

UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS
Departamento de Física



**Simulación computacional de la eficiencia de recombinación OLED
con Drift Diffusion**

Gastón Antonio González Teruel

Profesor guía: Prof. Felipe Herrera

**Tesis para optar al Título Profesional de
Ingeniero Físico**

Santiago – Chile

2018

© Gastón Antonio González Teruel , 2018



• 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 de recombinación OLED con Drift Diffusion

Gastón Antonio González Teruel

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. Roberto Bernal
Director de Departamento

Dr. Felipe Herrera
Profesor guía

RESUMEN

La demanda de los dispositivos OLED ha crecido considerablemente desde la última década para la fabricación de pantallas de celulares como de televisores. Su flexibilidad, peso ligero y su gran calidad de imagen y de contraste los hacen atractivo a la industria tecnológica, proyectando que para los próximos años, la industria de los dispositivos OLED siga creciendo.

Mejorar la eficiencia de esta tecnología aportara en la creación de dispositivos con menor consumo energético que, considerando la gran cantidad de dispositivos que hay en el mercado, permitiría un ahorro energético significativo a gran escala.

En la presente tesis se estudiaron las principales aplicaciones y características de un OLED contrastándolas con su análogo inorgánico LED. Se desarrollaron 2 programa en MATLAB capaz de simular el transporte de carga de un LED inorgánico y de un single carrier OLED con el modelo Drift Diffusion y el método de Scharfetter Gummel.

Se simularon tres dispositivos single carrier OLED con espesores diferentes (67,98 y 122 [nm]) con uso una movilidad descrita por el modelo Gaussiano extendido para semiconductores orgánicos.

Las graficas de J(V) obtenidas replicaron los datos experimentales obtenidos por Van Mensfoort et al. (2008). Se obtuvieron los perfiles de recombinación dando a conocer en que sector del dispositivo existió la recombinación electrón-hueco. Las eficiencias calculadas fueron de $\approx 20\%$ para el LED inorgánico y de $\approx 0.001\%$ para el OLED single carrier.

Palabras Claves: OLED, Single Carrier, Drift Diffusion, Calculo numérico, MATLAB, Semicondutor Orgánico, pantalla, Modelo Gaussiano Extendido, Scharfetter Gummel

A mi Familia y Novia ...

*"Lo que sabemos es una gota de agua
lo que ignoramos es el océano"*
Isaac Newton

AGRADECIMIENTOS

La presente tesis realizada en la Universidad de Santiago de Chile es producto del esfuerzo de muchas personas, las cuales me apoyaron, corrigieron, opinaron y acompañaron en una o mas partes del proceso de investigación de esta tesis.

En primer lugar agradezco a mis padres Ivonne Teruel y Gastón González que me brindaron todo el apoyo, materiales y cariño necesario para mi formación tanto académica, como personal.

A hermanas que me acompañaron y motivaron a estudiar.

A todos los profesores que desde la enseñanza básica me motivaron y contribuyeron a mi formación académica.

A mi novia Belén que me acompaña y motivo en todo momento.

A mis amigos que alentaron y respetaron el trabajo realizado en la presente tesis.

A mi Director de Tesis Dr. Felipe Herrera por todo su apoyo, por creer en mi y en mi trabajo y por su paciencia ante mi inconsistencia.

TABLA DE CONTENIDO

Introducción	1
1 Diodo orgánico de emisión de luz	4
1.1 Semiconductor Orgánico	4
1.1.1 Origen	5
1.1.2 Tipos de Semiconductores Orgánicos	5
1.1.3 Características de los OSC	6
1.1.3.1 Homo-Lumo	7
1.1.3.2 Desorden energético y Distribución Gaussiana	9
1.1.3.3 Movilidad y el Modelo Gaussiano Extendido "EGDM"	11
1.2 Dispositivo semiconductor de emisión de luz	12
1.2.1 LED	13
1.2.2 OLED	13
1.2.2.1 Mecanismo de Recombinación	15
1.2.2.2 Importancia de la Movilidad	16
1.2.2.3 Eficiencia	16
1.3 Comparación entre LED y OLED	20
1.3.1 Resumen	22
2 Simulación Computacional para OLED: Modelo Drift Diffusion	23
2.0.1 Ecuación de Poisson:	25
2.0.2 Ecuaciones de corriente:	25
2.0.3 Ecuaciones de continuidad:	25
2.1 Método Numérico	26
2.1.1 Discretización del medio	26
2.2 Métodos de Resolución	27
2.2.1 Método de Newton	28
2.2.2 Método de Scharfetter Gummel	28
2.3 Discretización de las Ecuaciones	29
2.3.1 Ecuación de Poisson discretizada	29
2.3.2 Ecuaciones de Corriente discretizadas	29
2.3.3 Ecuación de Continuidad Discretizada	30
2.4 Condiciones Iniciales y de Borde	31
2.4.1 Función de mejora g_3	33
2.5 Algoritmo Drift diffusion en Matlab	34
2.5.1 Parámetros iniciales	34
2.5.2 Estado Inicial	35
2.5.3 Estado en Equilibrio ($V_{app} = 0$)	35
2.5.4 Estado fuera del Equilibrio ($V_{app} > 0$)	36
2.5.5 Resultados (Outputs)	36
2.6 Desafíos	38
3 Simulación Numérica	39
3.1 simulación LED Inorgánico	39
3.1.1 LED Inorgánico	39
3.1.2 Recombinación y eficiencia del LED inorgánico	40
3.1.3 Implementación al LED Orgánico	41
3.2 Validación del Programa	41
3.2.1 Descripción de los Materiales	42
3.2.1.1 PEDOT:PSS	42

3.2.1.2 LEP (light-emitting polymer)	43
3.2.2 Comparación de datos	44
3.3 Recombinación y Eficiencia de Recombinación	46
3.3.1 Consideraciones para mejorar eficiencia	47
Conclusión	48
Referencias bibliográficas	49
Anexos	51

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.1 Características de materiales orgánicos de molécula pequeña y Polimérica.	6
Tabla 1.2 Diferencias entre Semiconductor Orgánico e Inorgánico	22
Tabla 3.1 <i>Eficiencia de recombinación del LED inorgánico en función del Voltaje aplicado.</i>	41
Tabla 3.2 Principales diferencias entre programa simulador de LED y OLED.	41
Tabla 3.3 <i>Parámetros del modelo que describen de manera óptima las curvas experimentales J(V) de la Figura 3.7.</i>	44
Tabla 3.4 <i>Eficiencia de recombinación para OLED de 122[nm] y 67[nm] en función del Voltaje aplicado.</i>	46
Tabla 5 <i>Parámetros del LED simulado</i>	55

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

Figura 1 Dispositivos con pantallas OLED; Reloj digital y smartphone Xiaomi, Televisor LG.	1
Figura 2 Teléfono Celular Samsung Infinity Flex.	2
Figura 3 Lamparas flexible OLED.	3
Figura 1.1 Moléculas orgánicas pequeñas, (a) anthraceno, (b) pentaceno	5
Figura 1.2 Moléculas orgánicas Largas,(a) polyacetyleno, (b) PPV: Polyphenylene Vinylene (polifenileno vinílico), (c) CN PPV.	6
Figura 1.3 Diagrama de energía de dos átomos de carbono que interactúan	8
Figura 1.4 Ejemplo del GAP para bencenoides en función del tamaño molecular. Para aumentar la longitud de la conjugación, desde el benceno hasta el pentaceno, la brecha se estrecha. Este efecto es causado por un aumento de la dislocación de las cargas y se amplifica aún más cuando las moléculas están cerca unas de otras.	9
Figura 1.5 Estructuras de bandas con densidad de estados parabólica y gaussiana.	11
Figura 1.6 LED de distinta frecuencia de onda (RGB).	13
Figura 1.7 Estructura de capas de un OLED: 1 Ánodo, 2 capa de inyección de huecos, 3 capa de transporte de huecos, 4 capa de emisión, 5 capa de transporte de electrones, 6 capa de inyección de electrones y 7 cátodo.	14
Figura 1.8 Ilustración esquemática del potencial incorporado V_{bi} en un OSC.	14
Figura 1.9 Distribución simplificada de energía del OLED. Los niveles HOMO y LUMO se tratan de forma análoga a las bandas de valencia y conducción en semiconductores inorgánicos y el nivel de vacío se supone alineado.	18
Figura 1.10 Principio de funcionamiento de un OLED de una capa.	19
Figura 1.11 Evolución de los dispositivos OLED (HIL: capa de inyección de huecos, HTL: capa de transporte de huecos, EML: capa emisiva, HBL: capa de bloqueo de huecos, ETL: capa de transporte de electrones).	20
Figura 1.12 Estructura de Led inorgánico P-N bajo funcionamiento	21
Figura 2.1 Representación gráfica de: a) Diffusion , b) Drift, c) Drift diffusion en un vaso se agua con tinta añadida. Drift: La tinta caerá hasta el fondo del vaso por la presencia del potencial gravitatorio. Diffusion: La tinta al entrar en contacto con el agua, por diferencia de concentraciones intentará difundirse en todo el vaso.	24
Figura 2.2 Esquema de discretización de parámetros.	27
Figura 2.3 Diagrama de Flujo del programa.	34
Figura 2.4 Diagrama de Flujo: Estado en equilibrio.	35
Figura 2.5 Diagrama de Flujo: Estado no en equilibrio.	37
Figura 3.1 Esquema de las capas del dispositivo Inorgánico	39
Figura 3.2 Perfil de recombinación del LED inorgánico	40
Figura 3.3 Esquema de las capas del dispositivo.	42
Figura 3.4 Esquema del OLED estudiado	43
Figura 3.5 Pantalla OLED de 13" fabricada por Philips	43
Figura 3.6 Pantalla matricial OLED para pantallas RGB	44
Figura 3.7 Comparación de curvas I-V experimentales y simuladas	45
Figura 3.8 Perfil de recombinación para distintos voltajes de 2 a 9 [V] del dispositivo de 122[nm].	46
Figura 9 Curva J(V) de ejes lineales simulada de OLED de $L=122[nm]$ a 10[V]	56
Figura 10 Curva J(V) de eje y Logarítmico simulada de OLED de $L=122[nm]$ a 10[V]	57
Figura 11 Curva $E(x)$ simulada de OLED de $L=122[nm]$ a 10[V]	57
Figura 12 Curva $\psi(x)$ simulada de OLED de $L=122[nm]$ a 10[V]	58
Figura 13 Curva $\mu_p(x)$ simulada de OLED de $L=122[nm]$ a 10[V]	58

Figura 14 Densidad de Huecos $p(x)$ simulada de OLED de $L=122[nm]$ a $10[V]$ 59

INTRODUCCIÓN

Al mirar a nuestro alrededor, estamos rodeados de dispositivos de iluminación, desde nuestros relojes digitales hasta complejas pantallas de televisores y celulares, las cuales pueden tener mas de 33 millones puntos de emisión de luz llamadas "pixeles" (Figura 1).



Figura 1: *Dispositivos con pantallas OLED; Reloj digital y smartphone Xiaomi, Televisor LG.*

En la sociedad moderna es de suma importancia buscar materiales mas eficientes, ecológicos, baratos y de fácil fabricación para el desarrollo tecnológico de la iluminación. El material que actualmente cumple con estos requisitos para la iluminación es el **Semiconductor orgánico**.

Industria

El LED Orgánico (OLED) tiene muchísimas ventajas sobre el LED inorgánico convencional, que son de interés para la industria. Dentro de la vida cotidiana, el término OLED se reconoce en tecnologías para televisiones de todos los tamaños, pero esta tecnología puede ir más allá, se podría hacer una pared entera de un solo OLED, prendas de vestir con estampados OLED, display de relojes personales y pantallas de celulares.

OLEDs como base de pantallas

- Televisores: Aparte de ser súper delgada y flexible, la mirada sobre los televisores OLED se impulsa por su impresionante calidad de imagen. Los píxeles de OLEDs se apagan y no se escapa la luz como en los LCD, por lo que se obtiene un negro auténtico que lo convierte en un excelente valor para las relaciones de contraste. Es una imagen mucho más lujosa que el promedio con retroiluminación LED y TV LCD. Además los televisores OLED tienen un ángulo de visión casi completa con casi 180 grados; gran ventaja sobre las pantallas LCD que son más baratas, pero que tienen un ángulo de visión muy restringido.
- Smart Phone-Watch: La industria le saca especial ventaja a la propiedad de ser flexible, delgada y el nulo consumo energético al reproducir negros (alargando el tiempo de uso del dispositivo sin ser cargado). Lo último en tecnología OLED, es el Infinity Flex de Samsung, la cual es un celular plegable (Figura 2).

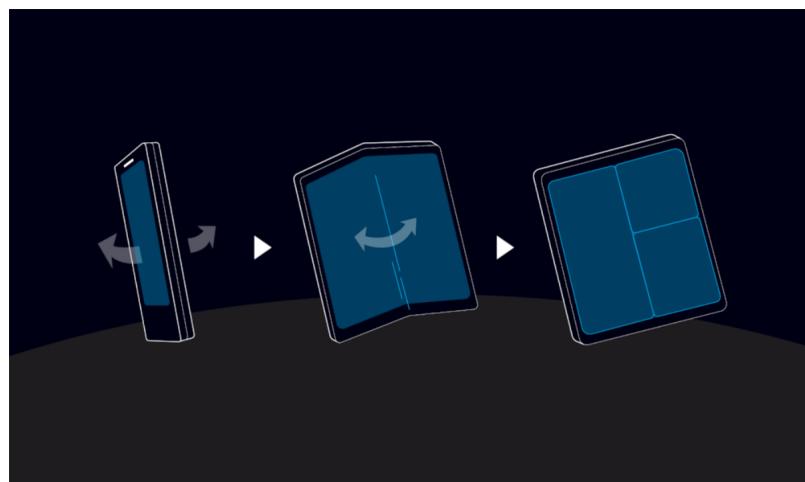


Figura 2: *Telefono Celular Samsumg Infinity Flex.*

Estos dispositivos funcionan a base de tecnología AMOLED consiste en un conjunto de píxeles OLED que se depositan o integran en una serie de transistores de película fina (TFT) para formar una matriz de píxeles, que se iluminan cuando han sido activados eléctricamente, controlados por los interruptores que regulan el flujo de corriente que se dirige a cada uno de los píxeles. El TFT continuamente regula la corriente que fluye por cada uno de los píxeles, para así caracterizar el píxel con el nivel de brillo que mostrará.

OLED en Iluminación

La versatilidad de los dispositivos OLED también puede ser aprovechada para la iluminación cotidiana. La flexibilidad de los dispositivos OLED será explotada por los fabricantes por su capacidad de personalización. Los dispositivos OLED de iluminación mas innovadores, son las *Lamparas OLED* de LG (Figura 3), las cuales son cintas de OLED capaces de doblarse (hasta un cierto punto) y pueden realizar curvas muy cerradas, lo que podría usarse en casi cualquier lugar. Por ejemplo en esquinas de una pared o en elementos con diferentes curvas. Lamentablemente, estas lámparas no saldrán al mercado pronto y LG expuso estos dispositivos a fin de motivar a otras compañías de desarrollarlas.

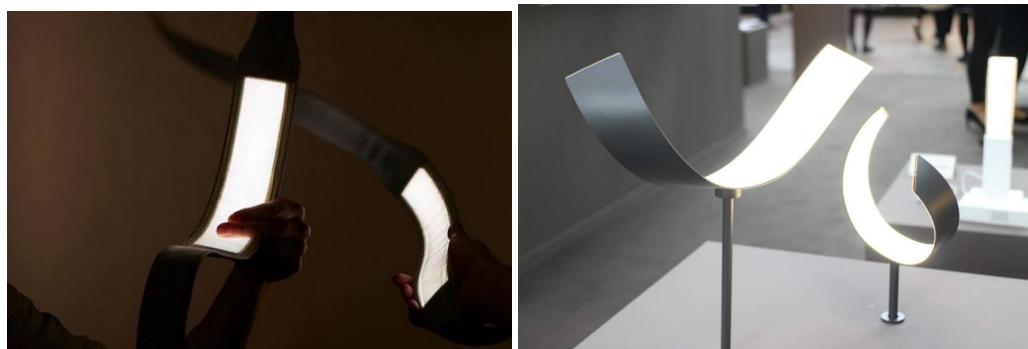


Figura 3: *Lamparas flexible OLED.*

CAPÍTULO 1. DIODO ORGÁNICO DE EMISIÓN DE LUZ

1.1 SEMICONDUCTOR ORGÁNICO

Un Semiconductor Orgánico (“OSC” por sus siglas en inglés “Organic Semiconductor”) es un material compuesto principalmente de cadenas de carbono la cual tiene la forma de cristales o de polímeros. Además poseen características muy similares a los semiconductores inorgánicos tales como la presencia de una banda prohibida (GAP) y conducción por electrones y huecos.

