ \int_{A_{\downarrow}} \mathbf{S}^* \cdot \mathbf{n} dA \right\} \quad (3.9)$$

Usando la definición

$$\mathbf{S}^* = \left( \frac{c}{8\pi} \right) \mathbf{E} \times \mathbf{B}^*, \quad (3.10)$$

y las **Ec.(3.7)** y **Ec.(3.6)**, **Ec.(3.5)**, la potencia se puede calcular como

$$P = (1 - q) + \frac{1}{2} \frac{q}{k_1^3} \text{Re} \left\{ \int_0^\infty \frac{k_x}{k_{z1}} K(k_x) dk_x \right\} \quad (3.11)$$

donde  $k_1 = \sqrt{k_x^2 + k_{z1}^2}$  es el vector de onda y  $q$  es un factor relacionado con la eficiencia interna de la capa emisora, mencionado en la Sección (1.3) del Capítulo (1), en la región 1 de la **Fig.(3.3)**.

La función  $K(k_x)$  de la **Ec.(3.11)** se puede separar en tres términos [Wasey & Barnes (2000)]

$$K_{\perp p} = k_x^2 (1 + R_{\perp p \uparrow} e^{2ik_{z1}a_{12}} + R_{\perp p \downarrow} e^{2ik_{z1}a_{13}}) \quad (3.12)$$

$$K_{\parallel p} = k_{z1}^2 (1 + R_{\parallel p \uparrow} e^{2ik_{z1}a_{12}} + R_{\parallel p \downarrow} e^{2ik_{z1}a_{13}}) \quad (3.13)$$

$$K_{\parallel s} = k_1^2 (1 + R_{\parallel s \uparrow} e^{2ik_{z1}a_{12}} + R_{\parallel s \downarrow} e^{2ik_{z1}a_{13}}) \quad (3.14)$$

Los factores de reflexión, tanto en polarización s como p (TE y TM), están definidos como

$$R_{\perp, \parallel, \uparrow} = \frac{r_{12} (r_{13} e^{2ik_{z1}a_{13}} \pm 1)}{1 - r_{12}r_{13}e^{2ik_{z1}a}} \quad (3.15)$$

$$R_{\perp, \parallel, \downarrow} = \frac{r_{13} (r_{12} e^{2ik_{z1}a_{12}} \pm 1)}{1 - r_{12}r_{13}e^{2ik_{z1}a}} \quad (3.16)$$

donde  $a = a_{12} + a_{13}$ . Para describir un sistema isotrópico, las contribuciones deben ser ponderadas por 1/3 y 2/3. De lo anterior se sigue que

$$K_{\perp p} = 3k_x^2 \left[ \frac{(1 + r_{12p}e^{2ik_{z1}a_{12}})(1 + r_{13p}e^{2ik_{z1}a_{13}})}{1 - r_{12p}r_{13p}e^{2ik_{z1}a}} \right] \quad (3.17)$$

$$K_{\parallel p} = \frac{3}{2}k_{z1}^2 \left[ \frac{(1 - r_{12p}e^{2ik_{z1}a_{12}})(1 - r_{13p}e^{2ik_{z1}a_{13}})}{1 - r_{12p}r_{13p}e^{2ik_{z1}a}} \right] \quad (3.18)$$

$$K_{\parallel s} = \frac{3}{2}k_1^2 \left[ \frac{(1 + r_{12s}e^{2ik_{z1}a_{12}})(1 + r_{13s}e^{2ik_{z1}a_{13}})}{1 - r_{12s}r_{13s}e^{2ik_{z1}a}} \right] \quad (3.19)$$

En la **Fig.(3.6)** se puede observar un corte transversal de cada dipolo considerado en el modelo. Así también se explica porque solo hay un dipolo vertical, y por qué solo se encuentra en polarización TM; en esa dirección hay simetría axial. La suma de todos los dipolos ponderados

entrega una distribución de dipolos orientados aleatoriamente, lo que se denomina combinación isotrópica. Modificando estas ponderaciones se pueden describir materiales emisores con otras combinaciones de dipolos.

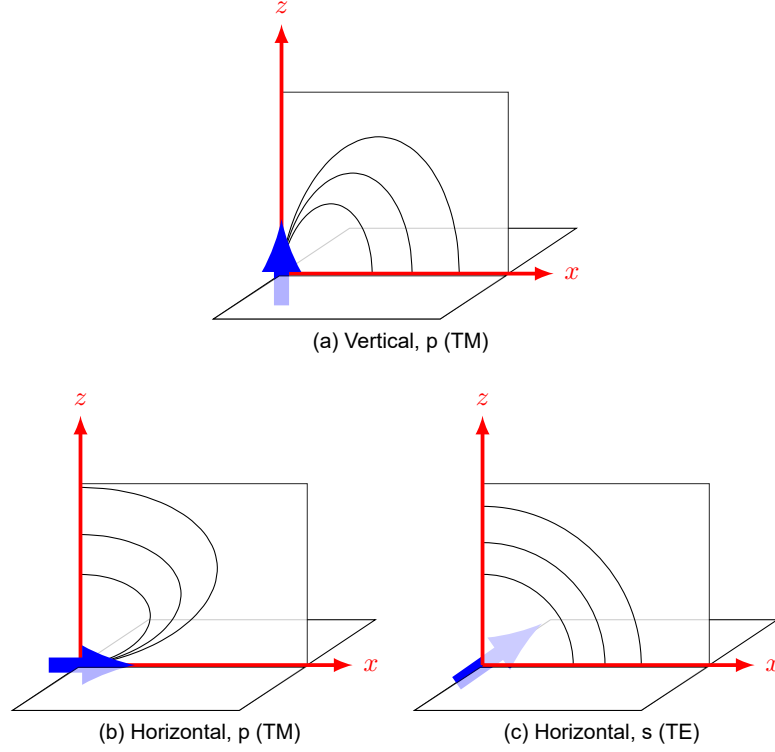


Figura 3.6: Dipolos verticales y horizontales. Adaptado de [Benisty et al. (1998)].

La potencia disipada resultante es

$$P = (1 - q) + \frac{1}{2} \frac{q}{k_1^3} \text{Re} \left\{ \int_0^\infty \frac{k_x}{k_{z1}} \left[ \frac{1}{3} K_{\perp p} + \frac{2}{3} K_{\parallel p} + \frac{2}{3} K_{\parallel s} \right] dk_x \right\} \quad (3.20)$$

La **Ec.(3.20)** entrega la potencia disipada, con  $k_x$  como variable de integración, desagregada tanto en orientación dipolar como en polarización TM y TE (p y s).

## CANALES DE DISIPACIÓN

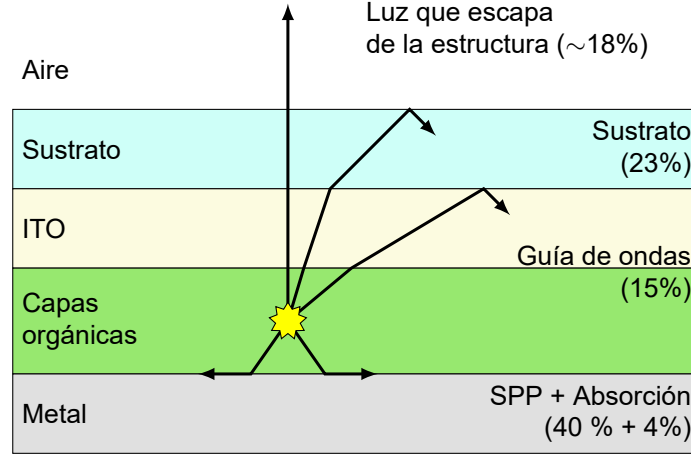


Figura 3.7: Diferentes canales de disipación y sus fracciones características. En general, la mayor parte de la potencia se pierde en el canal no radiativo.

El intervalo de integración de la **Ec.(3.20)** puede descomponerse en tres regiones; directa, sustrato y no radiativo. La potencia disipada a cada canal aumenta o disminuye dependiendo de las características de la radiación que emita el dipolo, así como también de la geometría de la estructura OLED, como la distancia de la capa de dipolos a la capa metálica, o los espesores de ciertas capas en el dispositivo.

**Región directa:** Es la fracción de potencia que puede convertirse en luz visible al salir de la estructura. No es igual a la energía que efectivamente sale de la estructura; efectos térmicos y otros no son considerados en el modelo. El aumento en la eficiencia de un dispositivo OLED consiste en desviar o intentar aprovechar la energía disipada en los demás canales para aumentar la luz que escapa de la estructura. Su intervalo de integración está definido como

$$0 \leq k_x \leq k_{aire} \quad (3.21)$$

**Región sustrato:** Fracción de potencia disipada al sustrato, generalmente algún tipo de vidrio, como el BK7. También puede ser un sustrato flexible, como un plástico transparente, visto en la Sección (1.1) del Capítulo (1). Debido a las diferencias entre los índices de refracción de los materiales constituyentes, la estructura OLED puede actuar como una guía de ondas por medio de reflexión total interna, como se ve en la **Fig.(3.8)**. Suponiendo que el sustrato tiene un índice de refracción  $n = 1.5$ , el ángulo crítico es  $\theta_c = 41.8^\circ$ . A ángulos mayores la luz no puede escapar

y queda atrapada en la estructura.