Los semiconductores orgánicos son livianos, menos costosos, flexibles y resistentes a las tensiones mecánicas que inducen la flexibilidad, no requieren salas ultra limpias para su fabricación, y su procesamiento se puede hacer en condiciones ambientales. La litografía es reemplazada por la impresión y los sustratos están hechos de materiales baratos como plástico, papel o tela.

Algunas de las características principales de los semiconductores orgánicos son [Khanna (2014)]:

- Los conceptos de banda de energía tienen validez limitada.
- Los sitios de transporte de carga tienen una densidad de estados (DOS) con forma Gaussiana.
- Las películas delgadas de materiales semiconductores orgánicos se fabrican fácilmente en áreas pequeñas o grandes.
- Estos materiales incluyen sustratos flexibles que mantienen sus características fundamentales incluso cuando se doblan apreciablemente.
- Debido a su estructura altamente caótica y desordenada (espacial y energéticamente), particularmente en estado amorfo, la movilidad del portador de carga en semiconductores orgánicos es muy reducida en comparación con los semiconductores inorgánicos fuertemente ordenados y unidos covalentemente, por lo tanto, no se debe esperar que los materiales orgánicos reemplacen completamente al silicio como la base preferida para los circuitos electrónicos.

1.1.1 Origen

Los materiales orgánicos han sido considerados tradicionalmente como aislantes hasta que a finales de los años 50 se demostró una débil conductividad eléctrica en moléculas orgánicas. La situación cambió cuando, en 1977, se descubrió un significativo aumento de 11 órdenes de magnitud en la conductividad eléctrica de un polímero de policetileno al introducir un halógeno en su estructura. El término “semiconductor orgánico”, que se utiliza con frecuencia hoy en día, fue acuñado específicamente para esta nueva clase de materiales conductores. Este descubrimiento, llevó a Heeger, MacDarmid y Shirakawa a conseguir el premio Nóbel de Química en el año 2000 por sus contribuciones en polímeros conductores [Chamorro Posada et al. (2008)].

1.1.2 Tipos de Semiconductores Orgánicos

En términos generales, los semiconductores orgánicos se dividen en dos clases principales:

- Moléculas orgánicas pequeñas, por ejemplo, pentaceno, que consta de cinco anillos de benceno unidos a lo largo de una línea. (Figura 1.1).

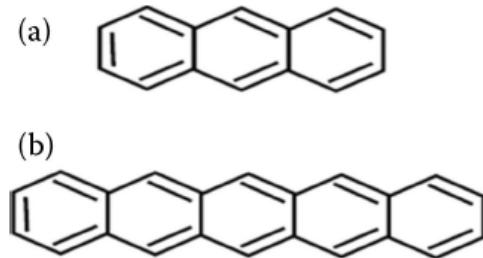


Figura 1.1: *Moléculas orgánicas pequeñas, (a) anthraceno, (b) pentaceno*

- Moléculas conjugadas de polímeros largos, hechas de concatenaciones de cientos o miles de átomos de carbono, por ejemplo, poliacetileno. (Figura 1.2).

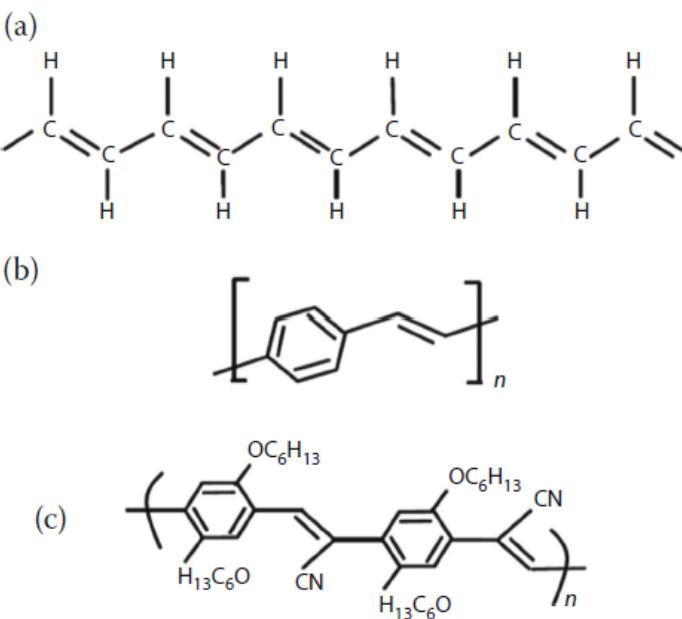


Figura 1.2: Moléculas orgánicas Largas,(a) polyacetyleno, (b) PPV: Polyphenylene Vinylene (polifenileno vinílico), (c) CN PPV.

Los OSC de pequeña molécula y los polímeros poseen ciertas características que la diferencian, dadas por la Tabla 1.1 [Khanna (2014)].

Pequeña molécula y Polímeros		
Característica	Pequeña molécula	Polímeros
Peso molecular	Bajo < 1000	Sobre > 1000
Gap	Pequeña	Grande
Ambiente de Fabricación	Requiere ambiente ultralimpio	No requiere ambiente ultralimpio
Tiempo de Fabricación	Una semana	No mas de 2 días
Método de Fabricación	Por sublimación al vacío o evaporación (100–500 °C)	Por fundición (revestimiento por rotación), inyección de tinta o serigrafía, seguidos de ciclos de secado o calentamiento.

Tabla 1.1: Características de materiales orgánicos de molécula pequeña y Polimérica.

1.1.3 Características de los OSC

Los semiconductores orgánicos tienen muchas características en común con los semiconductores inorgánicos, pero los OSC tiene diferencias importantes con sus estructuras de bandas, desorden energético, distribución electrónica, movilidad y modelo de recombinación de portadores.

1.1.3.1 Homo-Lumo

“Donde el ingrediente básico de los materiales orgánicos es el átomo de carbono, el ingrediente básico de los semiconductores orgánicos es la conjugación” [Stallinga (2009)]. La conjugación es una cadena de átomos de carbono con enlaces simples y dobles alternos como se muestra en la Figura 1.2a. La existencia de esta estructura trae como resultado las existencias de una banda prohibida, HOMO y LUMO.

Se puede considerar que los cuatro electrones en cada átomo de carbono en la cadena residen tres en orbitales hibridados sp^2 y uno en un orbital p_z . Los tres electrones sp^2 se utilizan para formar enlaces covalentes a través de orbitales moleculares σ a los átomos de carbono vecinos en la cadena en cada lado y al grupo lateral (por ejemplo, un átomo de hidrógeno simple). El electrón restante en el orbital p_z se usa luego en un enlace covalente a través de un orbital molecular π con un átomo de carbono vecino en la cadena en un solo lado. El resultado es una cadena de enlaces alternados simples (solo σ) y dobles (σ y π). La Figura 1.3 [Stallinga (2009)] muestra el diagrama de energía de una interacción entre dos átomos de carbono que forman un doble enlace.

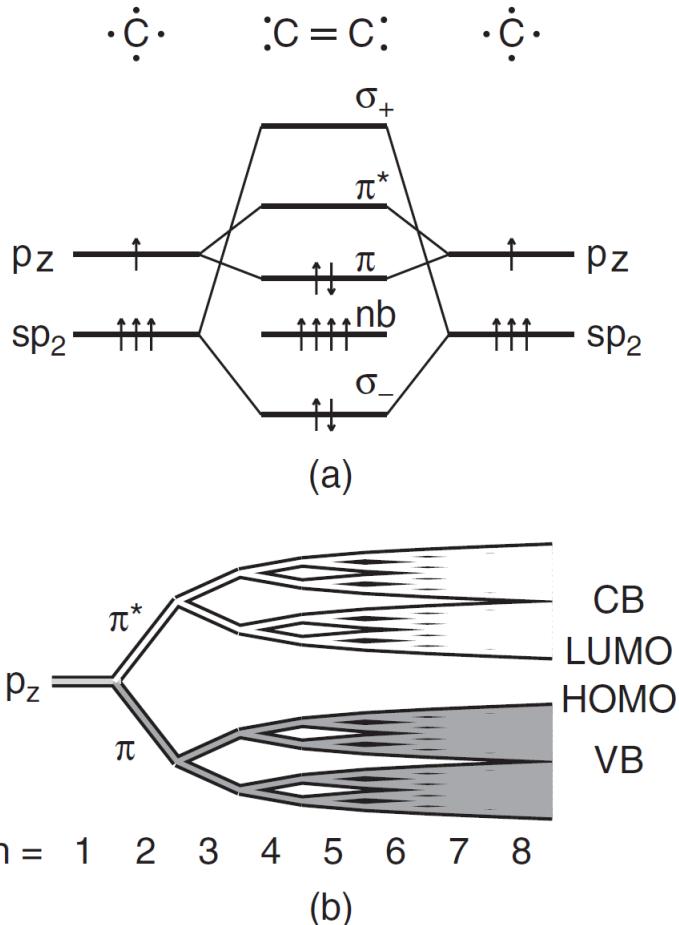


Figura 1.3: (a) Diagrama de energía de dos átomos de carbono que interactúan. Los orbitales atómicos sp^2 y p_z de los dos átomos de carbono individuales se combinan para formar orbitales moleculares π , σ y no enlazantes. (b) Una estructura de banda comienza a emergir con un espacio de banda estrecha cuando aumenta la cantidad de conjugación de enlaces simples y dobles alternantes. Se puede reconocer un HOMO y un LUMO que forman parte de la banda de valencia (VB) y la banda de conducción (CB), respectivamente.

Después de llenar los niveles de menor a mayor energía (usando las Reglas de Hund para el spin), se puede reconocer que se usan cuatro electrones (dos de cada átomo de carbono) en la unión, dos en el orbital σ y dos en el orbital π . Los cuatro electrones restantes están en orbitales no enlazantes (nb) y todavía están disponibles para unirse al resto de la cadena. La característica básica es la división entre los orbitales moleculares π y π^* causados por la interacción entre los orbitales atómicos p_z . Las interacciones entre los orbitales p_z más alejados en la cadena causan divisiones adicionales y más pequeñas de los niveles, como se indica esquemáticamente en la Figura 1.3(b). Se puede reconocer un highest occupied molecular orbital (HOMO, π) y un lowest unoccupied molecular orbital (LUMO, π^*).

La formación de una cadena de enlaces simples y dobles provoca una estructura de energía con un nivel HOMO y LUMO, con una división (band gap) en el rango de los

semiconductores (1-4 [eV]). La Figura 1.3 también muestra que un material con solo enlaces σ individuales, como el polietileno, tendrá un intervalo de banda mucho más amplio y no caerá fácilmente en la categoría de semiconductores. Para obtener un material semiconductor, la conjugación es esencial.

Para los materiales orgánicos poliméricos, el tamaño de la cadena de enlaces simples y dobles alternos es, en principio, infinito. Para materiales orgánicos oligoméricos, la cadena está limitada a la molécula. La figura 1.4 muestra el ejemplo específico de los bencenoides, cómo el aumento de la longitud de la cadena provoca un estrechamiento de las bandas. Para las cadenas de polímeros, se ha calculado un efecto similar de la división HOMO-LUMO en función de la longitud de la cadena. La Figura 1.4 [Stallinga (2009)] también muestra cómo la brecha de banda se reduce aún más cuando las moléculas se colocan en la forma de estado sólido causada por las interacciones de Van der Waals entre orbitales moleculares en las moléculas cercanas.

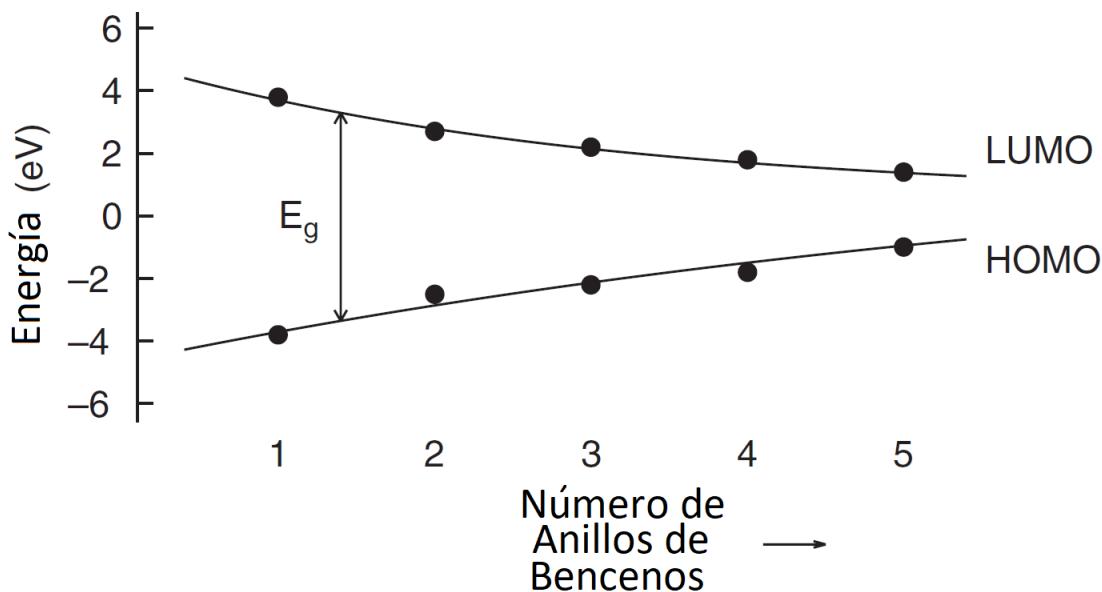


Figura 1.4: Ejemplo del GAP para bencenoides en función del tamaño molecular. Para aumentar la longitud de la conjugación, desde el benceno hasta el pentaceno, la brecha se estrecha. Este efecto es causado por un aumento de la dislocación de las cargas y se amplifica aún más cuando las moléculas están cerca unas de otras.

1.1.3.2 Desorden energético y Distribución Gaussiana

Los OSC tienen una estructura electrónica muy desordenada a diferencia de los semiconductores cristalinos (Figura 1.5). El transporte de carga se atribuye al salto entre sitios localizados, y se supone que la distribución de energía de estos sitios es Gaussiana.