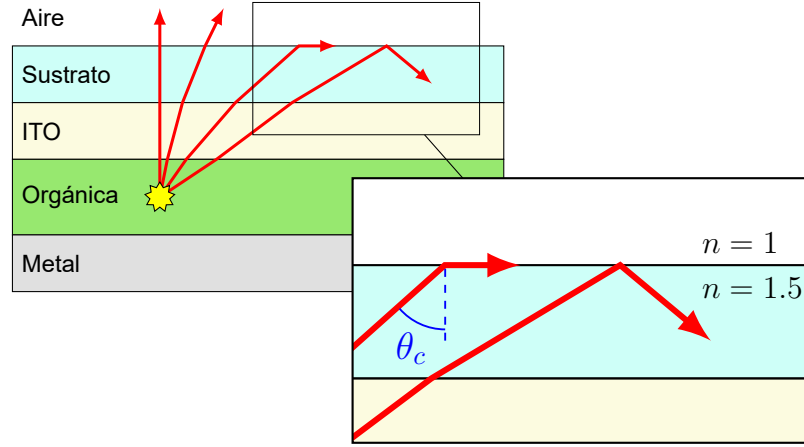


Figura 3.8: Reflexión total interna, con un ángulo crítico  $\theta_c$ .

La energía atrapada en el sustrato puede ser extraída modificando la estructura OLED, como se ve en la Sección (1.5) del Capítulo (1). El intervalo en este caso es

$$k_{aire} \leq k_x \leq k_{sustrato} \quad (3.22)$$

**Región no radiativa:** Engloba la potencia atrapada en las capas orgánicas y electrodos por reflexión total interna, como en el sustrato, y energía que no produce luz, sino que plasmones de superficie polaritón (Surface Plasmon Polaritons, SPP).

Los SPP son ondas longitudinales de electrones oscilantes que viajan en la interfaz entre un metal y un dieléctrico como se ve en la **Fig.(3.9)**. Solo pueden ser generados por radiación con polarización TM, y no son capaces de interactuar con la luz [Scholz et al. (2012)], lo que sumado a la gran fracción de potencia que consumen, los hace la principal causa de ineficiencia en una estructura OLED.



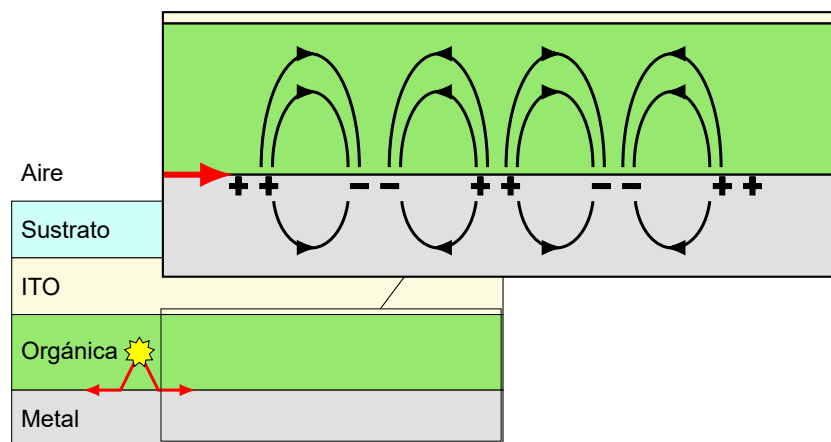


Figura 3.9: Plasmones de superficie polaritón (SPP). Adaptado de [Willets & Van Duyne (2007)].

A diferencia de la región sustrato, no es fácil distinguir entre estos modos guiados y los plasmones de superficie, pues hay cierta superposición. El intervalo de integración para esta región es

$$k_{sustrato} \leq k_x < \infty \quad (3.23)$$

### 3.2 FOTOLUMINISCENCIA DE MOLÉCULAS ORGÁNICAS

La fotoluminiscencia es la emisión espontánea de luz desde un material sometido a excitación óptica. El espectro de fotoluminiscencia (PL) de una muestra entrega información sobre los estados electrónicos de las moléculas involucradas en la emisión, y puede ser usado para caracterizar su superficie, niveles de impureza y rugosidad.

Se utiliza el espectro de fotoluminiscencia del material emisor como una aproximación a la emisión al someterlo a un estímulo eléctrico; para obtener su espectro de electroluminiscencia sería necesario fabricar la estructura OLED, lo que va en contra del propósito de realizar la simulación computacional en primer lugar.

Durante el proceso electroluminiscente, los estados excitados se pueblan a través de la recombinación de electrones y huecos. Estos portadores de carga se atraen mutuamente, formando excitones idealmente en la capa emisora del OLED. Electrón y hueco tienen espín, lo que da origen a cuatro combinaciones diferentes; 25% singlete y 75% triplete, como se ve en (b) de la Fig.(3.10).

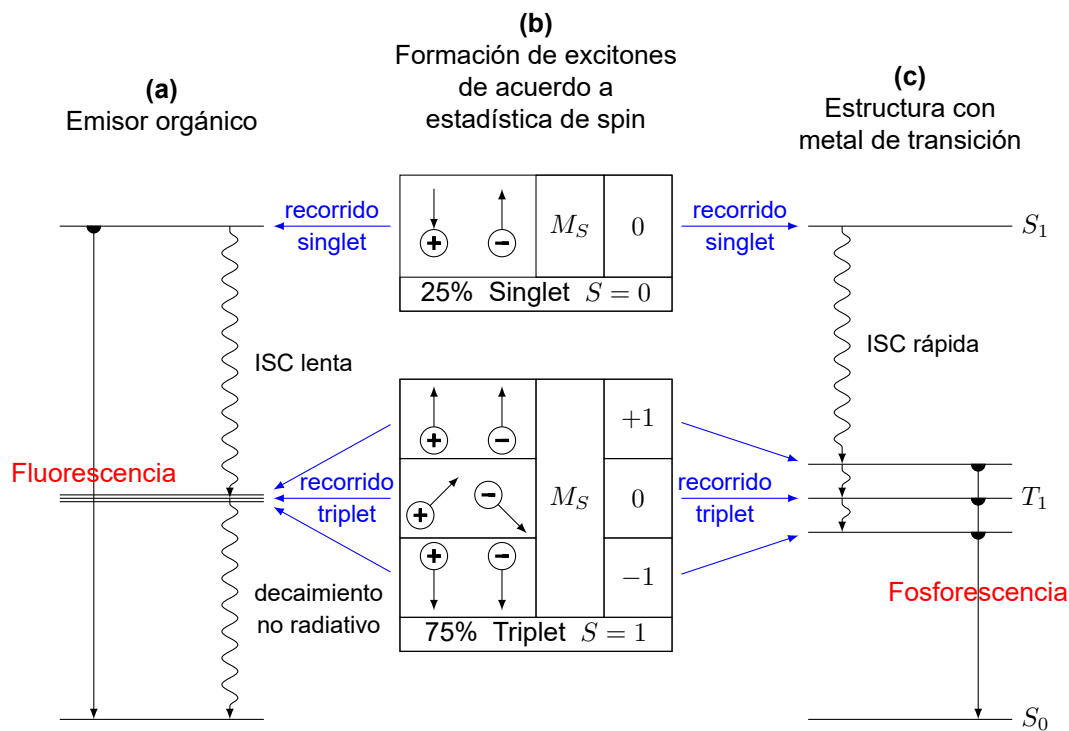


Figura 3.10: Diagrama de disipación fluorescente **(a)** y fosforescente **(c)**. Adaptado de [Yersin (2004)].

En moléculas orgánicas, solo los singletes emiten luz (fluorescencia), y la energía de los estados tripletes se pierde en forma de calor. Los compuestos organo-metálicos con metales de transición en el centro de su estructura muestran un cruzamiento intersistema rápido (ISC) desde el estado  $S_1$  al menor estado triplete  $T_1$ . Por esto se dice que este estado "cosecha" energía de los singletes y tripletes, y luego los emite en forma de luz [Yersin (2004)]. Por todo lo anterior, el factor  $\eta_{S/T}$  en el proceso fluorescente es  $1/4$ , mientras que para el fosforescente puede llegar a 1.

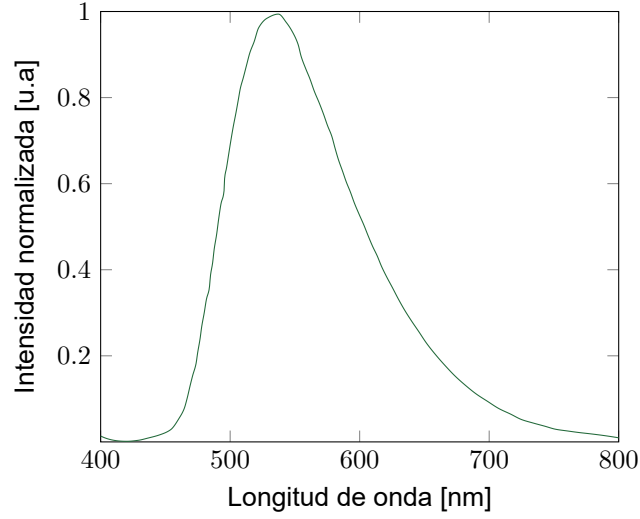


Figura 3.11: Espectro PL del compuesto  $\text{Alq}_3$ , utilizado como capa emisora en los siguientes capítulos. Es un emisor fluorescente verde, así que tiene un  $\eta_{S/T}$  igual a  $1/4$  y su peak de emisión se encuentra a aproximadamente 525 [nm]. Extraído de [Reinke (2008)].

La intensidad normalizada del espectro PL a lo largo del rango de radiación visible es utilizada para ponderar la contribución de cada longitud de onda, y simular el espectro de emisión de un OLED en todo el espectro visible, de 400 a 800 [nm]. Así, la **Ec.(3.20)** se puede reescribir como

$$P = (1 - q) + \frac{1}{2} \frac{q}{k_1^3} \text{Re} \left\{ \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \int_0^\infty \frac{k_x}{k_{z1}} \left[ \frac{1}{3} K_{\perp p} + \frac{2}{3} K_{\parallel p} + \frac{2}{3} K_{\parallel s} \right] PL(\lambda) dk_x d\lambda \right\} \quad (3.24)$$

donde  $PL(\lambda)$  es el espectro de fotoluminiscencia del compuesto orgánico que emite luz, como el mostrado en la **Fig.(3.11)**.

## CAPÍTULO 4. DESCRIPCIÓN DE LA SIMULACIÓN DE EMISIÓN EN UN OLED

Utilizando el modelo de matrices de transferencia del Capítulo (2) junto con el modelo dipolar mostrado en el Capítulo (3) se puede estimar la potencia extraída desde la estructura OLED simulada. Además, se necesitan los índices de refracción, coeficientes de extinción y espesores de cada capa en la longitud de onda analizada.

### 4.1 SISTEMA MONOCAPA

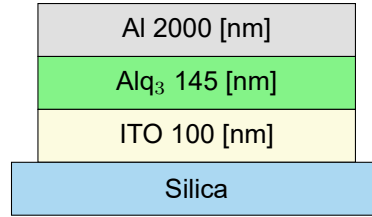


Figura 4.1: Sistema monocapa, señalando los espesores. La capa emisora se encuentra a 73 [nm] de la capa de aluminio (Al).

La **Fig.(4.1)** muestra la estructura OLED monocapa a simular. Se utiliza una capa muy gruesa de aluminio para considerarla semi infinita. Utilizando los índices de refracción establecidos en [Hobson et al. (2002)] por medio de un ajuste polinomial, se pueden estimar los índices de refracción y coeficientes de extinción de cada capa. La silica tiene un índice de refracción de 1.46 y al igual que el Alq<sub>3</sub>, se considera no dispersiva, o sea, no tienen coeficiente de extinción y no presentan absorción.

Para el Alq<sub>3</sub>, el índice de refracción está dado por

$$n_{Alq_3} = -1.33075 + 8.69156x - 8.42617x^2 + 3.38293x^3 - 0.48725x^4 \quad (4.1)$$

con  $x = \lambda[\text{nm}]/550$ . Para el aluminio

$$n_{Al} = 19.92812 - 84.7052x + 140.1731x^2 - 111.85238x^3 + 43.46728x^4 - 6.5696x^5 \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} \kappa_{Al} = & 319.47025 - 1347.04872x + 2350.75746x^2 - 2149.03408x^3 \\ & + 1088.8157x^4 - 289.65148x^5 + 31.56516x^6 \end{aligned} \quad (4.3)$$

con  $x = \lambda[\text{nm}]/400$ . Para el ITO

$$n_{ITO} = 1.67567 + 0.20122x \quad (4.4)$$

$$\kappa_{ITO} = 0.005 \quad (4.5)$$

con  $x = 1000/\lambda[\text{nm}]$ .

Calculamos la potencia disipada en función del vector de onda paralelo usando la **Ec.(3.20)**; los resultados se muestran en la **Fig.(4.2)**. Los valores de  $k_x/k_o = 1$  y 1.46 coinciden con los índices de refracción del aire y el sustrato, respectivamente.

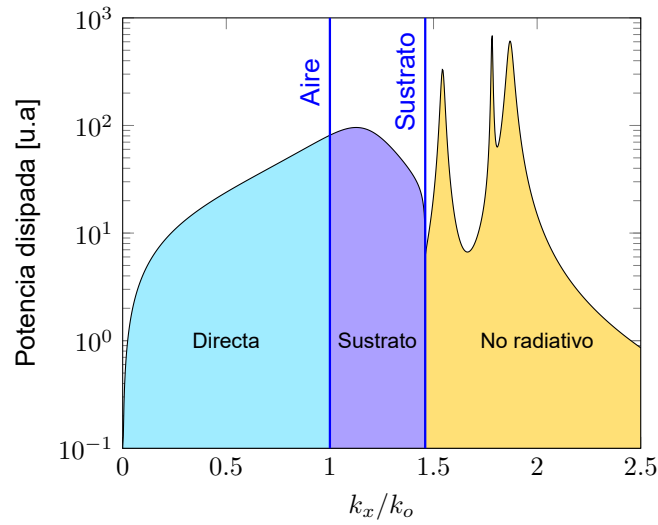


Figura 4.2: Espectro de potencia disipada para la longitud de onda de 518 [nm].

En este caso se realiza el análisis para una sola longitud de onda, por lo que no se utiliza el espectro de fotoluminiscencia mostrado en la **Fig.(3.11)**. La integración de la **Fig.(4.2)** para cada canal de disipación entrega los resultados observados en la **Fig.(4.3)**, en los que se puede apreciar que gran parte de la potencia generada por el OLED se pierde en los canales sustrato y no radiativo, mostrando que la mayoría de la energía se disipa hacia plasmones de superficie polaritón o queda atrapada por reflexión total interna en la capa de ITO y en el sustrato.

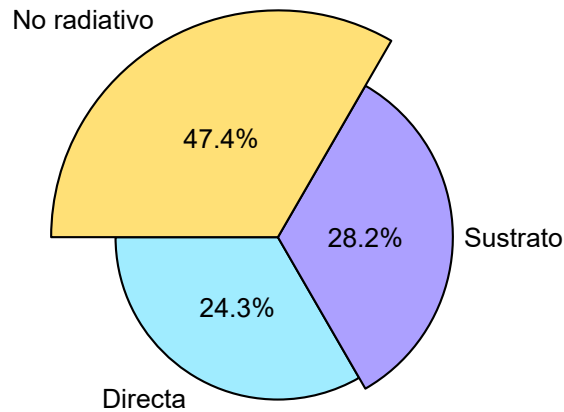


Figura 4.3: Fracciones de potencias disipadas; la mayor parte de la potencia se pierde en el canal no radiativo.

Con  $\eta_{S/T} = 1/4$ ,  $\gamma = 1$  y  $q = 0.2$  reemplazando en la **Ec.(1.1)** se tiene que la eficiencia cuántica externa es  $\eta_{EQE} = 1.215\%$ , que se encuentra dentro del rango de eficiencia para estructuras similares a las de la **Fig.(4.1)** [Brütting et al. (2001)], [Tang & VanSlyke (1987)].

## 4.2 ETAPAS DE LA SIMULACIÓN

Los pasos en la simulación de la emisión de un OLED se pueden resumir de la siguiente manera:

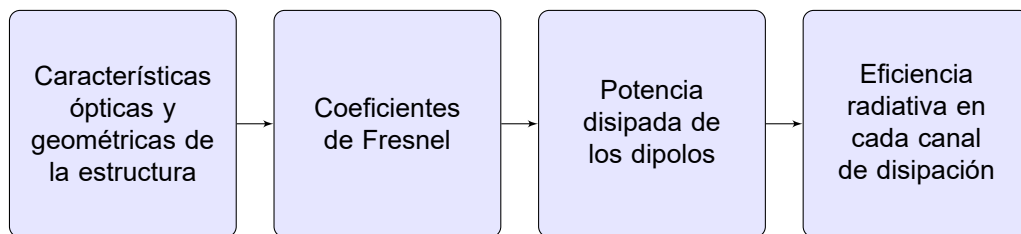


Figura 4.4: Diagrama de flujo de la simulación para obtener la eficiencia óptica de diferentes estructuras OLED.

- (1) Se establecen los índices de refracción complejos y espesores de las diferentes capas, así como también la distancia de la capa emisora a las interfaces superior e inferior.
- (2) Se calculan los coeficientes de Fresnel para el conjunto de capas superior e inferior, utilizando el método de matrices de transferencia visto en el Capítulo (2).
- (3) Se calcula la potencia en cada canal de disipación, utilizando el modelo dipolar visto en el Capítulo (3).

- (4) Se calculan y analizan las fracciones de potencia disipadas a los canales directo, sustrato y no radiativo.

Para la simulación es necesario separar la estructura OLED en dos partes; la superior e inferior, con el límite entre ellas demarcado por el plano en el que se encuentran los dipolos, como se ve en la **Fig.(4.5)**. Esto quiere decir que se calculan los coeficientes de Fresnel para el conjunto de capas hacia arriba (Conjunto 3) y para el conjunto hacia abajo (Conjunto 2).

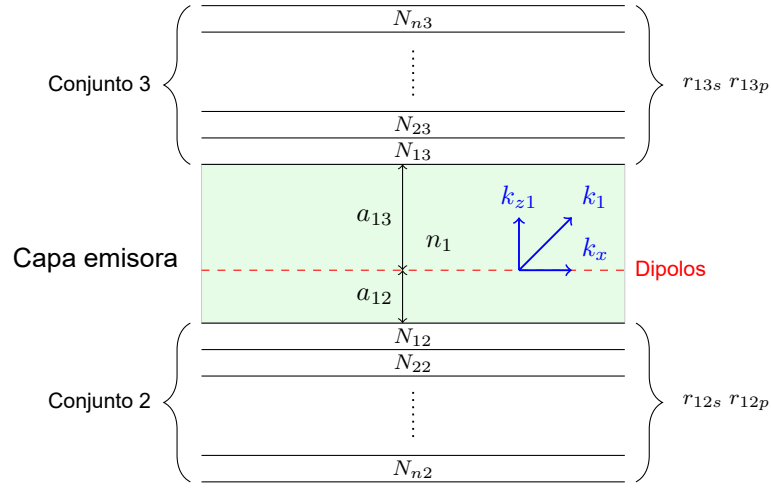


Figura 4.5: Esquema de la información necesaria para la simulación.