En un semiconductor cristalino, la estructura de la banda usualmente se modela con una densidad de estados parabólica, en los semiconductores orgánicos una densidad Gaussiana de estados dado por:

$$N_G(\varepsilon; N_t, \sigma, \varepsilon_0) = \frac{N_t}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(\varepsilon - \varepsilon_0)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (1.1)$$

donde N_t es el total de los sitios disponibles. ε es la energía. ε_0 es la energía del centro, y σ es la desviación estándar de la gaussiana. Cuando se usan las estadísticas de Boltzmann y una densidad de estados parabólica, la densidad de electrones viene dada por:

$$n = N_c \exp\left(\frac{(\varepsilon_F - \varepsilon_C)^2}{kT}\right) \quad (1.2)$$

Donde N_c es la densidad de portadores en la banda de conducción, T es la temperatura, k es la constante de boltzmann y ε_F ε_C son las energías de Fermi y de conducción respectivamente. Cuando se usa una densidad Gaussiana de estados, la densidad electrónica esta dada por

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} N(\varepsilon; N_t, \sigma, \varepsilon_0) f(\varepsilon, \varepsilon_0) d\varepsilon \quad (1.3)$$

donde $f(\varepsilon, \varepsilon_0)$ es la probabilidad de ocupación de Fermi-Dirac. La 1.3 puede escribirse como:

$$n = N_{C,Eff} G\left(\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_C}{kT}; N_{tn}, \sigma_n, \varepsilon_C\right) \quad (1.4)$$

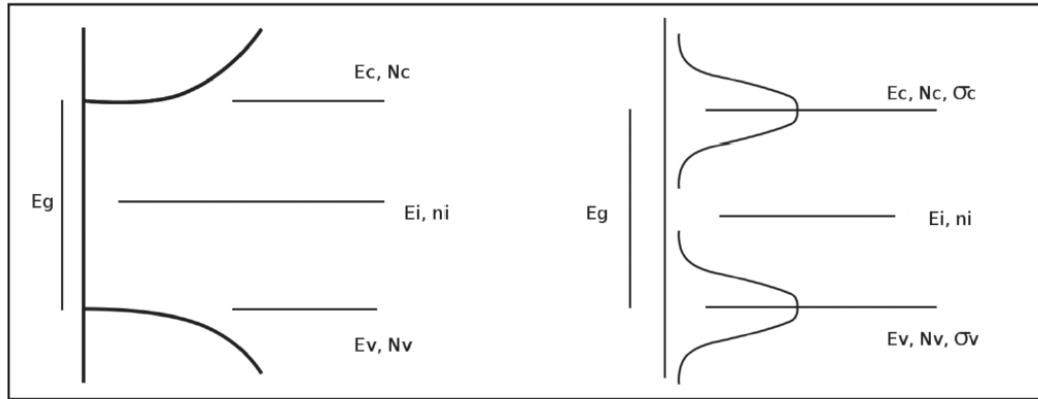
donde la función G debe calcularse numéricamente. Se puede definir una expresión equivalente para la densidad de huecos, dada por:

$$p = N_{V,Eff} G\left(\frac{\varepsilon_V - \varepsilon_F}{kT}; N_{tp}, \sigma_p, \varepsilon_V\right) \quad (1.5)$$

La densidad efectiva del borde de banda de los estados, $N_{C,Eff}$ y $N_{V,Eff}$, se elige para asegurar que las expresiones para la concentración de portadores intrínseca y el nivel Fermi intrínseco tengan la misma forma que las ecuaciones para una densidad de estados parabólica, es decir:

$$n_{ie} = \sqrt{N_{C,Eff} \cdot N_{V,Eff}} \exp\left(-\frac{(\varepsilon_C - \varepsilon_V)}{2kT}\right) \quad (1.6)$$

$$\varepsilon_i = \frac{(\varepsilon_C + \varepsilon_V)}{2} + \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{N_{V,Eff}}{N_{C,Eff}}\right) \quad (1.7)$$



Band structures with parabolic and Gaussian density of states.

Figura 1.5: *Estructuras de bandas con densidad de estados parabólica y gaussiana.*

1.1.3.3 Movilidad y el Modelo Gaussiano Extendido "EGDM"

El desorden energético de los semiconductores orgánicos afecta su movilidad. El modelo Gausiano extendido (EGDM), es una extensión del modelo de movilidad de Pasveer que considera los efectos de difusión [Pasveer et al. (2005)]. El EGDM muestra directa dependencia de la movilidad y:

1. La Temperatura "T"
2. La densidad portadora de carga "n" y "p"
3. El campo Eléctrico "E"

Una primera parte del EGDM escribe la movilidad como el modelo de Pasveer:

$$\mu(T, n, F) = \mu_{0,EGDM}(T)g_1(\hat{n}, \hat{\sigma})g_2(\hat{E}, \hat{\sigma}) \quad (1.8)$$

donde μ es la movilidad efectiva, μ_0 es la movilidad a $E = 0$ y $n = 0$, T es la temperatura, n es la densidad de electrones, E es campo eléctrico y g_1 y g_2 son las llamadas funciones de mejora. Las funciones mejora se escriben como:

$$\mu_{0,EGDM}(T) = \mu_{0,EGDM}^* \exp\left[-c\hat{\sigma}^2\right] \quad (1.9)$$

$$g_1(\hat{n}, \hat{\sigma}) = \exp\left(\frac{1}{2}(\hat{\sigma}^2 - \hat{\sigma})(2\hat{n})^\delta\right) \quad (1.10)$$

$$\delta = 2 \frac{\ln(\hat{\sigma}^2 - \hat{\sigma}) - \ln(\ln(4))}{\hat{\sigma}^2} \quad (1.11)$$

$$g_2(\hat{E}, \hat{\sigma}) = \exp \left(0.44(\hat{\sigma}^{3/2} - 2.2) \left(\sqrt{1 + 0.8\hat{E}^2} - 1 \right) \right) \quad (1.12)$$

donde $\hat{\sigma} = \frac{\sigma}{k_b T}$ es la desviación estándar de la Gaussiana, $\hat{n} = \frac{n}{N_t}$ es la densidad de portadores normalizada, $\hat{E} = \frac{qaE}{\sigma}$ es el campo eléctrico normalizado y $a = N_t^{-1/3}$ es la distancia promedio entre sitios, $\mu_{0,EGDM}^*$ es la movilidad base dependiente de la temperatura y c es una constante adimensional experimental.

Estas funciones de mejora no son lineales y aumentan considerablemente con valores más grandes del parámetro de desorden. En el EGDM, el DOS Gaussiano también influye en la difusión de la carga. Roichman, Preezant y Tessler señalaron que el uso de la relación de Einstein generalizada en lugar de la clásica es más apropiado. En este caso, el coeficiente de difusión D de Einstein generalizado está determinado por:

$$D = \frac{k_b T}{q} \mu(T, n, F) g_3(n, T) \quad (1.13)$$

donde la función mejora g_3 se escribe como:

$$g_3(n, T) = \frac{1}{k_b T} \frac{n}{\partial n / \partial \varepsilon_f} \quad (1.14)$$

siendo ε_f la energía de Fermi del LUMO, HOMO según electrón, hueco respectivamente.

1.2 DISPOSITIVO SEMICONDUCTOR DE EMISIÓN DE LUZ

Es un dispositivo semiconductor de estado sólido que al suministrarle una diferencia de potencial, es capaz de generar luz. Según sus características, éstos reciben distintos nombres, tales como HPLED, WLED, AMOLED, microLED y OLED. Todos estos artefactos funcionan bajo el mismo principio del dispositivo llamado diodo emisor de luz (también conocido por la sigla LED, del inglés light emitting diode).

1.2.1 LED

El principio del LED es el mismo que un diodo de unión PN normal que se suele usar en circuitos electrónicos, pero este no emite luz.

La física del LED y de las celdas solares son similares, dentro de los dispositivo ocurren 2 fenómenos, la combinación de portadores (un electrón y un hueco sen encuentran creando un fotón) y la generación de portadores (un foton crea un par electrón hueco). Para que un LED sea eficiente, la recombinacion debe ser mucho mayor que la generacion. Para la celda solar la generación de portadores debe ser mucho mayor que la recombinación.

Los LED vienen en tipos específicos que emiten un ancho de banda bastante estrecha, ya sea de luz visible a diferentes longitudes de onda de color (Figura 1.6).

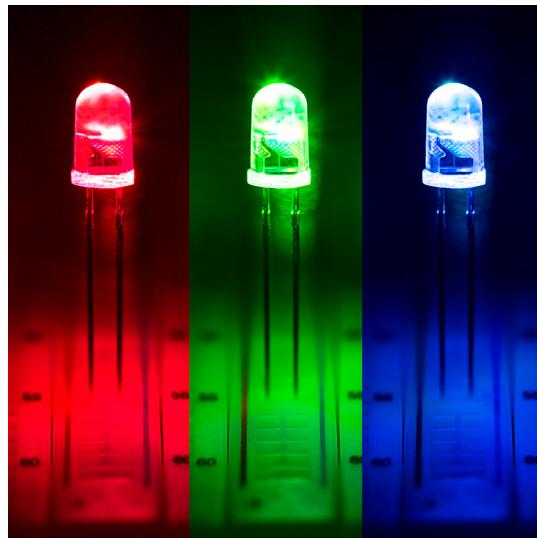


Figura 1.6: *LED de distinta frecuencia de onda (RGB)*.

1.2.2 OLED

Un diodo orgánico de emisión de luz, traducción del acrónimo inglés OLED (Organic Light-Emitting Diode), es un diodo que se basa en una capa electroluminiscente formada por una película de componentes orgánicos entre dos electrodos (un ánodo para la inyección de huecos y un cátodo para la inyección de electrones) que reaccionan a una determinada estimulación eléctrica, generando y emitiendo luz por sí mismos (Figura 1.7)[Stallinga (2009)].

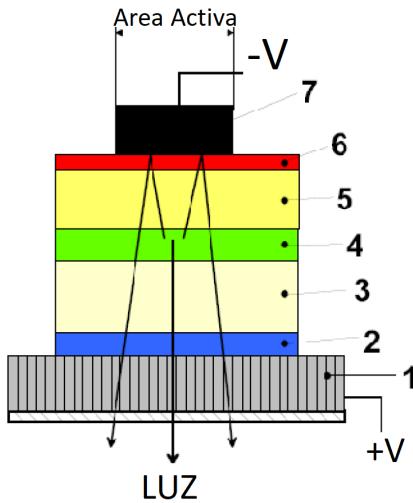


Figura 1.7: Estructura de capas de un OLED: 1 Ánodo, 2 capa de inyección de huecos, 3 capa de transporte de huecos, 4 capa de emisión, 5 capa de transporte de electrones, 6 capa de inyección de electrones y 7 cátodo.

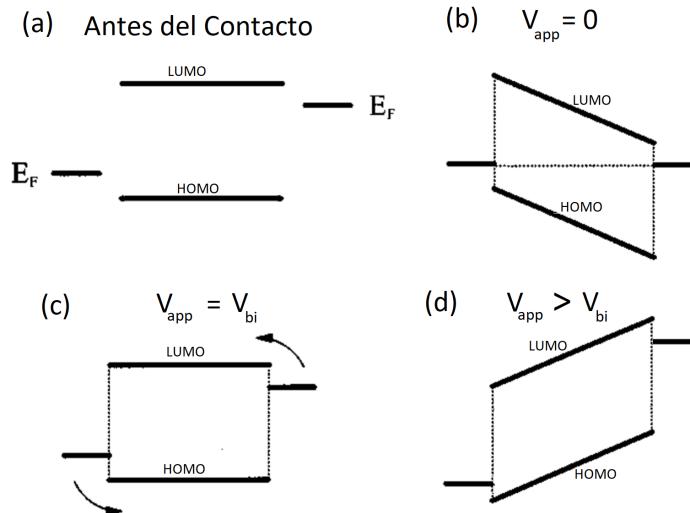


Figura 1.8: Ilustración esquemática del potencial incorporado V_{bi} en un OSC. (a) E_F representa el nivel de Fermi de los electrodos metálicos y el HOMO y LUMO del OSC separados de los contactos. (b) Al entrar en contacto los materiales, se establece una diferencia de potencial dentro del dispositivo V_{bi} que modifica el LUMO y HOMO a causa de igualación de energía de Fermi de los contactos; a mayor diferencia de energía de Fermi de los contactos, mas se distorsiona el HOMO y el LUMO. (c) Al aplicar un voltaje en polarización directa igual a la diferencia de energía de Fermi de los electrodos, permitiendo la existencia de corriente en el dispositivo. Este potencial V_{bi} debe superarse antes de que el dispositivo comience a funcionar. (d) Al aplicar un voltaje mayor que V_{bi} , no existe barrera potencial que oponga paso de electrones y huecos.

El modo de uso de un OLED es análogo a los semiconductores inorgánicos, bajo una corriente de polarización positiva producto de un voltaje externo mínimo, los huecos son

inyectados desde el ánodo y los electrones desde el cátodo. Los portadores de carga se mueven a través de las capas de transporte y se encuentran en la capa de emisión, donde se forman excitones (estados neutros excitados o pares electrón-hueco enlazados) que presentan una cierta probabilidad de decaer radiativamente (electroluminiscencia). El la superacion del potencial V_{bi} esta descrita por la Figura 1.8 [Malliaras et al. (1998)].

1.2.2.1 Mecanismo de Recombinación

Los electrones y los huecos en un OLED en funcionamiento se mueven principalmente por la influencia de un campo eléctrico externo y sus mutuas interacciones. Cuando la distancia entre un electrón y un hueco es más pequeña que el radio de captura r_c , se formará un par unido por fuerzas de Coulomb. El radio de captura es la distancia a la cual la energía de interacción de Coulomb se vuelve igual a la energía térmica k_bT y está dada por $r_c = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 k_b T}$ [van der Holst (2010)], donde ϵ_r es la constante dieléctrica relativa del material orgánico. Una vez que el electrón y el hueco hayan formado un par tan unido, es muy probable que se vuelvan a combinar. Cuando tanto el electrón como el agujero están en el mismo sitio, se forma un excitón en el sitio. Este excitón en el sitio puede decaer al estado fundamental, lo que conduce a la recombinación del electrón-hueco produciendo la emisión de un fotón (si la recombinación es radiativa).

Ya en 1903, Langevin derivó una expresión para el número total de eventos de recombinación por segundo y por unidad de volumen en un sistema de gas iónico [Langevin (1903)]. Llamamos a esta cantidad tasa de recombinación R . Desde entonces, la expresión para la tasa de recombinación se ha aplicado con éxito en numerosos sistemas, incluyendo dispositivos semiconductores orgánicos [van der Holst (2010)]. La expresión está dada por

$$R_{Lan} = \frac{e(\mu_e + \mu_h)}{\epsilon_r\epsilon_0}(n \cdot p) = \gamma_{Lan}(n \cdot p) \quad (1.15)$$

con μ_e μ_h las movilidades del electrón y del hueco respectivamente, y n y p las densidades de electrones y huecos respectivamente. γ_{Lan} es la tasa de recombinación bimolecular de Langevin.

Por otra parte, el principal modelo que se usa en los LED inorgánicos es la recombinación de Shockley-Read-Hall (SRH). La generación de electrones/huecos y la recombinación pueden tener lugar directamente entre la banda de valencia y la banda de conducción, o niveles trampas intermedios en la brecha de energía. El fenómeno de Shockley-Read-Hall es un proceso de dos partículas que expresa matemáticamente la probabilidad de que:

- Un electrón en la banda de conducción neutraliza un agujero en la banda de valencia a través

de la mediación de un nivel de atrapamiento desocupado ubicado en la brecha de energía (RSRH).

- Se emite un electrón desde la banda de valencia a la banda de conducción, a través de la mediación de un nivel de captura desocupado ubicado en la brecha de energía (GSRH).

$$R^{SRH} = \frac{n \cdot p - n_i^2}{\tau_p \cdot (n + n_i) + \tau_n \cdot (p + p_i)} \quad (1.16)$$

donde n_i es la densidad intrínseca de portadores y τ_n y τ_p es el tiempo de vida media de los portadores de electrones y huecos.

1.2.2.2 Importancia de la Movilidad

Durante el régimen de trabajo, para que dispositivo emita luz, la recombinación de electrones y huecos debe ocurrir en la capa orgánica luminiscente; es decir que se deben encontrar uno con los otros en las mismas concentraciones. Si un tipo de portador es inyectado de forma más eficiente y se mueve con una movilidad mas alta que el otro, entonces, los portadores mayoritarios atravesaran por completo la capa orgánica luminiscente sin recombinarse. Un perfecto balance entre la inyección y la movilidad de portadores es de vital importancia para obtener un dispositivo eficiente y esto no siempre es fácil de lograr.

1.2.2.3 Eficiencia

La eficiencia total (o eficiencia Externa η_0) se define como la razón entre el número de fotones emitidos por el dispositivo y número de electrones suministrados al dispositivo. Se calcula como el producto de tres parámetros:

$$\eta_0 = \eta_{in} \cdot \eta_r \cdot \eta_e \quad (1.17)$$

donde η_{in} es la eficiencia Cuantica interna que representa la proporción de fotones generados internamente al número total de electrones introducidos en el LED. También se denomina eficiencia radiativa. η_r es el factor de eficiencia de inyección que es la razón entre el número de electrones inyectados en la zona activa del LED y el número electrones fluyendo a través del dispositivo y η_e

es la eficiencia de extracción es la razón entre el número total de fotones emitidos fuera del LED y el número total de fotones generados.