En el modelo dipolar la capa emisora se considera no dispersiva; la constante  $q$  se utiliza como una aproximación de la absorción del material, similar al efecto del coeficiente de extinción,  $\kappa$ , como se puede ver en la Sección (2.1) del Capítulo (2).

El plano en el que se encuentran los dipolos no puede estar precisamente en la interfaz entre el material emisor y la siguiente capa, pero tampoco debe estar ni demasiado lejos ni muy cerca de la interfaz con la capa metálica. Esto puede causar que una cantidad poco realista de potencia se pierda hacia el canal no radiativo, por los plasmones de superficie polaritón (SPP), como se ve en la Sección (3.1) del Capítulo (2).

Hasta ahora, solo se han utilizado el modelo de Lorentz (Sección (2.2)) y aproximaciones polinomiales. Para que los resultados de la simulación se asemejen aun más a los resultados experimentales hallados en diferentes publicaciones, en los siguientes capítulos se utilizan índices de refracción y coeficientes de extinción experimentales.

# CAPÍTULO 5. MODELAMIENTO DE UN SISTEMA MULTICAPA

## OLED

### 5.1 ESTRUCTURA OLED PEDOT:PSS

La siguiente estructura corresponde a una OLED multicapa de emisión inferior (Bottom-emission OLED), con  $\text{Alq}_3$  como compuesto emisor de luz. La capa emisora se encuentra a 5 [nm] de la interfaz con la capa de TPD.

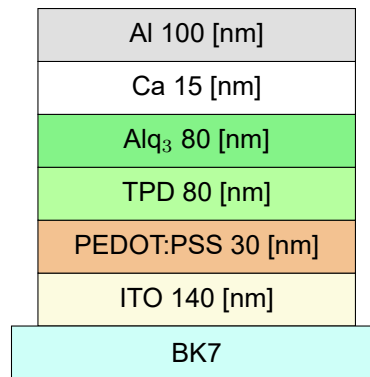


Figura 5.1: Sistema multicapa.

El PEDOT:PSS aumenta la inyección de huecos, y la capa de calcio la de electrones. La capa de  $\text{Alq}_3$  también sirve como transportadora de electrones, y la de TPD de huecos. La capa de aluminio sirve de cátodo y de reflector, y la de ITO como ánodo.

Para la simulación de esta estructura se utilizaron índices de refracción complejos experimentales [Reinke (2008)], mostrados a continuación en grupos de materiales inorgánicos y orgánicos, en la **Fig.(5.2)** y la **Fig.(5.3)**. Se puede observar que para los metales el coeficiente de extinción  $\kappa$  es del mismo orden que el índice de refracción  $n$ . Esto muestra que el aluminio y calcio no dejan pasar la luz en este rango de longitudes de onda como las demás capas, y por esto se utilizan como capas reflectoras.

Las capas de TPD,  $\text{Alq}_3$ , PEDOT:PSS y BK7 tienen un índice de refracción  $n$  similar en el rango de longitudes de onda estudiados, una propiedad necesaria para aumentar el ángulo crítico en el caso de los modos de guía de onda y el sustrato, como se ve en la Sección (3.1), y así disminuir la cantidad de potencia atrapada en la estructura OLED por reflexión total interna. Todas las capas por debajo del  $\text{Alq}_3$  tienen un coeficiente de extinción muy bajo, correspondiente a una



baja atenuación al traspasar el material. Esto se traduce en una alta transparencia en el espectro visible, el rango de longitudes de onda estudiado y útil para aplicaciones comerciales, como se muestra en el Capítulo (1).

El modelo dipolar requiere que el material en el que se encuentran inmersos los dipolos sea no dispersivo; su coeficiente de extinción se considera nulo (perfectamente transparente), utilizándose  $q = 0.2$  como una aproximación de su atenuación y otros efectos.

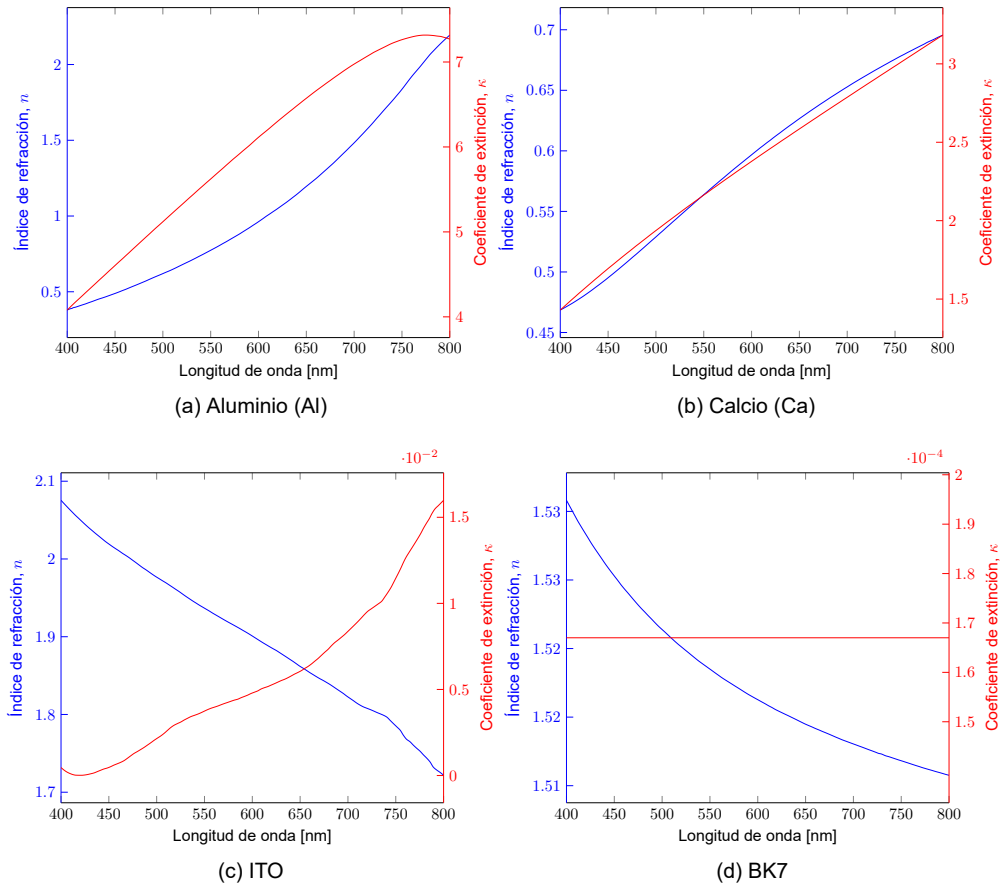


Figura 5.2: Índices de refracción y coeficientes de extinción de los materiales inorgánicos de la estructura. Extraídos de [Reinke (2008)].

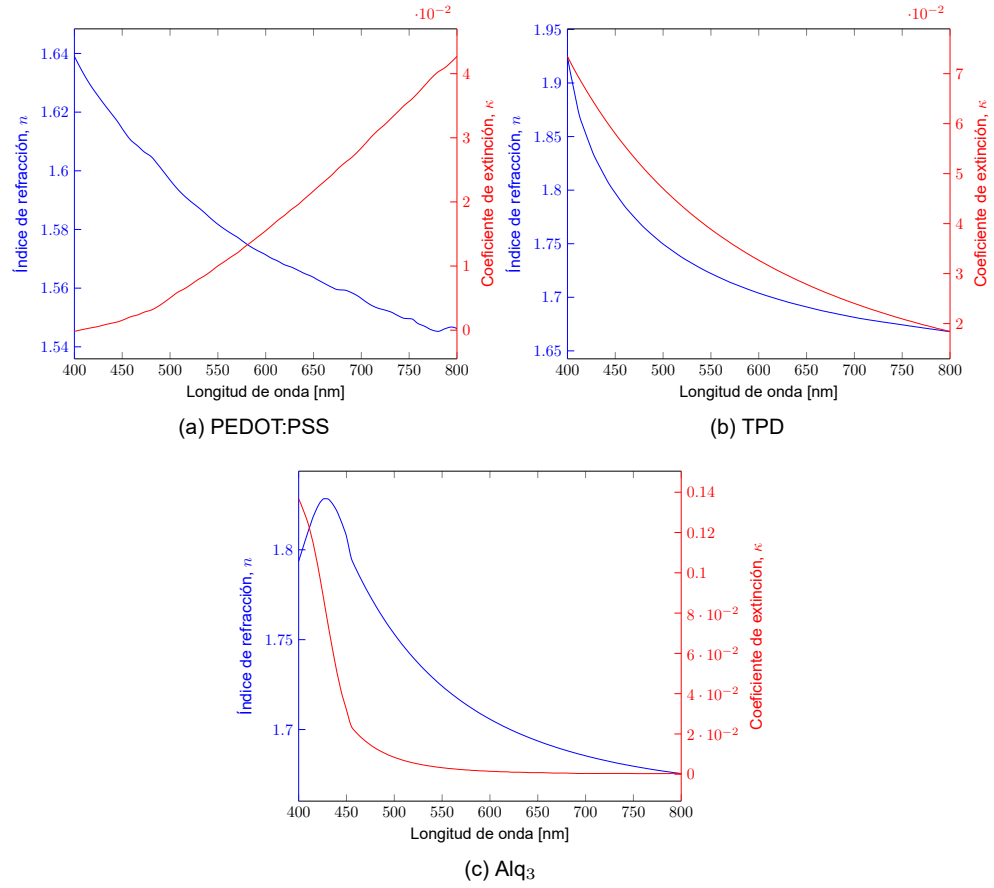


Figura 5.3: Índices de refracción y coeficientes de extinción de los materiales orgánicos de la estructura. Extraídos de [Reinke (2008)].

## 5.2 COMPARACIÓN CON MEDICIONES EXPERIMENTALES

En la **Fig.(5.4)** se pueden observar los peaks de los diferentes canales de disipación; los estrechos peaks de la imagen corresponden a los modos guiados, y el peak más ancho de la derecha a plasmones de superficie polaritón (SPP), los cuales forman parte del canal no radiativo (Sección (3.1)).

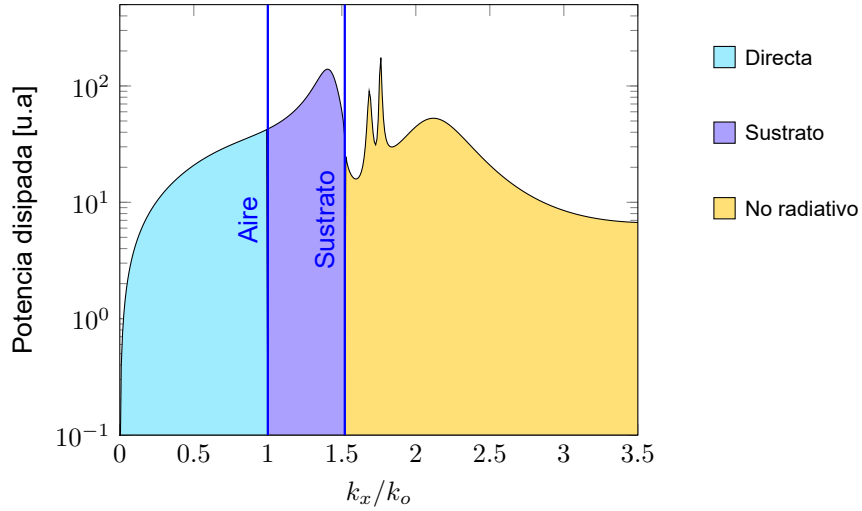


Figura 5.4: Potencia disipada por el OLED a una frecuencia de 525 [nm], aproximadamente el peak de emisión del Alq<sub>3</sub>. La mayor parte de la potencia en esta frecuencia se disipa hacia el sustrato.

A continuación se presenta la comparación entre los espectros de emisión obtenidos mediante la simulación y resultados experimentales [Nowy et al. (2008)], utilizando el modelo dipolar con ponderación por el espectro de fotoluminiscencia del Alq<sub>3</sub> de la **Fig.(3.11)**, como en la **Ec.(3.24)**. Cabe mencionar que los siguientes espectros solo muestran la parte del canal directo que escapa hacia el aire; desde el exterior solo se puede observar la emisión de 0° a 90° desde el OLED, como se ve en la **Fig.(5.5)**.

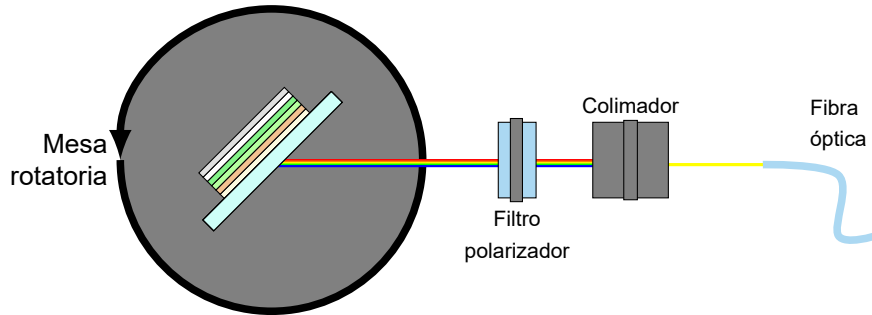


Figura 5.5: Esquema de un montaje experimental similar al utilizado por [Nowy et al. (2008)]. El dispositivo OLED emite radiación en todo el espectro visible estudiado, aunque concentrado en la frecuencia verde, de acuerdo al emisor Alq<sub>3</sub>.

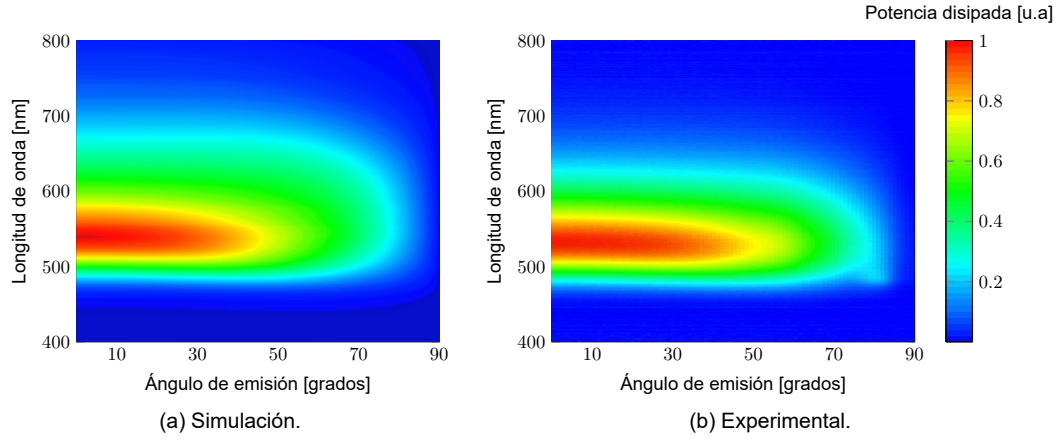


Figura 5.6: Comparación entre la simulación y los datos experimentales, para la polarización S (TE).

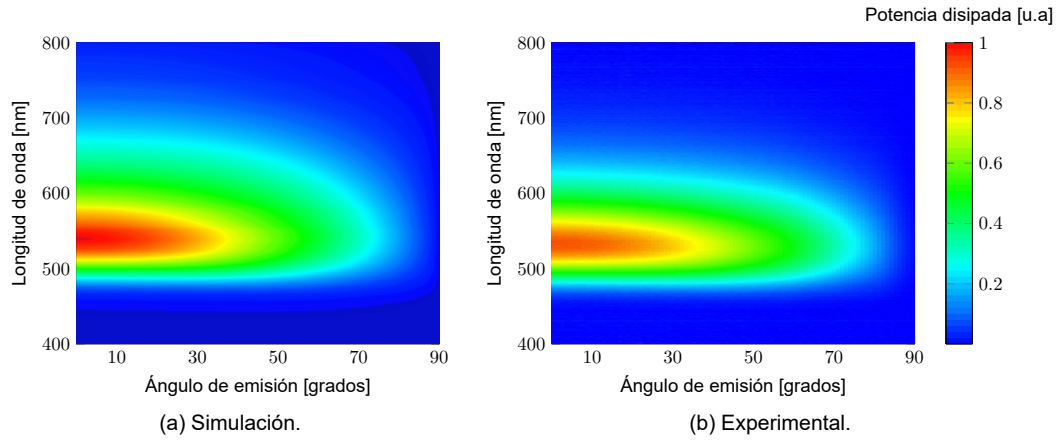


Figura 5.7: Comparación entre la simulación y los datos experimentales, para la polarización P (TM).

También se muestra la misma comparación con datos experimentales, pero esta vez se obtuvieron incluyendo un prisma semi-circular en la estructura, como se ve en la **Fig.(5.8)**. El índice de refracción del prisma debe ser similar al del sustrato, pues se busca extraer la potencia atrapada por reflexión total interna en la interfaz aire-sustrato del OLED (Sección (3.1)). Es una estrategia similar a la mostrada en la Sección (1.5), pero en este caso no aumenta necesariamente la potencia extraída, sino que cambia el comportamiento angular de la emisión.

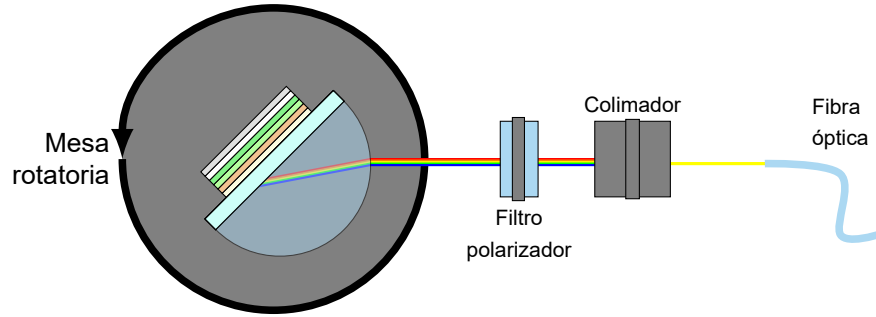


Figura 5.8: Esquema de un montaje experimental con prisma, similar al utilizado por [Nowy et al. (2008)].

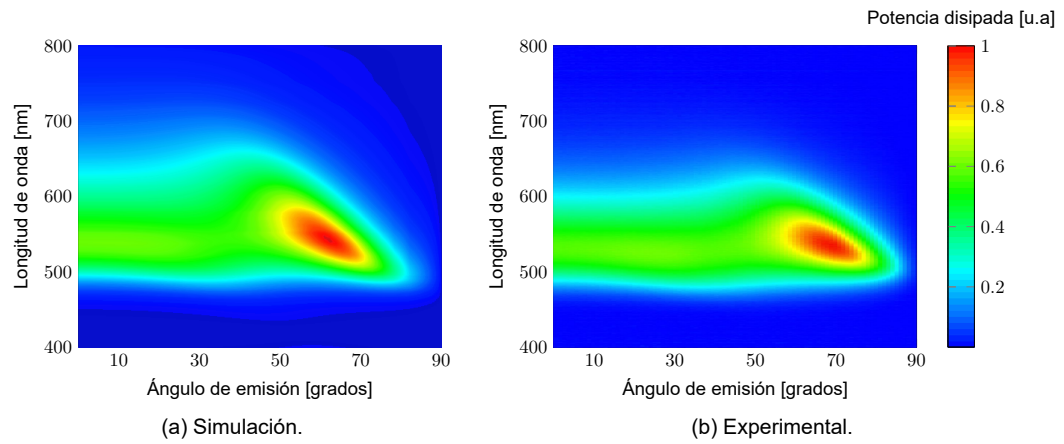


Figura 5.9: Comparación entre la simulación y los datos experimentales, para la polarización S (TE), con prisma.