Para alcanzar una eficiencia elevada (fotones emitidos con respecto a electrones inyectados), las capas deben cumplir los siguientes requisitos:

- La capa de inyección de huecos (HIL) tiene que facilitar la inyección de huecos desde el ánodo a la capa de transporte de huecos (HTL). Esto puede lograrse eligiendo el nivel energético HOMO (del HIL) de forma que esté entre el HOMO de la HTL y el potencial de ionización del ánodo (Figura1.9)[Stallinga (2009)].
- La capa de transporte de huecos debe tener una alta movilidad (de huecos) y debe impedir el que los electrones procedentes del cátodo lleguen al ánodo (dando lugar a una corriente de derivación).
- La transmisión de todas las capas orgánicas debe ser alta en la región de la longitud de onda de emisión.
- Las posiciones de los orbitales HOMO y LUMO de la capa de emisión (EML) deben posibilitar la inyección de huecos y electrones desde las capas vecinas.
- La eficiencia de fotoluminiscencia (proporción de excitones recombiniados radiativamente frente a excitones generados) del material emisor debe ser alta.
- Las propiedades de las capas de transporte de electrones (ETL) y de inyección de electrones (EIL) serían complementarias a las ya vistas para las capas HIL y HTL (es decir, niveles LUMO adecuados, alta movilidad de electrones).
- El ánodo debe tener un potencial de ionización alto para inyectar huecos en el HOMO de la HIL. Por consiguiente, el cátodo debe ser un metal con una función de trabajo baja como el magnesio o el calcio.
- Un electrodo debe ser transparente para lograr una alta eficiencia de extracción de la luz. Por esta razón, en la mayor parte de los casos se utiliza ITO (óxido de estaño-indio) como ánodo transparente.

La integración espacial de la tasa de recombinación J_r a través del grosor del dispositivo dará una densidad de corriente de recombinación neta dado por [Konezny et al. (2006)]:

$$J_r = \int_0^L eRdx \quad (1.18)$$

y la eficiencia de recombinación es:

$$\eta_r = \frac{J_r}{| J |} \quad (1.19)$$

donde J es la corriente total.

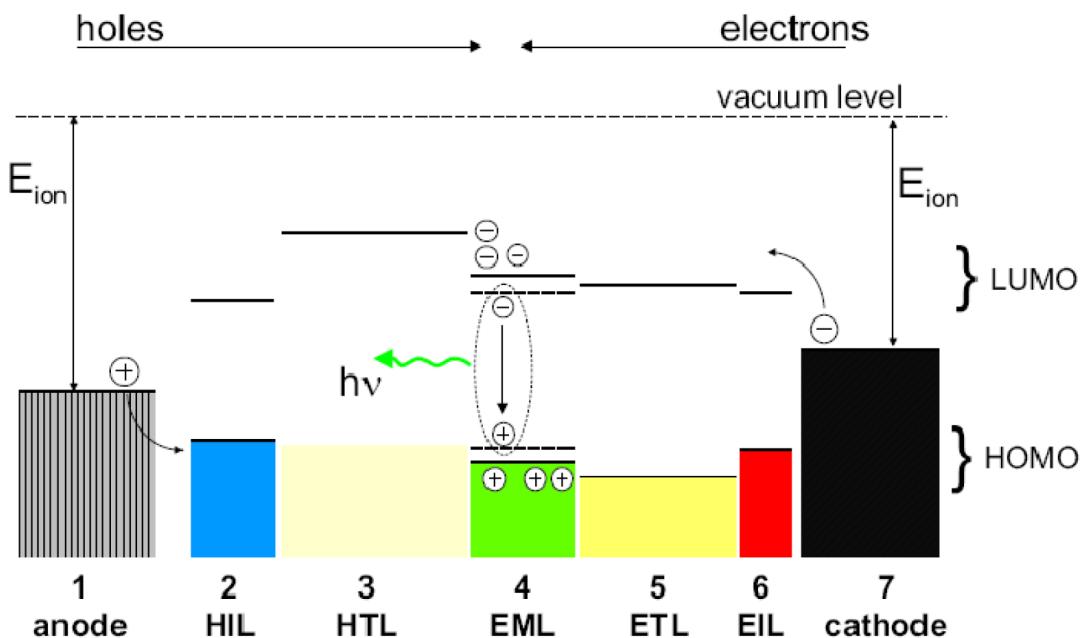


Figura 1.9: Distribución simplificada de energía del OLED. Los niveles HOMO y LUMO se tratan de forma análoga a las bandas de valencia y conducción en semiconductores inorgánicos y el nivel de vacío se supone alineado.

Casi todos los OLEDs fabricados cuentan con menos capas que las presentes en la Figura 1.9. Esto se debe a que algunos materiales orgánicos reúnen varias de las propiedades mencionadas anteriormente en una capa. Por ejemplo, en el dispositivo de Tang de 1987 (ITO/TPD/Alq3/Mg:Ag), el TPD sirve para la inyección de huecos, el transporte de huecos y el confinamiento de electrones, mientras que el Alq3 desempeña razonablemente bien las funciones de transporte de electrones, inyección de electrones y emisión de luz. La zona de recombinación de excitones y de emisión de luz se localiza dentro del Alq3, cerca de la interfaz con el TPD. Esto se deduce del hecho de que el espectro de electroluminiscencia del dispositivo coincide con el espectro de fotoluminiscencia del Alq3.

En el caso más sencillo, como ocurre en algunos OLEDs basados en polímeros

(PLED)(Figura 1.10)[van der Holst (2010)], una sola capa debe cumplir todas las tareas necesarias. Esto sólo puede llevar a eficiencias cuánticas altas si esta única capa es capaz de inyectar y transportar huecos y electrones con la misma facilidad (sin embargo, en la mayoría de los materiales orgánicos, la movilidad de los huecos es más alta que la de los electrones). De otro modo, la zona de emisión estará situada cerca de un electrodo y los excitones sufrirán quenching (apagamiento, recombinación no radiativa).

Los dispositivos de una sola capa tienen solo una capa orgánica entre los electrodos son los dispositivos mas básicos que podemos simular como punto de partida. A pesar de su estructura simple, aún nos proporcionan información significativa sobre cómo optimizar el rendimiento de los dispositivos con estructuras más complicadas. Además, los mecanismos de inyección, transporte y recombinación del portador de carga en dispositivos de una sola capa son idénticos a los de los dispositivos de múltiples capas. Una sólida comprensión de estos mecanismos establece una buena base para la investigación en dispositivos multicapa.

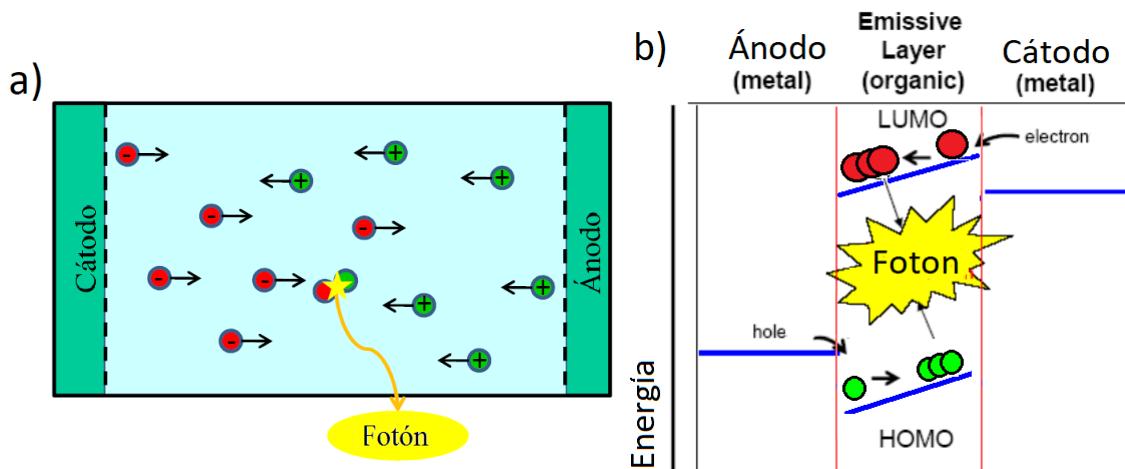


Figura 1.10: a) Principio de funcionamiento de un OLED de una capa. b) Diagrama de energía de un OLED de una capa. Los electrones (indicados por círculos rojos) se inyectan en el cátodo. Los agujeros (indicados por círculos verdes) se inyectan en el ánodo. Tanto los electrones como los agujeros se mueven hacia los electrodos opuestos. Cuando un electrón y un agujero se encuentran, se recombinan y se puede emitir un fotón.

Las alturas de las barreras de inyección de portadores en las distintas interfaces y las movilidades determinan la posición de la zona de recombinación y el rendimiento del dispositivo, afectando a los voltajes de funcionamiento y la eficiencia de la luminiscencia. La interacción entre el electrodo y la capa orgánica también tiene una influencia sustancial en las propiedades electrónicas de la interfaz, que a su vez determinan las propiedades del OLED. Un estudio de las interfaces entre las capas orgánica y metálica es por tanto de fundamental importancia para mejorar el rendimiento de los dispositivos.

A medida que ha evolucionado el estudio y desarrollo del OLED, se han propuesto

muchos prototipos con distintos tipos de construcción esperando obtener dispositivos mas eficientes y estables como se ilustra en la Figura 1.11[Ko (2011)].

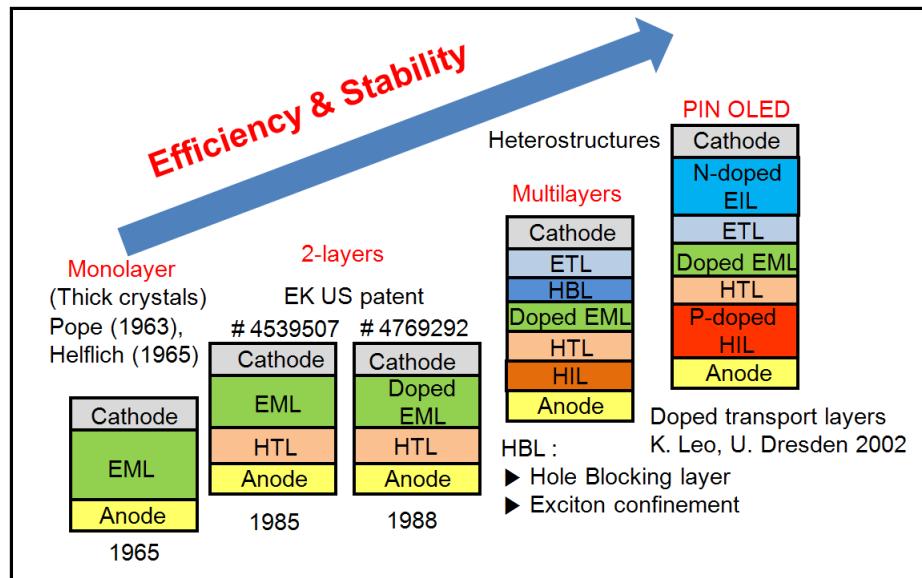


Figura 1.11: Evolución de los dispositivos OLED (HIL: capa de inyección de huecos, HTL: capa de transporte de huecos, EML: capa emisiva, HBL: capa de bloqueo de huecos, ETL: capa de transporte de electrones).

1.3 COMPARACIÓN ENTRE LED Y OLED

A parte de la evidente diferencia de materiales de fabricacion, existen otras diferencias a considerar. Como se puede observar en las Figura 1.7, el OLED tiene una capa exclusiva para la electroluminiscencia en la cual se recombinan los pares electrón-hueco (Figura 1.9), pero en cambio, en los LED inorgánicos, esta capa no existe; y la electroluminiscencia se genera en la intersección entre 2 materiales distintos (Figura 1.12)[Khanna (2014)], la existencia de estos dos materiales como mínimo es necesaria para la electroluminiscencia; ya que cada capa genera los portadores por separados y el voltaje externo provoca que se muevan en sentido contrario interactuando en la interface entre los materiales.

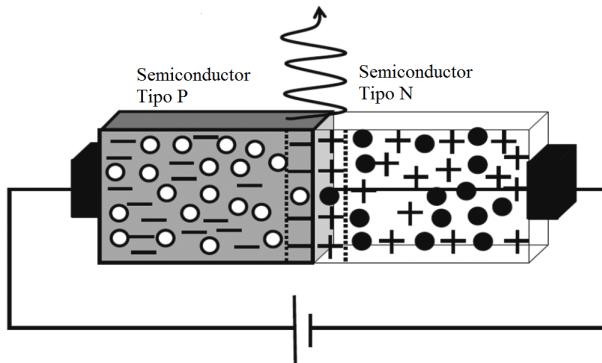


Figura 1.12: *Estructura de Led inorgánico P-N bajo funcionamiento*

Haciendo la comparación de la estructura de los OLED al LED convencional, encontramos que las capas EIL y ETL de un OLED son análogas al semiconductor tipo N de un LED; recíprocamente, las capas HIL y HTL de un OLED son análogas al semiconductor P del LED y la capa electroluminiscente del OLED representaría la zona de agotamiento del LED.

El espectro de emisión también difiere entre ambos dispositivos. Los diodos inorgánicos poseen un espectro de emisión bastante estrecho en comparación con los diodos orgánicos, cuyo espectro de emisión depende directamente del desorden energético del material luminiscente.

1.3.1 Resumen

Un resumen de las principales diferencias entre los semiconductores orgánicos e inorgánicos se presentan en la Tabla 1.2 [Khanna (2014)]

Diferencias entre OSC y SC	
Semiconductor Orgánico	Semiconductor Inorgánico
Las moléculas individuales se mantienen juntas mediante fuerzas débiles de Van der Waals (energía de enlace $\sim 10^{-3}$ - 10^{-2} eV), aunque la unión intramolecular es fuerte	Los átomos están unidos por fuertes enlaces covalentes con energía ~ 2 -4 eV.
La estructura de la banda de energía se localiza a nivel molecular.	La estructura de la banda de energía está deslocalizada en toda la estructura.
Se distinguen dos niveles de energía, localizados en las moléculas: HOMO y LUMO .	Existen dos bandas de energía deslocalizadas en toda la estructura cristalina; Estas son las bandas de valencia y conducción familiares.
Los enlaces intermoleculares débiles permiten la flexibilidad mecánica.	Tanto los semiconductores elementales como los compuestos son mecánicamente rígidos.
Movilidad del portador de carga baja $\sim 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{V-s}$.	Alta movilidad del portador ~ 1350 para electrones en Si.
Bajas conductividades eléctricas.	Altas conductividades eléctricas.
Pureza del 95%	Pureza del 99%
Es relativamente barato de sintetizar, fácil de aplicar a grandes superficies (vacío sublimado a temperaturas inferiores a 500 ° C o centrifugado a temperatura ambiente).	Tecnología compleja y costosa para la fabricación de dispositivos semiconductores inorgánicos que requieren cuartos limpios, equipos sofisticados y procesamiento a alta temperatura
Puede prepararse sobre sustratos flexibles.	No es posible hacerlo
Construcción basadas directamente en secuencias de átomos de carbono (C) e hidrógeno (H), con ocasionalmente nitrógeno (N), oxígeno (O), azufre (S) u otros átomos conectados a esta secuencia. (biodegradables)	Fabricación en base a CdSe (rojo), ZnTe y CdO (verde), ZnSe (azul), and ZnO and ZnS (UV)

Tabla 1.2: Diferencias entre Semiconductor Orgánico e Inorgánico

CAPÍTULO 2. SIMULACIÓN COMPUTACIONAL PARA OLED: MODELO DRIFT DIFFUSION

La complejidad de los dispositivos electrónicos orgánicos abarca desde lo nano hasta lo macro. En la literatura se describen varios modelos que describen el transporte de cargas, los que varían en dificultad computacional y facilidad de su implementación. La selección de un modelo apropiado para una tarea particular requiere de un buen conocimiento de los méritos relativos del método y posiblemente un poco de pragmatismo, ya que inevitablemente habrá compromisos inherentes en el modelo elegido. Una regla general es seleccionar un modelo que sea lo suficientemente detallado y preciso para capturar la física de interés. Los modelos mas utilizados en fotovoltaica orgánica son Monte Carlo, Master Equation y el modelo que se usara en la presente tesis, **Drift Diffusion** [Groves (2016)].