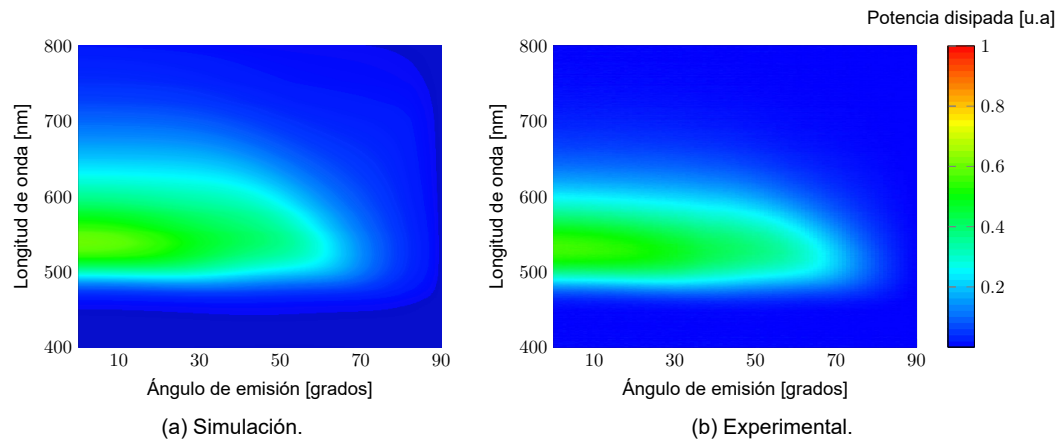


Figura 5.10: Comparación entre la simulación y los datos experimentales, para la polarización P (TM), con prisma.

Al colocar el prisma, la emisión se distorsiona; se concentra en ángulos mayores, manteniéndose el rango de longitudes de onda. En ambos casos la emisión en polarización p (TM) es más intensa que la s (TE), especialmente en el caso de la estructura con prisma. Esto corrobora el modelo, que cuenta con dos dipolos con polarización TM (p) y solo uno con polarización TE (s), como se ve en **Fig.(3.6)** del Capítulo (3).

### 5.3 ANÁLISIS DE POTENCIA DISIPADA EN LA ESTRUCTURA

En la **Fig.(5.11)** se puede observar que la mayoría de la potencia disipada se pierde hacia el canal no radiativo, seguido por el sustrato. Los valores obtenidos son muy similares a los descritos en otras publicaciones [Mehta & Saxena (2006)]. De la **Ec.(1.1)**, la eficiencia cuántica externa es

$$\eta_{EQE} = \gamma \cdot \eta_{S/T} \cdot q \cdot \eta_{out} = 1 \cdot 0.25 \cdot 0.2 \cdot 19.8 = 0.99\% \quad (5.1)$$

Esta eficiencia está dentro del rango para este tipo de estructuras con el material emisor  $Alq_3$  [Nowy (2010)].

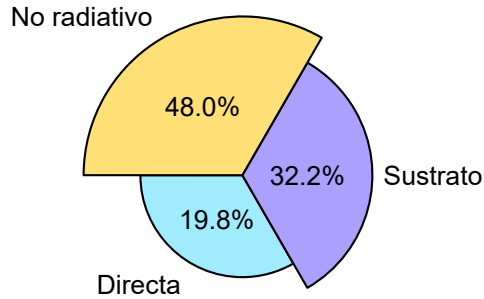


Figura 5.11: Fracciones de potencias disipadas para la estructura analizada.

En la **Fig.(5.12)** se observa la potencia de los canales de disipación separada en polarización TM (p) y TE (s). De la Sección (3.1) sabemos que los plasmones de superficie polaritón solo pueden ser generados por radiación de polarización TM (p), y que la mayoría de la potencia se pierde en el canal no radiativo, explicando la disparidad en las figuras.

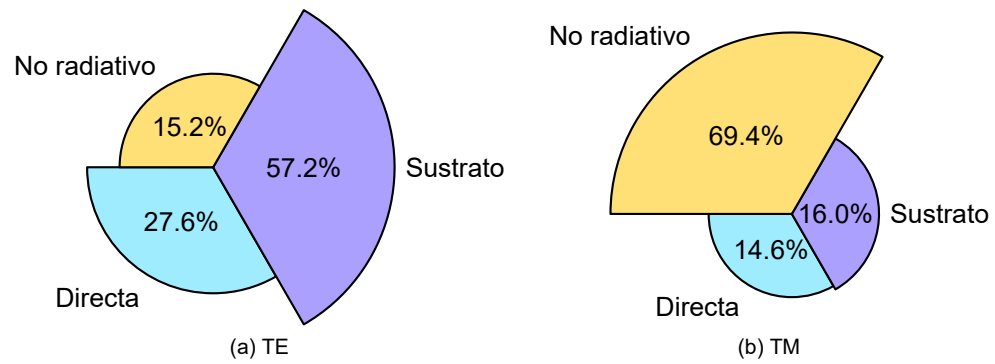


Figura 5.12: Fracciones de potencias disipadas para las polarizaciones TM y TE en la estructura analizada.

Teniendo en cuenta las numerosas consideraciones y aproximaciones del modelo, los resultados de la simulación muestran un razonable parecido a los resultados experimentales mostrados en [Nowy et al. (2008)] y [Nowy (2010)].

## CAPÍTULO 6. MODIFICACIÓN DE DIFERENTES PARÁMETROS DE LA ESTRUCTURA OLED

Hay una gran cantidad de variables involucradas en el funcionamiento de un dispositivo OLED. A continuación, se entregan algunos ejemplos, al cambiar ciertos parámetros en el OLED, analizando su impacto en la proporción de potencia que va hacia cada canal de disipación.

### 6.1 ESPESOR DE LA CAPA DE TPD

Se hizo variar el espesor de la capa de TPD, que funciona como transportador de huecos. Como se menciona en la Sección (5.1) del Capítulo (5), el TPD tiene un índice de refracción muy similar al del  $\text{Alq}_3$ , pero cuenta con un coeficiente de extinción pequeño, pero diferente de cero, en el rango de longitudes de onda estudiado, de 400 a 800 [nm].

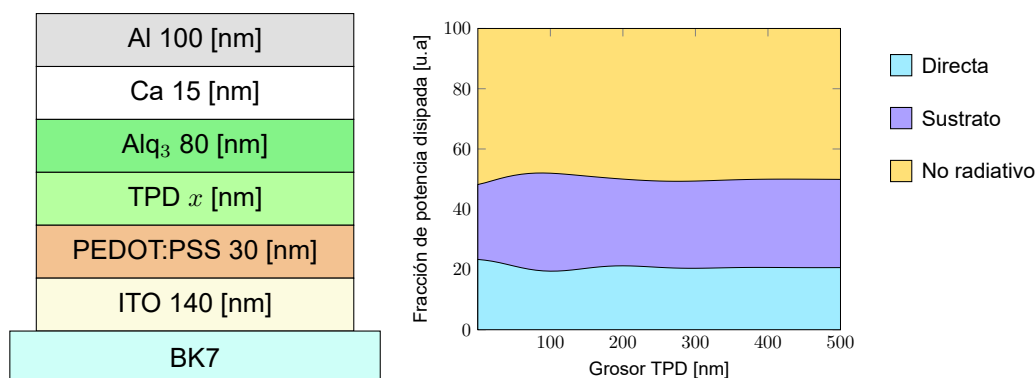


Figura 6.1: Variación de la fracción de potencia disipada al aumentar el espesor de la capa de TPD.

En la **Fig.(6.1)** se aprecia que la variación del espesor de TPD de 0 a 400 [nm] no produce cambios muy pronunciados en el canal directo, el que se mantiene relativamente constante, alrededor del 20%. El modelo no permite desagregar las pérdidas por absorción o por efectos térmicos, así que parte de la radiación que vaya hacia el canal directo no necesariamente se transforma en luz.



## 6.2 DISTANCIA DE LA CAPA EMISORA AL TPD

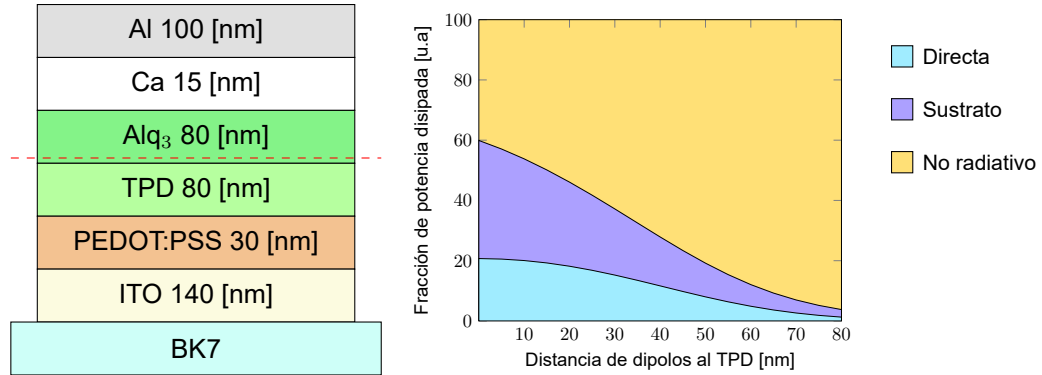


Figura 6.2: Distancia de la capa emisora a la interfaz con la capa de TPD.

A medida que la distancia aumenta, la potencia disipada directa disminuye, al igual que la del sustrato, como se puede observar en la **Fig.(6.2)**. Se incrementa la del canal no radiativo, porque la capa de dipolos está más cerca de la interfaz con los metales, y tal como se menciona en la Sección (3.1), esto hace que más potencia se pierda en la generación de plasmones de superficie polaritón y en modos guía de onda atrapados por reflexión total interna entre las capas de la estructura OLED.

En la práctica, concentrar la emisión, y por consiguiente, la recombinación de excitones en la capa emisora no es trivial; requiere calibrar las características eléctricas, químicas y geométricas de la estructura OLED, como se menciona en el Capítulo (1).

## 6.3 PROPORCIÓN DE DIPOLOS VERTICALES

Un sistema isotrópico de dipolos se describe con una proporción de 1/3 de dipolos verticales y 2/3 de horizontales, como se muestra en la Sección (3.1) del Capítulo (3). Variando la proporción de dipolos verticales (indirectamente la de horizontales), se obtiene la siguiente figura

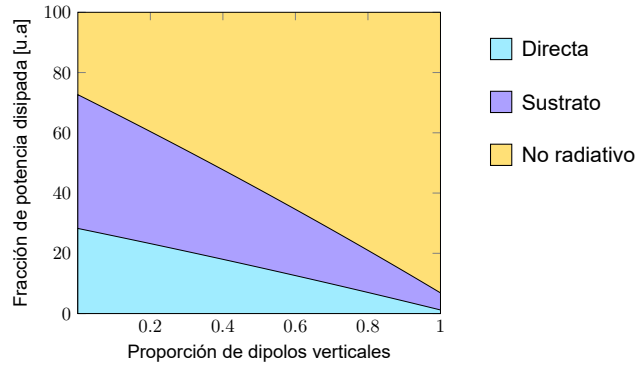


Figura 6.3: Variación de la fracción de potencia disipada al cambiar la proporción de dipolos verticales.

El descenso de la potencia disipada directa se explica en parte porque la mayor contribución a la potencia disipada total proviene de los dipolos horizontales, como ve en la **Fig.(3.6)** del Capítulo (3).

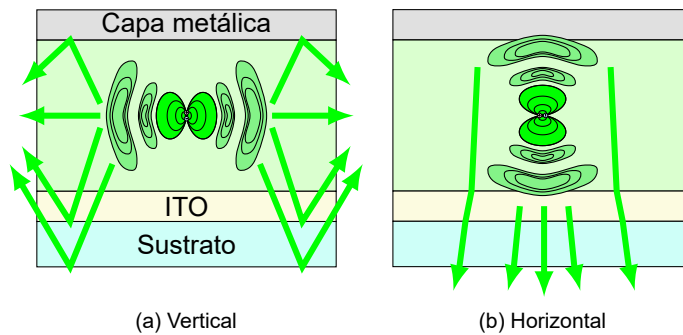


Figura 6.4: La propagación del campo electromagnético de un dipolo oscilante se concentra en la dirección horizontal. Adaptado de [Yokoyama (2011)].

Observamos en la **Fig.(6.4)** que los dipolos verticales, normales a las interfaces entre las capas, concentran su emisión hacia los lados de las estructura OLED, quedando atrapada por reflexión total interna (canales sustrato y guía de ondas), mientras que los dipolos horizontales la emiten hacia la dirección que resulta más conveniente para aumentar la eficiencia radiativa del dispositivo OLED. Por desgracia, parte de la emisión en esta orientación alimenta la formación de plasmones de superficie polaritón, y parte de la luz también puede quedar atrapada por reflexión total interna, en los ángulos más oblicuos.

## 6.4 ESPESOR DE LAS CAPAS DE TRANSPORTE DE CARGA

Finalmente, se hicieron variar las capas de transporte de electrones,  $\text{Alq}_3$  y la de transporte de huecos, TPD. A diferencia de los ejemplos anteriores, en la **Fig.(6.5)** solo se muestra la potencia disipada hacia el canal directo. Este tipo de análisis permite hacer variar más de un parámetro a la vez.

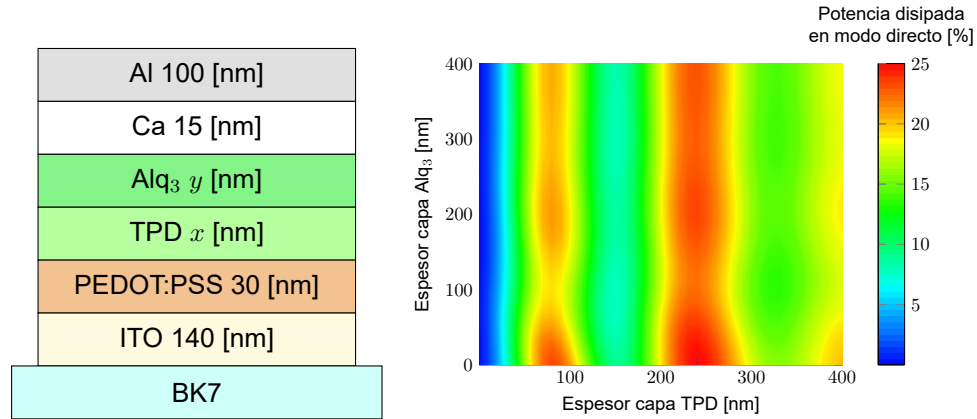


Figura 6.5: Espesor de la capa de TPD vs. la capa de  $\text{Alq}_3$ , en ambos casos de 0 a 400 [nm].

Se puede observar que la región de mayor potencia disipada al canal directo, y por consiguiente, de mayor eficiencia externa, se produce cuando la capa de TPD tiene aproximadamente 250 [nm] y el espesor de  $\text{Alq}_3$  se minimiza, considerando los demás parámetros constantes. Disminuir el espesor de la capa de  $\text{Alq}_3$  puede tener consecuencias en otras características no cubiertas por el modelo y la simulación utilizada, como variar la eficiencia eléctrica o disminuir su integridad estructural.

Todas las estrategias anteriores pueden tomarse como primeros pasos en la optimización de la emisión óptica de estructuras OLED, teniendo en cuenta que la construcción de estos dispositivos también depende de factores como sus procesos de fabricación, características y eficiencia eléctrica, u alguna otra consideración práctica. El análisis óptico descrito debe complementarse con modelos y simulaciones de todos los parámetros posibles.

## CONCLUSIÓN

Se desarrolló un algoritmo iterativo que describe las características ópticas de una estructura OLED multicapa, con diferentes materiales y espesores, con el que es posible estimar la eficiencia radiativa de un dispositivo OLED real. El modelo de emisión dipolar, en conjunto con el método de matrices de transferencia, es capaz de simular los procesos físicos relacionados con la emisión de luz en un dispositivo OLED.

Los datos de entrada del modelo, como los índices de refracción, son muy importantes para el funcionamiento de la simulación, y es preferible utilizar aquellos que vienen de experimentos reales, en vez de los calculados a través de ajustes polinomiales o el modelo de Lorentz. El espectro de fotoluminiscencia del material emisor es fundamental para la simulación y posterior análisis en el rango de longitudes de onda estudiado; sin él, las características de color del dispositivo no se mostrarían en los resultados.

Los parámetros como la orientación de los dipolos y la polarización de la radiación emitida influyen en gran medida en la emisión dipolar, aunque se constató que la mayor parte va a la creación de plasmones de superficie polaritón o queda atrapada en modo guía de ondas, debido a reflexión total interna. Los dos parámetros que más afectan la extracción de radiación hacia el canal directo son la distancia de los dipolos a la capa metálica, y la orientación de los dipolos.

Al acercar los dipolos a la capa metálica, se confirma que la potencia se disipa hacia la generación de SPPs, incluso a costa del modo sustrato. También, al aumentar la concentración de dipolos verticales en detrimento de los horizontales, se ve un marcado descenso hacia cero de la extracción de luz hacia el canal directo, debido a las características geométricas de la estructura y los campos electromagnéticos de los dipolos oscilantes simulados.