MODELO DRIFT DIFFUSION

El modelo Drift-Diffusion (DDM) (Difusión-Arrastre en español) es una herramienta matemática que se usa en múltiples áreas; desde hidrodinámica, hasta en la neurociencia, pasando por la materia condensada que es nuestro tema de interés. En palabras simples, el DDM se usa cuando existe diferencia de concentraciones de un objeto en espacios determinados, en presencia de un potencial, como se ilustra en la Figura 2.1.

El modelo Drift Diffusion matematicamente equivale a un set de ecuaciones diferenciales parciales acopladas no lineales (PDEs), que describen la dinámica de inyección, transporte y recombinación de portadores de carga en dispositivos orgánicos. En general, estas ecuaciones no pueden ser resueltas analíticamente.

Una ventaja que tiene el modelo drift-diffusion para describir OLEDs, es que se puede trabajar unidimensionalmente, ya que la estructura (fabricación) de estos dispositivos lo permite [Knapp et al. (2010)] [Ruhstaller et al. (2003)]. Ademas, el modelo requiere de solo leves modificaciones para simular células solares orgánicas. Para la extracción de parámetros a partir de curvas de corriente-voltaje sólo es interesante la solución en estado estacionario y no se requiere la evolución de las magnitudes físicas en el tiempo.

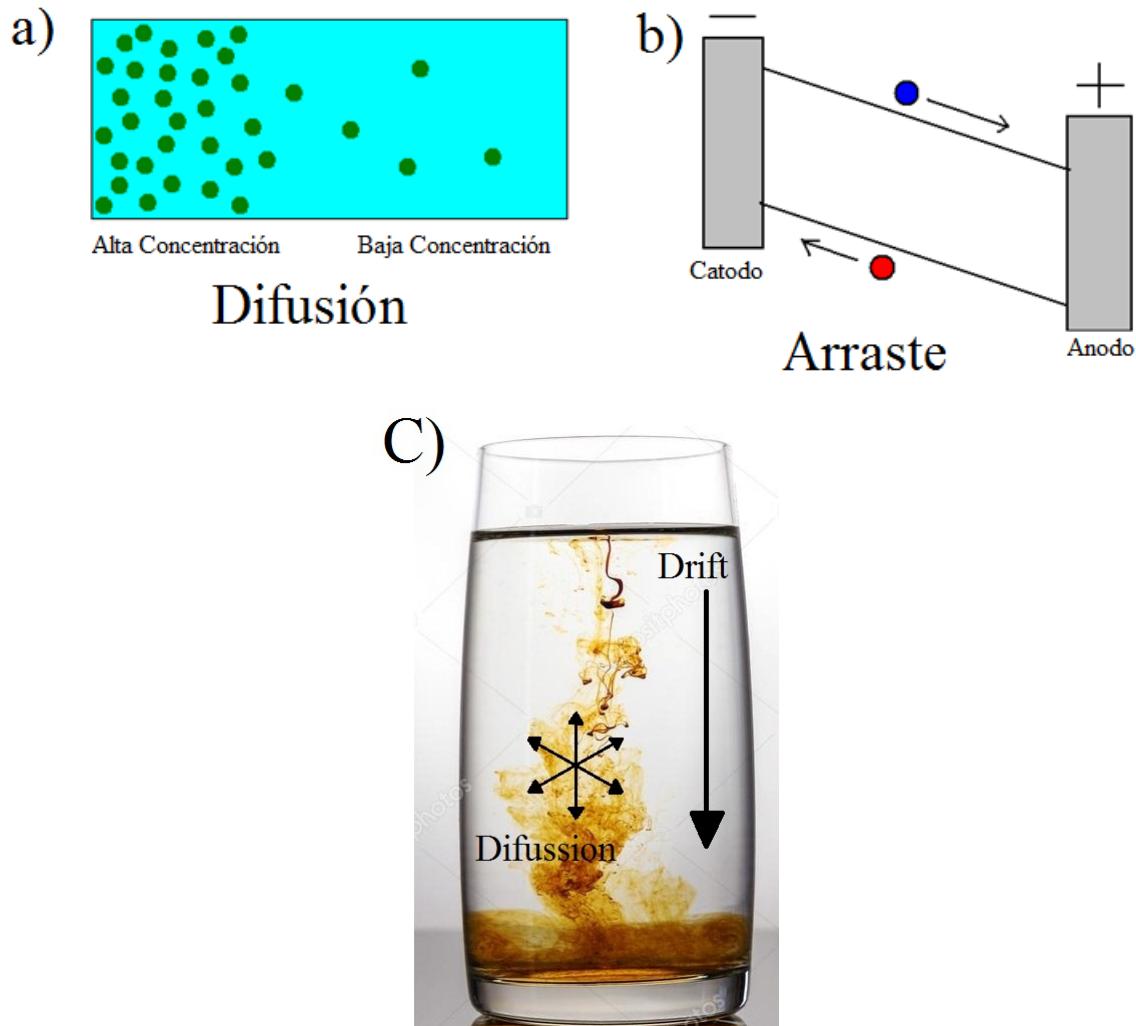


Figura 2.1: Representación gráfica de: a) Diffusion , b) Drift, c) Drift diffusion en un vaso se agua con tinta añadida. Drift: La tinta caerá hasta el fondo del vaso por la presencia del potencial gravitatorio. Diffusion: La tinta al entrar en contacto con el agua, por diferencia de concentraciones intentará difundirse en todo el vaso.

El modelo Drift Diffusion resuelve simultaneamente las ecuaciones de Poisson, Corriente y Continuidad para una estructura con condiciones iniciales y de contorno determinadas, para el presente estudio, un dispositivo OLED, obteniendo como resultados importantes densidades de portadores de carga para cada voltaje suministrado y corriente para cada voltaje suministrado.

2.0.1 Ecuación de Poisson:

La ecuación de Poisson (2.1) permite calcular el potencial eléctrico en función de la distribución de los portadores de carga

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla \psi) = q(n_f + n_t - p_f - p_t) \quad (2.1)$$

donde ψ es el potencial eléctrico, "n" y "p" son las densidades de electrones y huecos respectivamente, "q" es la carga elemental y ϵ es el producto entre la permitividad del vacío y la permitividad relativa del material orgánico. Las densidades de portadores $n = n_f + n_t$ y $p = p_f + p_t$ consisten en portadores de carga móviles n_f y p_f así como cargas atrapadas n_t y p_t .

2.0.2 Ecuaciones de corriente:

La ecuación de corriente para los huecos esta dada por

$$J_p = \underbrace{-qp_f \mu_p \nabla \psi}_{Drift} - \underbrace{qD_p \nabla p_f}_{Diffusion} \quad (2.2)$$

La ecuación de corriente de portadores consta de una parte que representa la difusión, y la otra por el arrastre ya mencionadas al inicio del capítulo. La movilidad μ_p depende del campo, temperatura y densidad, por lo tanto, depende de la posición. El coeficiente de difusión D_p está dado por la relación de Einstein generalizada.

La ecuación para electrones es similar:

$$J_n = -qn_f \mu_n \nabla \psi + qD_n \nabla n_f \quad (2.3)$$

La densidad de corriente total en el dispositivo es la suma de la corriente de electrones y agujeros $J = J_n + J_p$.

2.0.3 Ecuaciones de continuidad:

La ecuación de continuidad relaciona la diferencia de densidad de corriente con la tasa de recombinación/generación dentro del dispositivo.

$$\nabla \cdot J_n - qR(n_f, p_f) = q \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)$$

$$\nabla \cdot J_p + qR(n_f, p_f) = q \left(\frac{\partial p}{\partial t} \right)$$

donde $R(n_f, p_f)$ corresponde a la tasa de recombinación bimolecular de Langevin. Estas ecuaciones tienen en cuenta el movimiento y la recombinación de los portadores.

Nos interesa describir el estado estacionario del dispositivo, por lo que la derivada temporal se desprecia, dando:

$$\nabla \cdot J_n = qR(n_f, p_f) \quad (2.4)$$

$$\nabla \cdot J_p = -qR(n_f, p_f) \quad (2.5)$$

2.1 MÉTODO NUMÉRICO

La simulación del dispositivo OLED implica resolver las ecuaciones diferenciales parciales (2.1-2.5) considerando las consecuencias del desorden, distribución Gaussiana de estados electrónicos y movilidad de los dispositivos semiconductores orgánicos mencionados en las secciones (1.1.3.2) y (1.1.3.3). Todas las ecuaciones involucradas conducen a un sistema de ecuaciones diferenciales parciales acopladas.

2.1.1 Discretización del medio

Para resolver las ecuaciones numéricamente, el dispositivo se divide en N puntos espaciales formando una malla. Los volúmenes finitos asociados se ilustran en la Figura 2.2.

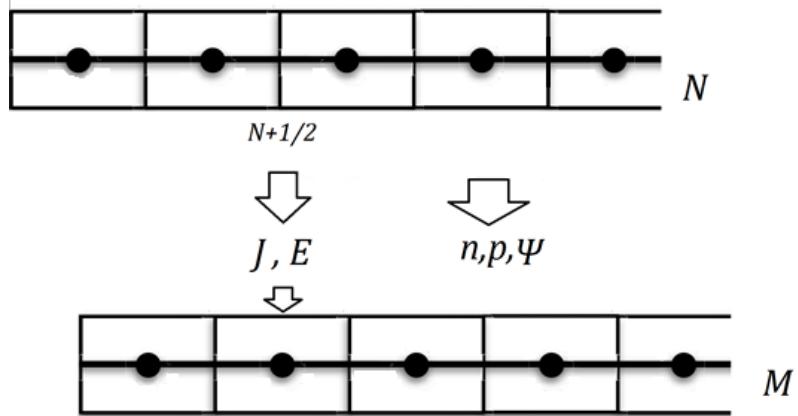


Figura 2.2: Esquema de discretización de parámetros.

Los puntos de la malla se representan por x_i para $i = 1, 2, \dots, N$, donde $x_1=0$ y $x_N=L$. Las ecuaciones discretizadas para los tres grados de libertad se resuelven para el potencial ψ , las densidades de electrones y agujeros n y p en cada punto de la malla en el dominio . En los nodos de la malla se evalúan las densidades y el potencial mientras que en el borde ($i + \frac{1}{2}$) cada volumen finito se evalúa la corriente eléctrica y el campo.

2.2 MÉTODOS DE RESOLUCIÓN

Al reformular las Ecs (2.1) (2.4) (2.5) y organizando todos los términos en el mismo lado, se obtiene un sistema de ecuaciones de la forma:

$$F(u) = 0 \quad (2.6)$$

con $u = (\psi, n, p)$. El vector de residuos (ó de forzamiento) $F = (F1, F2, F3)$ consiste en términos que proviene de la discretización de la ecuación de Poisson (F1), de las ecuaciones de continuidad para los electrones (F2) y de las ecuaciones de continuidad para los huecos (F3). El objetivo de la aproximación numérica es satisfacer la Ec 2.6 con la mayor precisión posible (Ver detalles en el Anexo).

Explícitamente, la variables u se representan vectorialmente como:

$$u = \begin{pmatrix} \psi \\ n \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N]^T \\ [n_1, n_2, \dots, n_N]^T \\ [p_1, p_2, \dots, p_N]^T \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

Para resolver la ecuación 2.6, según el modelo Drift Difussion, existen 2 estrategias principales:

el método de Newton y el método de Scharfetter Gummel.

2.2.1 Método de Newton

Este método resuelve numéricamente la ecuación 2.6 de forma acoplada [Knapp et al. (2010)]. Se linealiza el sistema de ecuaciones y se resuelve simultáneamente. Durante una iteración, se mantiene el acoplamiento entre puntos de rejilla adyacentes y entre las tres ecuaciones.

El sistema lineal de ecuaciones resultante requiere la determinación de la matriz jacobiana lo que eventualmente puede ser tedioso. Y para el caso de semiconductores orgánicos conduce a una forma más compleja de la matriz jacobiana. Durante una iteración, se conserva el acoplamiento entre los puntos de cuadrícula adyacentes y entre las tres ecuaciones. Como otros métodos iterativos, el método de Newton es sensible a la suposición inicial para una correcta convergencia. Cerca de la solución, el algoritmo de Newton muestra una convergencia cuadrática (en iteraciones) haciéndola un método de rápida resolución.

2.2.2 Método de Scharfetter Gummel

El método de Scharfetter Gummel [Knapp et al. (2010)], o simplemente llamado método de Gummel, resuelve el problema de forma secuencial y desacoplada. Básicamente este método comienza resolviendo la ecuación de Poisson en todos puntos de la red y luego resuelve la ecuación de continuidad de los portadores. Durante la iteración se conserva el acoplamiento entre los puntos de la red vecinos a través de la actualización de las variables ψ , n y p . El método de resolución de las ecuaciones será por el Método LU.

Aunque el método de Gummel es más lento que el método de Newton, su planteamiento del problema y de las ecuaciones es mucho más sencillo, aparte de tener menor carga computacional. La mayoría de la literatura existente sobre la simulación de semiconductores la utilizan.

2.3 DISCRETIZACIÓN DE LAS ECUACIONES

Todas las ecuaciones están discreteadas por método de diferencias finitas progresiva según el procedimiento descrito en Anexo.

2.3.1 Ecuación de Poisson discretizada

Al discretizar la ecuación de Poisson (Ec. 2.1) obtenemos la siguiente expresión

$$\frac{(\epsilon/q)}{h^2} \psi_{i+1} - \left[\frac{2\epsilon/q}{h^2} + p_i + n_i \right] \psi_i + \frac{\epsilon/q}{h^2} \psi_{i-1} = -[p_i - n_i] - \psi_i [p_i + n_i] \quad (2.8)$$

donde el sub índice i indica la posición en la malla. La ecuación 2.8 se puede escribir como una expresión lineal de la forma

$$a_i \psi_{i+1} - b_i \psi_i + c_i \psi_{i-1} = F_i, \quad (2.9)$$

Como se detalla en Anexo. Escrita de esta manera, la ecuación 2.9 se resuelve usando LU.