La simulación desarrollada permite realizar estimaciones de la eficiencia radiativa de una estructura OLED de múltiples capas planas, considerando otros parámetros, como la eficiencia eléctrica y cuántica, como constantes.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Barnes, W. (1998). Fluorescence near interfaces: the role of photonic mode density. *Journal of modern optics*, 45(4), 661–699.
- Benisty, H., Stanley, R., & Mayer, M. (1998). Method of source terms for dipole emission modification in modes of arbitrary planar structures. *JOSA A*, 15(5), 1192–1201.
- Brütting, W., Berleb, S., & Mückl, A. G. (2001). Device physics of organic light-emitting diodes based on molecular materials. *Organic electronics*, 2(1), 1–36.
- Brütting, W., Frischeisen, J., Schmidt, T. D., Scholz, B. J., & Mayr, C. (2013). Device efficiency of organic light-emitting diodes: Progress by improved light outcoupling. *physica status solidi (a)*, 210(1), 44–65.
- Celii, F. G., Harton, T. B., & Phillips, O. F. (1997). Characterization of organic thin films for oleds using spectroscopic ellipsometry. *Journal of electronic materials*, 26(4), 366–371.
- Chen, C.-Y., Chen, Y.-J., Lee, W.-K., Lu, C.-Y., Lin, H. Y., & Wu, C.-C. (2016). Analyses of optical out-coupling of organic light-emitting devices having micromesh indium tin oxide and conducting polymer as composite transparent electrode. *Optics express*, 24(10), A810–A822.
- Chen, H.-W., Lee, J.-H., Lin, B.-Y., Chen, S., & Wu, S.-T. (2018). Liquid crystal display and organic light-emitting diode display: present status and future perspectives. *Light: Science & Applications*, 7(3), 17168.
- Choi, S., Kwon, S., Kim, H., Kim, W., Kwon, J. H., Lim, M. S., Lee, H. S., & Choi, K. C. (2017). Highly flexible and efficient fabric-based organic light-emitting devices for clothing-shaped wearable displays. *Scientific reports*, 7(1), 6424.
- Haskal, E., French, I., Lifka, H., Sanders, R., Kretz, P., Chuiton, E., Gomez, G., Mazel, F., Prat, C., Templier, F., et al. (2007). Flexible oled displays made with the eplar process. *Proc. EURODISPLAY 2007*, (pp. 36–39).
- Ho, S., Liu, S., Chen, Y., & So, F. (2015). Review of recent progress in multilayer solution-processed organic light-emitting diodes. *Journal of Photonics for Energy*, 5(1), 057611.
- Hobson, P., Wasey, J., Sage, I., & Barnes, W. (2002). The role of surface plasmons in organic light-emitting diodes. *IEEE Journal of selected topics in quantum electronics*, 8(2), 378–386.
- Jeon, S., Kang, J.-W., Park, H.-D., Kim, J.-J., Youn, J. R., Shim, J., Jeong, J.-h., Choi, D.-G., Kim, K.-D., Altun, A. O., et al. (2008). Ultraviolet nanoimprinted polymer nanostructure for organic light emitting diode application. *Applied Physics Letters*, 92(22), 200.
- Joannopoulos, J. D., Johnson, S. G., Winn, J. N., & Meade, R. D. (2008). Molding the flow of light. *Princeton Univ. Press, Princeton, NJ [ua]*.
- Kalinowski, J., & Szybowska, K. (2008). Photoconduction in the archetype organic hole transporting material tpd. *Organic Electronics*, 9(6), 1032–1039.
- Karzazi, Y. (2014). Organic light emitting diodes: Devices and applications. *J. Mater. Environ. Sci*, 5(1), 1–12.
- Kim, H. S., Moon, S. I., Hwang, D. E., Jeong, K. W., Kim, C. K., Moon, D.-G., & Hong, C. (2016). Novel fabrication method of microlens arrays with high oled outcoupling efficiency. *Optics & Laser Technology*, 77, 104–110.
- Lee, C., Uddin, A., Hu, X., & Anderssonb, T. (2004). Study of alq3 thermal evaporation rate effects on the oled. *Materials Science and Engineering: B*, 112(1), 14–18.

- Lee, J., Kim, J., & Jeon, E. S. (2018). Analysis of light-extraction efficiency according to the size of random nanostructures for oled. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 32(6), 2707–2713.
- Lee, J. S. (2017). Lifetime and efficiency of blue phosphorescent organic-light emitting diodes.
- Lin, H.-Y., Ho, Y.-H., Lee, J.-H., Chen, K.-Y., Fang, J.-H., Hsu, S.-C., Wei, M.-K., Lin, H.-Y., Tsai, J.-H., & Wu, T.-C. (2008). Patterned microlens array for efficiency improvement of small-pixelated organic light-emitting devices. *Optics express*, 16(15), 11044–11051.
- Lu, M.-H., Weaver, M., Zhou, T., Rothman, M., Kwong, R., Hack, M., & Brown, J. (2002). High-efficiency top-emitting organic light-emitting devices. *Applied Physics Letters*, 81(21), 3921–3923.
- Macleod, H. A. (2010). *Thin-film optical filters*. CRC press.
- Malitson, I. (1965). Interspecimen comparison of the refractive index of fused silica. *Josa*, 55(10), 1205–1209.
- Mao, G., Wu, Z., He, Q., Jiao, B., Xu, G., Hou, X., Chen, Z., & Gong, Q. (2011). Considerable improvement in the stability of solution processed small molecule oled by annealing. *Applied Surface Science*, 257(17), 7394–7398.
- Maring, J. (2019). Samsung galaxy fold: Everything you need to know! <https://www.androidcentral.com/samsung-galaxy-fold>. Consulta: 2019-02-26.
- Mehta, D. S., & Saxena, K. (2006). Light out-coupling strategies in organic light emitting devices. In *Proc. ASID*, vol. 6, (pp. 198–201).
- Michael, V. (2012). *Fabrication of OLED on FTO and ITO coated Substrates A thesis submitted to De Montfort University in partial fulfillment of the requirements for the award of the Degree of Masters of Science (Msc) in Microelectronics and*. Ph.D. thesis.
- Mu, H., Shen, H., & Klotzkin, D. (2004). Dependence of film morphology on deposition rate in ito/tpd/alq3/al organic luminescent diodes. *Solid-State Electronics*, 48(10-11), 2085–2088.
- Novotny, L. (1997). Allowed and forbidden light in near-field optics. i. a single dipolar light source. *JOSA A*, 14(1), 91–104.
- Nowy, S. (2010). Understanding losses in oleds: optical device simulation and electrical characterization using impedance spectroscopy. *University Augsburg*.
- Nowy, S., Reinke, N. A., Frischeisen, J., & Brütting, W. (2008). Light extraction and optical loss mechanisms in organic light-emitting diodes. In *Organic Optoelectronics and Photonics III*, vol. 6999, (p. 69992V). International Society for Optics and Photonics.
- Rakić, A. D., Djurišić, A. B., Elazar, J. M., & Majewski, M. L. (1998). Optical properties of metallic films for vertical-cavity optoelectronic devices. *Applied optics*, 37(22), 5271–5283.
- Reinke, N. A. (2008). Photophysikalische prozesse und lichtextraktion in organischen leuchtdioden.
- Scholz, B. J., Frischeisen, J., Jaeger, A., Setz, D. S., Brütting, W., et al. (2012). Extraction of surface plasmons in organic light-emitting diodes via high-index coupling. *Optics express*, 20(102), A205–A212.
- Shibata, M., Sakai, Y., & Yokoyama, D. (2015). Advantages and disadvantages of vacuum-deposited and spin-coated amorphous organic semiconductor films for organic light-emitting diodes. *Journal of Materials Chemistry C*, 3(42), 11178–11191.

- Sohail, O. (2018). Samsung might have lost its smartphone market share, but it's raking in the cash thanks to oled screen sales. <https://wccfttech.com/samsung-smartphone-oled-market-93-percent/>. Consulta: 2019-02-26.
- Sommerfeld, A. (1949). *Partial differential equations in physics*, vol. 1. Academic press.
- Tak, Y.-H., Kim, K.-B., Park, H.-G., Lee, K.-H., & Lee, J.-R. (2002). Criteria for ito (indium–tin-oxide) thin film as the bottom electrode of an organic light emitting diode. *Thin Solid Films*, 411(1), 12–16.
- Tang, C. W., & VanSlyke, S. A. (1987). Organic electroluminescent diodes. *Applied physics letters*, 51(12), 913–915.
- Uniyal, A., Mittal, P., et al. (2016). Performance comparison of monolayer, bilayer and multilayer organic light emitting diodes. In *2016 International Conference on Computing, Communication and Automation (ICCCA)*, (pp. 1505–1509). IEEE.
- Wang, H., Toma, A., Wang, H.-Y., Bozzola, A., Miele, E., Haddadpour, A., Veronis, G., De Angelis, F., Wang, L., Chen, Q.-D., et al. (2016). The role of rabi splitting tuning in the dynamics of strongly coupled j-aggregates and surface plasmon polaritons in nanohole arrays. *Nanoscale*, 8(27), 13445–13453.
- Wasey, J., & Barnes, W. (2000). Efficiency of spontaneous emission from planar microcavities. *Journal of Modern Optics*, 47(4), 725–741.
- Wei, M.-K., Lee, J.-H., Lin, H.-Y., Ho, Y.-H., Chen, K.-Y., Lin, C.-C., Wu, C.-F., Lin, H.-Y., Tsai, J.-H., & Wu, T.-C. (2008). Efficiency improvement and spectral shift of an organic light-emitting device by attaching a hexagon-based microlens array. *Journal of optics a: pure and applied optics*, 10(5), 055302.
- Wei, M.-K., Lin, C.-W., Yang, C.-C., Kiang, Y.-W., Lee, J.-H., & Lin, H.-Y. (2010). Emission characteristics of organic light-emitting diodes and organic thin-films with planar and corrugated structures. *International journal of molecular sciences*, 11(4), 1527–1545.
- Willems, K. A., & Van Duyne, R. P. (2007). Localized surface plasmon resonance spectroscopy and sensing. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 58, 267–297.
- Yersin, H. (2004). Triplet emitters for oled applications. mechanisms of exciton trapping and control of emission properties. In *Transition Metal and Rare Earth Compounds*, (pp. 1–26). Springer.
- Yokoyama, D. (2011). Molecular orientation in small-molecule organic light-emitting diodes. *Journal of Materials Chemistry*, 21(48), 19187–19202.
- Zengin, G., Johansson, G., Johansson, P., Antosiewicz, T. J., Käll, M., & Shegai, T. (2013). Approaching the strong coupling limit in single plasmonic nanorods interacting with j-aggregates. *Scientific reports*, 3, 3074.