2.3.2 Ecuaciones de Corriente discretizadas

La discretización de las ecuaciones de corriente (2.3) y (2.2) son:

Para portadores negativos

$$J_{(i+1/2)}^n = \frac{q\mu_{(i+1/2)}^n V_t g_3^n (i+1/2)}{\Delta} \left(n_i B \left(\frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{V_t g_3} \right) - n_{i+1} B \left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{V_t g_3} \right) \right) \quad (2.10)$$

y

$$J_{(i-1/2)}^n = \frac{q\mu_{(i-1/2)}^n V_t g_3^n (i-1/2)}{\Delta} \left(n_{i-1} B \left(\frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{V_t g_3} \right) - n_i B \left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{V_t g_3} \right) \right) \quad (2.11)$$

Para la ecuación de corriente de huecos tenemos

$$J_{(i+1/2)}^p = \frac{q\mu_{(i+1/2)}^p V_t g_3^n(i+1/2)}{\Delta} \left(p_i B\left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{V_t g_3^n(i+1/2)}\right) - p_{i+1} B\left(\frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{V_t g_3^n(i+1/2)}\right) \right) \quad (2.12)$$

y

$$J_{(i-1/2)}^p = \frac{q\mu_{(i-1/2)}^p V_t g_3^n(i-1/2)}{\Delta} \left(p_{i-1} B\left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{V_t g_3^n(i-1/2)}\right) - p_i B\left(\frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{V_t g_3^n(i-1/2)}\right) \right) \quad (2.13)$$

donde $V_t = \frac{k_b T}{q}$ y $B(x) = \frac{x}{e^x - 1}$ es la función de Bernoulli. La corriente total queda dada por :

$$J_{Total} = J^n + J^p = \frac{J_{(i+1/2)}^n + J_{(i-1/2)}^n}{2} + \frac{J_{(i+1/2)}^p + J_{(i-1/2)}^p}{2} \quad (2.14)$$

2.3.3 Ecuación de Continuidad Discretizada

La discretización de la ecuación de continuidad (Ec. 2.4) se puede escribir como,

$$\nabla \cdot J^n = qR(n, p) = \frac{1}{\Delta} (J_{(i+1/2)}^n - J_{(i-1/2)}^n) \quad (2.15)$$

Reemplazando Ec 2.15 en las expresiones de densidad de corriente dadas en la sección anterior, se obtiene para portadores negativos que

$$\begin{aligned} \nabla \cdot J^n &= \frac{-q\mu_{(i+1/2)}^n V_t g_3^n(i+1/2)}{\Delta^2} B\left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{V_t g_3}\right) n_{i+1} + \\ &\quad \left[\frac{q\mu_{(i+1/2)}^n V_t g_3^n(i+1/2)}{\Delta^2} B\left(\frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{V_t g_3}\right) + \frac{q\mu_{(i-1/2)}^n V_t g_3^n(i-1/2)}{\Delta^2} B\left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{V_t g_3}\right) \right] n_i \\ &\quad - \frac{q\mu_{(i-1/2)}^n V_t g_3^n(i-1/2)}{\Delta^2} B\left(\frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{V_t g_3}\right) n_{i-1} = qR(n, p) \end{aligned} \quad (2.16)$$

Para portadores positivos, la discretización de la ecuación de continuidad (Ec. 2.5) esta dada por

$$\nabla \cdot J^p = -qR(n, p) = \frac{1}{\Delta} (J_{(i+1/2)}^p - J_{(i-1/2)}^p), \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned}\nabla \cdot J^p = & \frac{-q\mu_{(i+1/2)}^p V_t g_3^p(i+1/2)}{\Delta^2} B\left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{V_t g_3^p(i+1/2)}\right) p_{i+1} \\ & + \left(\frac{q\mu_{(i-1/2)}^p V_t g_3^p(i-1/2)}{\Delta^2} B\left(\frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{V_t g_3^p(i-1/2)}\right) + \frac{q\mu_{(i+1/2)}^p V_t g_3^p(i+1/2)}{\Delta^2} B\left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{V_t g_3^p(i+1/2)}\right) \right) p_i \\ & - \frac{q\mu_{(i-1/2)}^p V_t g_3^p(i-1/2)}{\Delta^2} B\left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{V_t g_3^p(i-1/2)}\right) p_{i-1} = -qR(n, p) \quad (2.18)\end{aligned}$$

2.4 CONDICIONES INICIALES Y DE BORDE

Típicamente un dispositivo vacío sin soporte de carga se utiliza como punto de partida para una simulación. Sin embargo, esto no corresponde a la situación física y se requiere una ejecución de simulación adicional antes de la simulación de interés para obtener un punto de partida razonable en ausencia de potencial externo. Como punto de partida de la iteración, utilizamos una condición de equilibrio donde no se aplica campo externo. Cualquier material o dispositivo en equilibrio termodinámico tendrá un nivel de Fermi constante en todo el dispositivo [Brüttig & Adachi (2005)]. Así las corrientes J_n y J_p de la Ec. (2.3) (2.2) son cero. Además es necesario especificar las densidades (p_0, n_0, p_N, n_N) y el potencial (ψ_0, ψ_N) del dispositivo en ambos contactos, la cual el contacto en $x = 0$, sera definido como ánodo (inyecta huecos), y el contacto en $x = L$ sera el cátodo (inyecta electrones) y donde L es el grosor del dispositivo. La caída potencial a través del semiconductor en ausencia de campos externos es por definición igual a potencial built-in (V_{bi}).

En caso de que no haya desorden o en ausencia de potencial, se usan las estadísticas de Boltzmann y $g_3(n_f, T) = 1$ en todas partes en el dispositivo [Knapp et al. (2010)]. La introducción de estas propiedades conduce a una ecuación para electrones similar para agujeros de la forma:

$$\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = \frac{V_t}{n_f(x)} \frac{\partial n_f(x)}{\partial x} \quad (2.19)$$

La Ec.(2.19) describe la relación entre el potencial ψ y la concentración de n en el equilibrio. Entonces, la concentración de portador esta dado por:

$$n(x) = n_r \cdot \exp\left(\frac{\psi(x)}{V_t}\right) \quad (2.20)$$

donde n_r es la concentración de electrones en condiciones de borde y el potencial eléctrico se define como cero en ese punto. Debido a la condición de equilibrio, la ecuaciones de continuidad

(2.4)(2.5) asume que no hay recombinación. La ecuación de Poisson (2.1) permanece válida en su forma habitual en equilibrio termodinámico. La sustitución de la ec. (2.20) en la ec. (2.8) lleva a la siguiente ecuación que describe la condición de equilibrio en el caso de un material sin portadores atrapados:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{q}{\epsilon} \left[p_r \exp\left(\frac{-\psi(x)}{V_t}\right) - n_r \exp\left(\frac{\psi(x)}{V_t}\right) \right] = 0 \quad (2.21)$$

según la ecuación 2.20, tenemos que

$$n(0) = n_r \exp\left(\frac{-V_{bi}}{V_t}\right), \quad n(L) = n_r, \quad p(0) = p_r, \quad p(L) = p_r \exp\left(\frac{-V_{bi}}{V_t}\right) \quad (2.22)$$

Las condiciones de Borde de Dirichlet para el potencial [Rogel-Salazar et al. (2009)] [(Knapp et al., 2010)] [(Koster et al., 2005)] están dadas por:

$$\psi_0 = \frac{(V_{app} - V_{bi})}{2} \quad \psi_L = \frac{-(V_{app} - V_{bi})}{2} \quad (2.23)$$

donde V_{app} es el voltaje aplicado al dispositivo. Escrito de otra manera tenemos que

$$\psi(L) - \psi(0) = V_{bi} - V_{app} \quad (2.24)$$

En términos de la ecuación 2.6, el vector inicial $u(0)$ está dado por [Rogel-Salazar et al. (2009)]

$$u(0) = \begin{pmatrix} \left[\frac{-e(V - V_{bi})}{2kT}, \dots, \frac{e(V - V_{bi})}{2kT} \left(x_i \frac{1}{L} \right), \dots, \frac{e(V - V_{bi})}{2kT} \right]^T \\ [n_1, 0, \dots, 0, n_N]^T \\ [p_1, 0, \dots, 0, p_N]^T \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

donde

$$\frac{-L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}$$

Para extender este procedimiento al caso de un semiconductor orgánico desordenado ($g_3(n_f, T) \geq 1$) debemos asumir un modelo Gaussiano de densidades de estados (DOS) moleculares, obteniendo una relación de la densidad del portador de carga n_f de la forma [Knapp et al. (2010)]

$$n_f(x) = N_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2}\sigma} \exp \left[- \left(\frac{E + E_{offset}}{\sqrt{2}\sigma} \right)^2 \right] \frac{1}{1 + \exp \left[- \frac{q}{kT} \{E + \psi(x) - \phi_e(x)\} \right]} dE \quad (2.26)$$

donde N_0 denota la densidad del sitio del DOS gaussiano. La energía E_{offset} describe el desplazamiento con respecto al nivel de Fermi que se encuentra entre el HOMO y el LUMO. De nuevo, el nivel de Fermi es constante en todo el dispositivo en equilibrio.

La ecuación de Poisson con las expresiones de la forma de la ecuación 2.26 para el electrón y la densidad del agujero se resuelve numéricamente. El efecto de las trampas también puede tomarse en consideración al contabilizar las cargas atrapados en la ecuación de Poisson. Es notable que en ambos casos iniciales, el estado de equilibrio no dependa de la movilidad.

2.4.1 Función de mejora g_3

Usando la ecuación 2.26 en la ecuación 1.14, la ecuación g_3 queda dada por [Van Mensfoort & Coehoorn (2008)]:

$$g_3(n, T) = \frac{n}{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{N_t}{\sqrt{2}\sigma} \exp \left[- \left(\frac{E + E_{offset}}{\sqrt{2}\sigma} \right)^2 \right] \cdot \frac{\exp \left[- \frac{q}{kT} \{E + \psi(x) - \phi_e(x)\} \right]}{\left[1 + \exp \left[- \frac{q}{kT} \{E + \psi(x) - \phi_e(x)\} \right] \right]^2} dE} \quad (2.27)$$

de forma análoga, se define la función de mejora para huecos.

2.5 ALGORITMO DRIFT DIFUSION EN MATLAB

El programa que resuelve la ecuación 2.6 según el método de Gummel tiene 4 secciones secuenciales, como se ilustra en la Figura 2.3): Ingreso de parámetros iniciales, Estado inicial, condición de Equilibrio y condición fuera de Equilibrio.

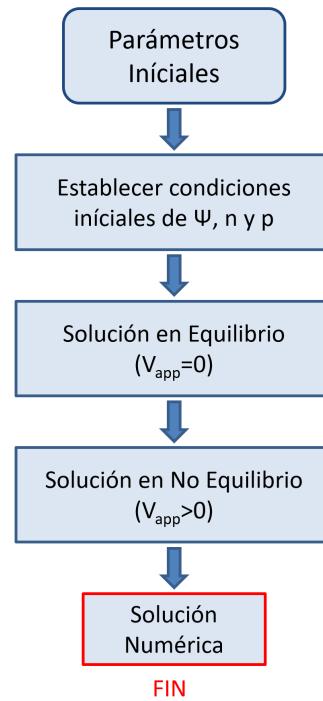


Figura 2.3: *Diagrama de Flujo del programa.*

2.5.1 Parámetros iniciales

Esta sección da comienzo al programa. Se definen e ingresan las constantes fundamentales y las constantes del material; tales como la carga del electrón, constante de Boltzmann, permitividad del vacío y del material, temperatura, Homo-Lumo, V_{bi} y parámetros relacionados a la malla (Nº de puntos y largo del dispositivo). Una vez definido las constantes fundamentales y del material, se procede a calcular el estado inicial de las variables.

2.5.2 Estado Inicial

Como se mencionó en la Sección (2.2.2), antes de encontrar un estado estacionario a $V_{app} = 0$, se debe realizar una iteración previa que permita encontrar la solución de la ecuación de Poisson considerando las condiciones iniciales (Sec. (2.4) Ec.(2.25)) para obtener un potencial inicial ψ^0 a considerar para los pasos posteriores. Luego se calculan las densidades iniciales n^0 y p^0 de los portadores de carga con la ecuación 2.26.

2.5.3 Estado en Equilibrio ($V_{app} = 0$)

El objetivo de esta sección es calcular y determinar el potencial y densidad de portadores de carga dentro de todo el dispositivo en estado estacionario real, es decir, con un voltaje aplicado de $V_{app} = 0$. Conocido los valores ψ^0 , n^0 y p^0 , se resuelve la ecuación de Poisson obteniendo la primera distribución de densidad de portadores.

Con las nuevas densidades de portadores se re-calcula el potencial eléctrico¹ utilizando Poisson.

El test de convergencia para determinar si los parámetros encontrados corresponden al estado estacionario es comparar el potencial⁰ anterior con el potencial¹ actual, si la diferencia es mayor a la tolerancia elegida, se vuelve a realizar el ciclo.

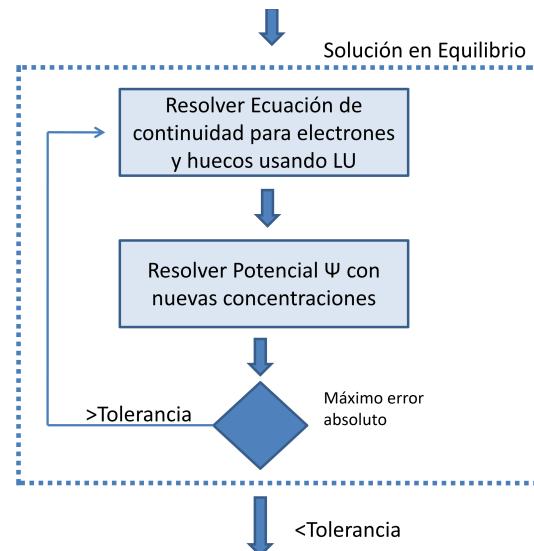


Figura 2.4: Diagrama de Flujo: Estado en equilibrio.

2.5.4 Estado fuera del Equilibrio ($V_{app} > 0$)

El objetivo de esta sección es calcular la corriente total que fluye a través del dispositivo a distintos voltajes aplicados.

Se comienza aplicando (sumando) un ΔV a los cátodos del material para simular el régimen de trabajo del OLED. Luego se realizan 5 pasos:

1. Se calcula el campo Eléctrico.
2. Se calcula la movilidad para los electrones y huecos en todo el espacio según el modelo Gaussiano extendido.
3. Se calculan las densidades de portadores en el dispositivo tomando en cuenta la nueva movilidad.
4. Se calcula el nuevo potencial.
5. Se compara el nuevo potencial con el potencial anterior, si la diferencia es mayor a la tolerancia elegida , se vuelve al paso 1. Si es menor, se suma un ΔV al V_{app} y se repiten los pasos mencionados las veces que sean necesarias hasta lograr convergencia.

Una vez convergido ψ , n y p , se calcula la densidad de corriente y se repite los pasos para un nuevo voltaje (Figura 2.5).

2.5.5 Resultados (Outputs)

Cuando el voltaje aplicado (V_{app}) es igual al voltaje máximo ingresado en input(V_{max}), el programa es capaz de entregar las siguientes curvas:

1. Corriente vs Voltaje (I-V)
2. Potencial vs posición.
3. Recombinación vs posición.
4. Recombinación vs Voltaje.
5. Movilidad vs posición.
6. Movilidad vs Voltaje.
7. Campo Eléctrico vs posición.

8. Campo Eléctrico vs Voltaje.
9. Densidad de n vs posición.
10. Densidad de p vs posición.
11. Densidad total de portadores vs posición.

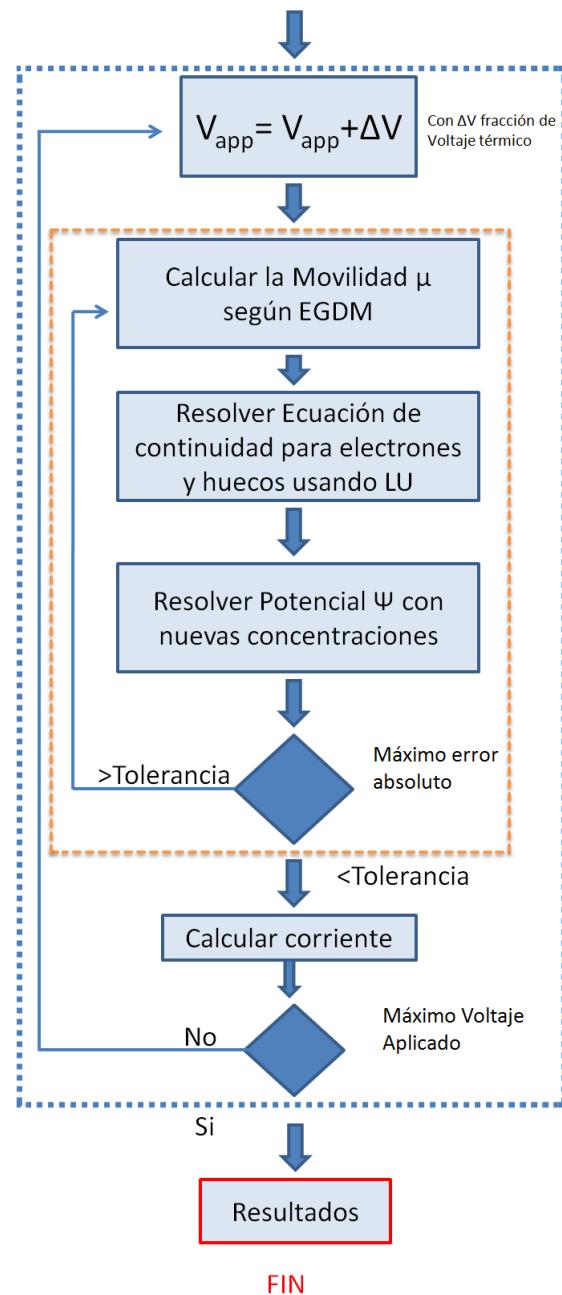


Figura 2.5: Diagrama de Flujo: Estado no en equilibrio.

2.6 DESAFÍOS

Trabajar numéricamente con el modelo Drift diffusion trae muchos desafíos debido que trabaja con tres ecuaciones diferenciales no lineales acopladas, lo que hace al programa sensible a los parámetros iniciales. La sensibilidad del programa se ve aun mas comprometida al modelar un semiconductor orgánico por su naturaleza energética desordenada. La movilidad se añade como otro parámetro no lineal acoplado a las tres ecuaciones anteriores, dificultando la convergencia del algoritmo. El término agregado a la difusión incrementa considerablemente la no linealidad del problema y la sensibilidad haciendo compleja la convergencia del algoritmo, por lo que se omitió la contribución de esta función en el algoritmo. Una elección correcta de los parámetros es de suma importancia para obtener una solución convergida.

CAPÍTULO 3. SIMULACIÓN NUMÉRICA

El modelo Drift Diffusion es una gran herramienta que funciona perfectamente cuando las ecuaciones asociadas son simples y lineales, como por ejemplo el caso de un LED inorgánico.

3.1 SIMULACIÓN LED INORGÁNICO

La simulación de un LED inorgánico con el modelo drift diffusion resulta ser mas sencilla que la simulación de un LED orgánico principalmente por sus condiciones de iniciales, ecuaciones “lineales”, movilidad constante e “Inexistencia” de desorden energético. Por el masivo uso comercial del LED inorgánico, este dispositivo ya está sumamente estudiado para alcanzar grandes porcentajes de eficiencia y procesos eficientes de fabricación.

3.1.1 LED Inorgánico

La estructura del dispositivo simulado está ilustrado por la Figura 3.1, donde las características están dadas en Anexo.

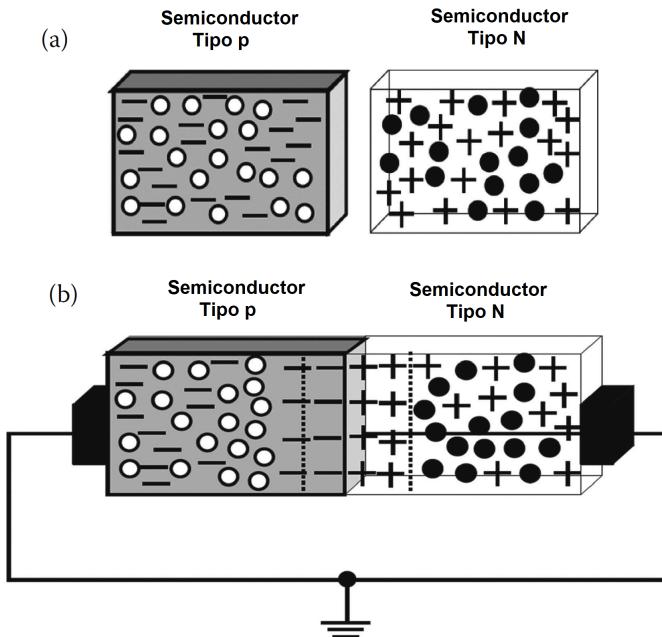


Figura 3.1: Esquema de las capas del dispositivo Inorgánico. Adaptación de [Khanna (2014)].

Establecer las condiciones iniciales del semiconductor es sencillo, a la malla espacial se le asigna la concentración de portadores mayoritarios como si fueran 2 dispositivos distintos separados (Figura 3.1a), posteriormente se itera como se ilustra en la Figura 2.4 obteniendo la densidad de portadores y potencial en equilibrio (Figura 3.1b).

3.1.2 Recombinación y eficiencia del LED inorgánico

A partir de la ecuación 1.16 y las densidades estacionarias de huecos y electrones, obtuvimos el perfil de recombinación del dispositivo que se muestra en la Figura 3.2.

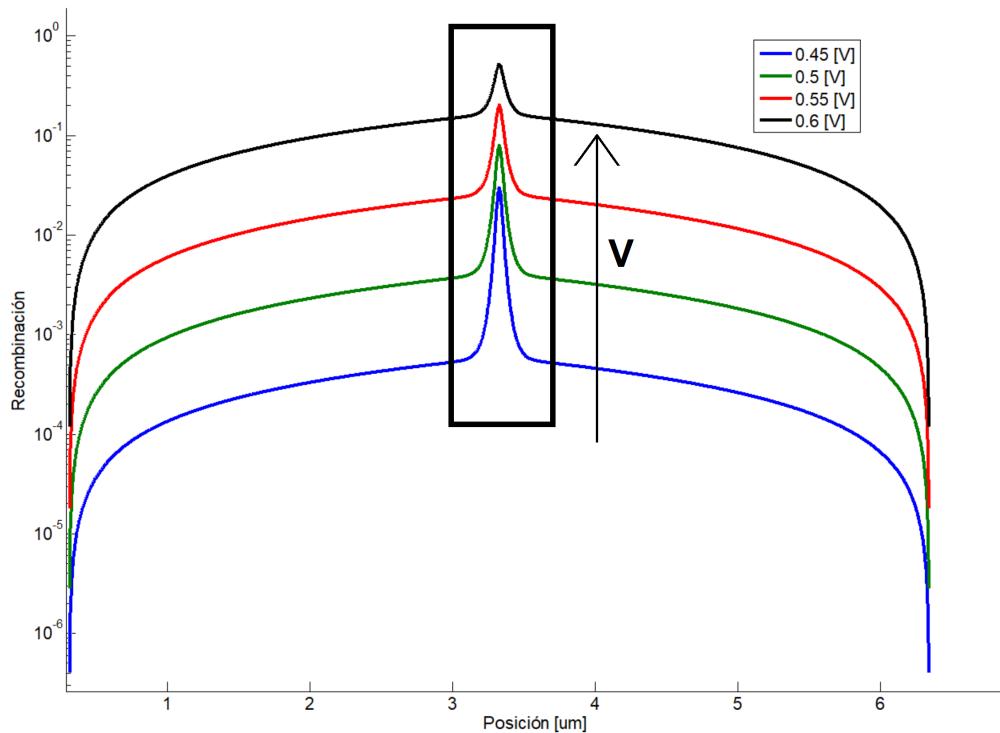


Figura 3.2: Perfil de recombinación para distintos voltajes de 0.3 a 1.2 [V] de un LED inorgánico

La recombinación en un LED inorgánico se concentra mayoritariamente en la “zona de agotamiento”, demarcada con el cuadro negro en la Figura 3.2. En la zona de agotamiento es la interfase donde se encuentran los huecos y electrones generando recombinación. usando la ecuación 1.19 se calcula la eficiencia de recombinación dada por la tabla 3.4

Voltaje [V]	Eficiencia (%)
0.45	24.75
0.5	22.98
0.55	17.76
0.6	15.48

Tabla 3.1: *Eficiencia de recombinación del LED inorgánico en función del Voltaje aplicado.*

La Eficiencia de recombinación de un LED homo-unión PN puede variar de 10 a 60% [Khanna (2014)] dependiendo de los materiales usados. Para mejorar la eficiencia, los LEDs se construyen con múltiples capas (hetero-uniones) permitiendo crear “trampas” de electrones y huecos en un punto específico del dispositivo, facilitando la recombinación.

3.1.3 Implementación al LED Orgánico

Las principales modificaciones del programa que es capaz de simular un LED inorgánico para que simule un OLED esta ilustrado en la Tabla 3.2.

Característica	Inorgánico	Orgánico
Movilidad	“Constante”	No lineal definido por el EGDM
V_{bi}	Definido por las concentraciones de portadores mayoritarios	Definido por las energías de Fermi de los electrodos
Recombinación	Definido por Shockley-Read-Hall	Definido por la tasa de recombinación de Langevin
Inyección de Portadores	Se puede considerar ideales	Existen barreras energéticas entre el material emisor y el electrodo

Tabla 3.2: Principales diferencias entre programa simulador de LED y OLED.

3.2 VALIDACIÓN DEL PROGRAMA

La validación del programa se realizó por comparación con datos experimentales y parámetros expuestos en el trabajo de Van Mensfoort et al. (2008), el cual consistió en la fabricación de dispositivos OLED del tipo sándwich de transporte único de huecos. Este fue fabricado con una capa conductora de huecos de PEDOT:PSS de 100 nm de espesor depositado bajo condiciones de habitación ultra-limpia por revestimiento de rotación sobre sustratos de vidrio ya lavadas estampadas con óxido de indio y estaño (ITO). Después del secado, el sustrato de PEDOT:PSS cubierto se calienta a 200°C durante 10 min para evaporar el solvente acuoso. Posteriormente, la capa emisora de luz “LEP” a base de polímero de polifluoreno se deposita

mediante revestimiento por rotación (spin coating) a partir de una solución de tolueno, resultando en grosores de la capa LEP en el intervalo de 60 a 125 nm.

Como se muestra en la Figura 3.3, la estructura del dispositivo es

$\langle \text{Vidrio} \mid \text{ITO} \mid \text{PEDOT : PSS} \mid \text{LEP} \mid \text{Pd} \rangle$

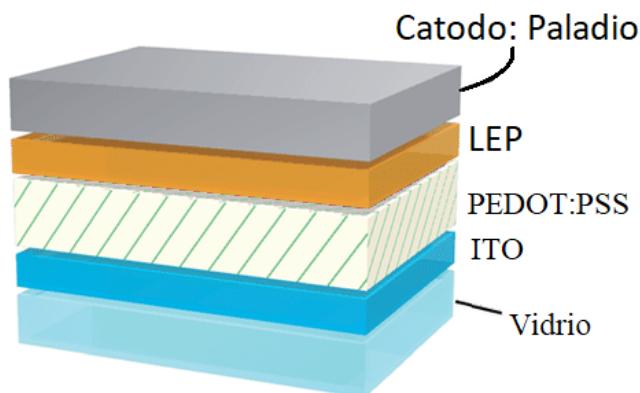


Figura 3.3: *Esquema de las capas del dispositivo.*

3.2.1 Descripción de los Materiales

3.2.1.1 PEDOT:PSS

El poly[3,4-ethylene-dioxythiophene]:poly[styrenesulphonic acid] (Acronimo de PEDOT:PSS) [Sun et al. (2015)], es un material semiconductor orgánico tipo polímero fabricado por BAYTRON®. Es un material ampliamente utilizado para el transporte de huecos (HT) hasta la capa emisora de luz “LEP” (light-emitting polymer) por su conveniente nivel de Fermi y alta movilidad. En la actualidad se buscan mejoras para este con el fin de aumentar su conductividad y transparencia, lo que permite reemplazar el ITO y disminuir la presencia toxica de este material y reducir la dependencia de la industria tecnológica de elementos difíciles de extraer como el indio. [Silva et al. (2008)].

3.2.1.2 LEP (light-emitting polymer)

El LEP utilizado fue un polímero de emisión azul de la serie Lumation Blue, suministrado por Sumation Co., Ltd. El polímero consiste principalmente en unidades de fluoreno, con unidades de transporte de huecos copolimerizados (HT) que facilitan la inyección de huecos desde el ánodo.

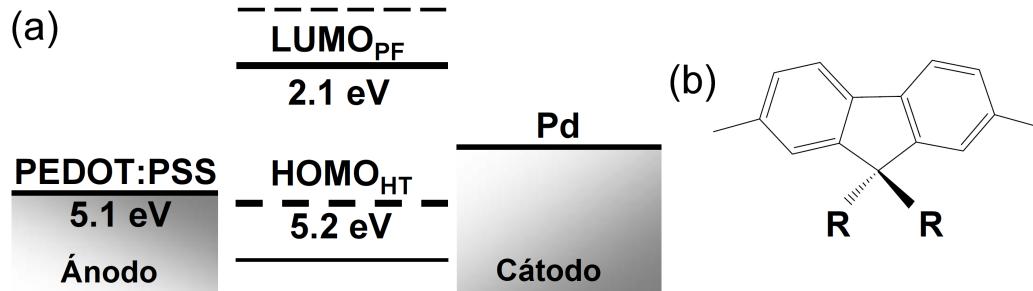


Figura 3.4: (a) Representación esquemática de los niveles de energía del dispositivo estudiado, que indican los niveles de HOMO y LUMO de las unidades HT del polímero (línea discontinua) y de las unidades PF (sólido), y los niveles de Fermi del PEDOT: PSS y el electrodo de paladio. Todas las energías se dan con respecto al nivel de vacío. (b) Estructura química esquemática de las unidades de monómero de fluoreno, que se copolimerizan con unidades de HT para formar el polímero emisor de luz utilizado. Adaptación de referencia [Van Mensfoort et al. (2008)]

El primer uso comercial de estos materiales los realizó Philips en 2005 para crear la primera pantalla de televisor OLED de 13" full color (Figura 3.5), mediante una fabricación por impresión [Van der Vaart et al. (2005)]. La pantalla consiste en tres matrices de OLED RGB para formar pixeles blancos. (Figura 3.6)



Figura 3.5: Pantalla OLED de 13" fabricada por Philips

En esta tesis trabajamos con PEDOT:PSS como medio de transporte de huecos y un LEP basado en polifluoreno ("PF").

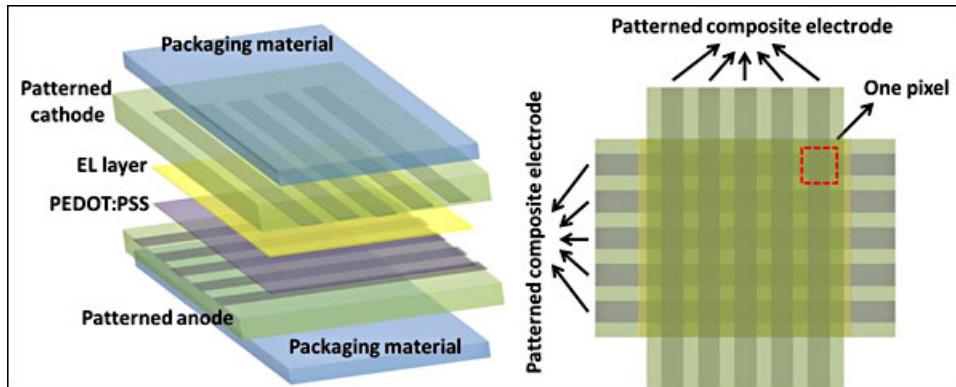


Figura 3.6: Pantalla matricial OLED para pantallas RGB

3.2.2 Comparación de datos

Utilizando el programa en MATLAB con los parámetros ¹ obtenidos en el trabajo de Van Mensfoort et al. (2008) presentados en la Tabla 5 , obtuvimos curvas J(V) numericas para tres grosores del LEP (67, 98 y 122 [nm]). La Figura 3.7 muestra que nuestros resultados coinciden satisfactoriamente con los resultados experimentales ²

Parametro	Valor
σ_p [eV]	0.13
$N_{t,p}$ [$10^{26} m^{-3}$]	6
V_{bi} [V]	1.62
ϵ_r	3.2
$\mu_{0,p,EGDM}^*$ [$10^{-7} m^2 V^{-1} s^{-1}$]	1.4
C_p	0.39
σ_n [eV]	0.07
$N_{t,n}$ [$10^{27} m^{-3}$]	1
$\mu_{0,n,EGDM}^*$ [$10^{-6} m^2 V^{-1} s^{-1}$]	8.0
C_n	0.34
T [K]	295
$P_{(0)}$ [$10^{26} m^{-3}$]	1.8
$N_{(0)}$ [$10^{14} m^{-3}$]	1.4

Tabla 3.3: Parámetros del modelo que describen de manera óptima las curvas experimentales J(V) de la Figura 3.7.

¹Parámetros obtenidos por ser los que mejor se ajustan a la curva J(V) para el dispositivo de 122nm

²Datos experimentales extraídos con el programa WebPlotDigitizer de la Ref [Van Mensfoort et al. (2008)]

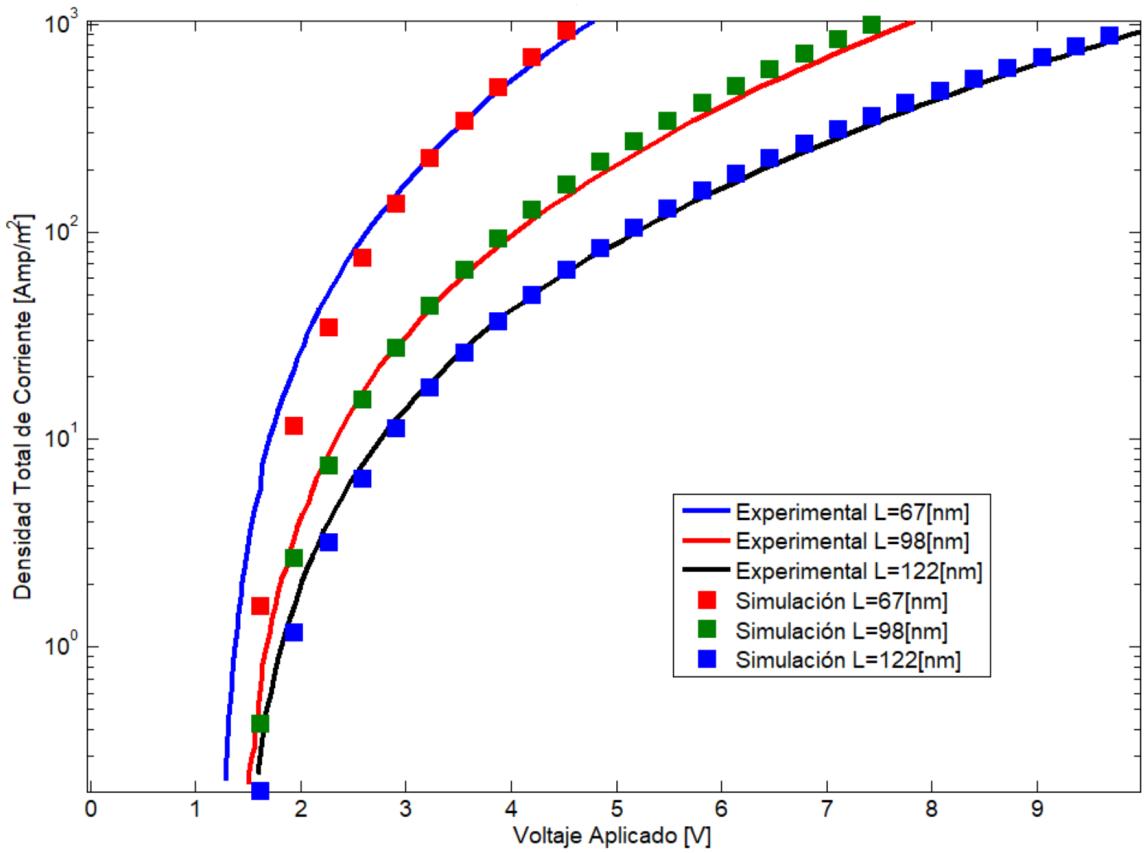


Figura 3.7: Comparación de curvas I - V experimentales y simuladas

La Figura 3.7 muestra que la curva simulada se adapta bien para las gráficas experimentales de los dispositivos de 122 y 98 [nm]. Para el caso del dispositivo de 67 [nm], la gráfica simulada muestra un desplazamiento a la derecha respecto al valor experimental.

El desplazamiento a la derecha se observa en alguna medida para las tres curvas simuladas, lo que se debe a la omisión de la función mejora de la difusión g_3 que afecta levemente a bajos voltajes y despreciablemente a altos voltajes, afectando mas notablemente para el dispositivo de 67 [nm]. A pesar del corrimiento, la curva simulada esta en el mismo orden de magnitud que la curva experimental.

Para descartar influencia de parámetros computacionales en estos resultados, replicamos el gráfico de la Figura 3.7 para distintos números de puntos espaciales y ΔV .

3.3 RECOMBINACIÓN Y EFICIENCIA DE RECOMBINACIÓN

A partir de la ecuación 1.15 y las densidades estacionarias de huecos y electrones, obtuvimos el perfil de recombinación del dispositivo que se muestra en la figura 3.8.

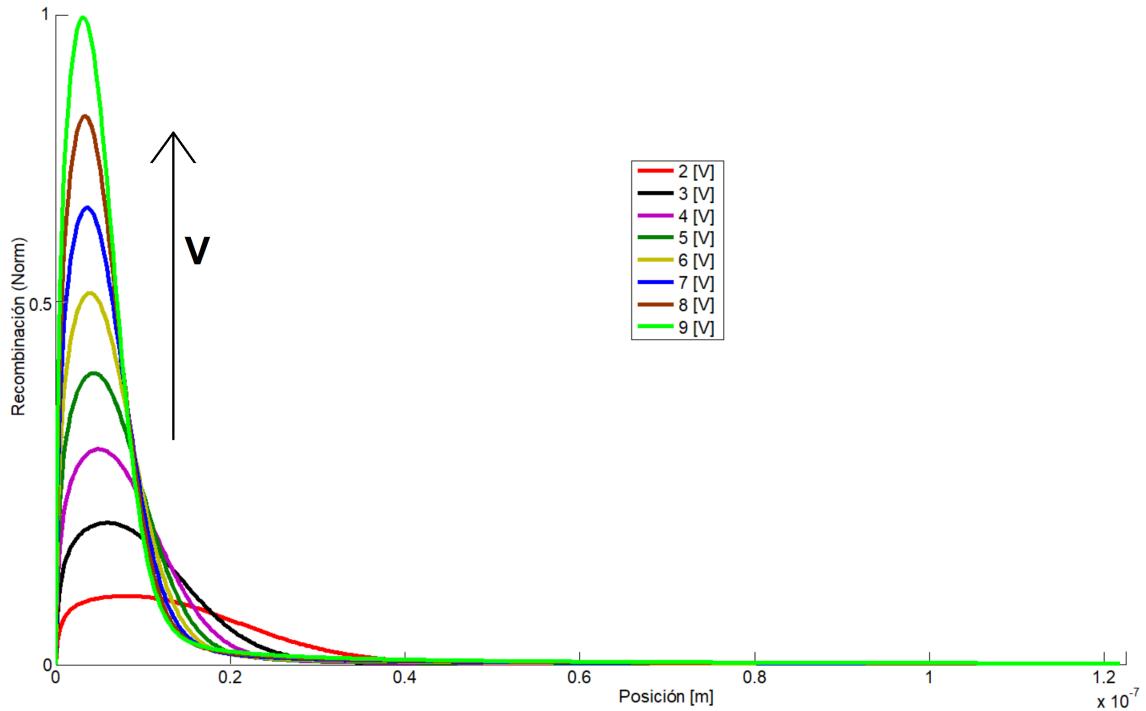


Figura 3.8: Perfil de recombinación para distintos voltajes de 2 a 9 [V] del dispositivo de 122[nm]

usando la ecuación 1.19 se calcula la eficiencia de recombinación dada por la tabla 3.4

Voltaje [V]	Eficiencia (%) 122[nm]	Eficiencia (%) 67[nm]
2	0.04290	0.00703
3	0.01085	0.00158
4	0.00475	0.00065
5	0.00263	0.00034
6	0.00166	0.00021
7	0.00113	0.00014
8	0.00082	0.00010
9	0.00062	0.00007

Tabla 3.4: Eficiencia de recombinación para OLED de 122[nm] y 67[nm] en función del Voltaje aplicado.

Como era esperarse de un dispositivo de transporte único de huecos, la eficiencia de recombinación electrón/hueco es extremadamente baja, esto debido que para que exista la recombinación, debe existir transporte e inyección de electrones también (Ec. 1.15), por otra

parte la barrera energética ($\approx 1[eV]$) del cátodo es demasiado grande (Figura 3.4) para que los electrones puedan ser inyectados dentro del dispositivo. La eficiencia de recombinación es siempre baja incluso más a altos Voltajes. Esto sumando a la diferencia de movilidad de los electrón y huecos, la mayor parte de la recombinación tiene lugar cerca del cátodo. Los agujeros tienen una alta probabilidad de pasar a través de la zona de recombinación estrecha sin recombinar con electrones. Como resultado, la corriente de fuga es alta y la eficiencia de recombinación es baja.

Intuitivamente se pensaría que en un dispositivo mas pequeño, las cargas se encontraría mas fácilmente, pero la eficiencia del dispositivo de 67[nm] es mucho menor que el dispositivo de 122[nm], debido a que los electrones y huecos tienen menos espacio donde se puedan encontrar evitando la recombinación y pasando de largo dentro del dispositivo.

3.3.1 Consideraciones para mejorar eficiencia

De los resultados de la simulación presentados, podemos decir que para los dispositivos OLED de una sola capa, es necesaria una movilidad e inyección equilibrada para lograr una zona de recombinación favorable lejos de los electrodos y una alta eficiencia de recombinación. Al seleccionar materiales con niveles de Fermi ideales, podemos ignorar los efectos de la barrera de inyección como fue el caso con el PEDOT:PSS.

Los contactos de inyección para agujeros y electrones alteraran el rendimiento del dispositivo. Una barrera de inyección alta para electrones desplazaría la zona de recombinación hacia el cátodo y disminuiría la eficiencia de recombinación como se vio en la Figura 3.8.

Para dispositivos con una movilidad, densidad de agujero igual a la de electrones, y sin barreras de inyección, la eficiencia de recombinación es alta , ya que la mayoría de los portadores de carga se recombinarán en el volumen antes de llegar al otro lado del dispositivo. Sin embargo, la eficiencia de recombinación disminuye a medida que disminuye la densidad de corriente por debajo de V_{bi} . Esta caída se atribuye a la densidad reducida del portador de carga en el dispositivo. Cuando la densidad de corriente disminuye, los electrones ven menos agujeros en su camino a través del dispositivo.

CONCLUSIÓN

En la presente tesis se estudiaron las principales características de un OLED contrastándolas con su homólogo más comercial "el LED", dando a conocer las ventajas industriales y tecnológicas de este dispositivo. Usando el método drift-diffusion con Scharfetter-Gummel y las ecuaciones de Poisson, Continuidad y corriente, se desarrollaron dos programas capaz de simular el transporte de cargas en un LED y en un hole transport OLED.

La simulación del OLED manifestó su complejidad por considerar ecuaciones acopladas no lineales como el modelo de movilidad para semiconductores orgánicos llamado modelo Gaussiano Extendido y la tasa de recombinación de Langevin. La no linealidad y acople de la función de mejora g_3 desestabilizó la convergencia del programa desembocando en su omisión. Igualmente, a altas concentraciones de portadores, la tasa de recombinación de Langevin complico la convergencia del programa, limitando a simular dispositivos OLED single carrier.

La simulación realizada coincide con los datos experimentales dada por la literatura, demostrando que el programa es capaz de simular dispositivos reales. Además se evidencia que la selección de los materiales simulados fueron usados por Philips en 2005 para la construcción de pantalla de TV OLED a todo color demostrando la utilidad de este tipo de simulaciones en la industria.

Se calculó la eficiencia de recombinación del LED y del OLED obteniendo aproximadamente de $\approx 20\%$ y $\approx 0.001\%$ respectivamente. La "alta" eficiencia del LED es debida principalmente a la simulación con cantidades de portadores iniciales idénticas. Por otra parte, la baja eficiencia calculada para el OLED es debido al desequilibrio de portadores en el dispositivo producto a la barrera energética del cátodo que impide la inyección de electrones.

También se obtuvieron los perfiles de recombinación del LED y del OLED permitiendo observar en qué parte del dispositivo y en qué cantidad se producen las recombinaciones.

Para obtener la mayor tasa de eficiencia de recombinación, se debe:

- Maximizar la tasa de recombinación de Langevin usando materiales con sitios de portadores (N_t).
- Inyectando la mayor cantidad de portadores de carga n y p usando materiales especiales de transporte de cargas con el fin de minimizar las barreras energéticas en los electrodos (factor limitante de la eficiencia en el presente caso) .
- Usar materiales con altas movilidades y bajo desorden energético.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Brütting, W., & Adachi, C. (2005). *Physics of organic semiconductors*, vol. 1. Wiley Online Library.
- Chamorro Posada, P., Martín Gil, J., Martín Ramos, P., & Navas García, L. M. (2008). Fundamentos de la tecnología oled.
- Groves, C. (2016). Simulating charge transport in organic semiconductors and devices: a review. *Reports on Progress in Physics*, 80(2), 026502.
- Khanna, V. K. (2014). *Fundamentals of solid-state lighting: LEDs, OLEDs, and their applications in illumination and displays*. CRC press.
- Knapp, E., Häusermann, R., Schwarzenbach, H., & Ruhstaller, B. (2010). Numerical simulation of charge transport in disordered organic semiconductor devices. *Journal of applied physics*, 108(5), 054504.
- Ko, S. H. (2011). *Organic light emitting diode-material, process and devices*.
- Konezny, S., Smith, D., Galvin, M., & Rothberg, L. (2006). Modeling the influence of charge traps on single-layer organic light-emitting diode efficiency. *Journal of applied physics*, 99(6), 064509.
- Koster, L. J., Smits, E., Mihailetti, V., & Blom, P. (2005). Device model for the operation of polymer/fullerene bulk heterojunction solar cells. *Physical Review B*, 72(8), 085205.
- Langevin, P. (1903). P. langevin, ann. chim. phys. 28, 433 (1903). *Ann. chim. phys.*, 28, 433.
- Malliaras, G., Salem, J., Brock, P., & Scott, C. (1998). Electrical characteristics and efficiency of single-layer organic light-emitting diodes. *Physical Review B*, 58(20), R13411.
- Pasveer, W., Cottaar, J., Tanase, C., Coehoorn, R., Bobbert, P., Blom, P., De Leeuw, D., & Michels, M. (2005). Unified description of charge-carrier mobilities in disordered semiconducting polymers. *Physical review letters*, 94(20), 206601.
- Rogel-Salazar, J., Bradley, D., Cash, J., et al. (2009). An efficient method-of-lines simulation procedure for organic semiconductor devices. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 11(10), 1636–1646.
- Ruhstaller, B., Beierlein, T., Riel, H., Karg, S., Scott, J. C., & Riess, W. (2003). Simulating electronic and optical processes in multilayer organic light-emitting devices. *IEEE Journal of selected topics in quantum electronics*, 9(3), 723–731.
- Ruhstaller, B., Carter, S., Barth, S., Riel, H., Riess, W., & Scott, J. (2001). Transient and steady-state behavior of space charges in multilayer organic light-emitting diodes. *Journal of Applied Physics*, 89(8), 4575–4586.
- Silva, F., Silva, L., Ceschin, A., Sales, M., Moreira, S., & Viana, C. (2008). Kdp/pedot: Pss mixture as a new alternative in the fabrication of pressure sensing devices. *Applied Surface Science*, 255(3), 734–736.
- Stallinga, P. (2009). *Electrical characterization of organic electronic materials and devices*. John Wiley & Sons.
- Sun, K., Zhang, S., Li, P., Xia, Y., Zhang, X., Du, D., Isikgor, F. H., & Ouyang, J. (2015). Review on application of pedots and pedot: Pss in energy conversion and storage devices. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 26(7), 4438–4462.
- van der Holst, J. J. M. (2010). Three-dimensional modeling of charge transport, injection and recombination in organic light-emitting diodes. *Eindhoven University of Technology, Eindhoven*.

Van der Vaart, N., Lifka, H., Budzelaar, F., Rubingh, J., Hoppenbrouwers, J., Dijksman, J., Verbeek, R., Van Woudenberg, R., Vossen, F., Hiddink, M., et al. (2005). Towards large-area full-color active-matrix printed polymer oled television. *Journal of the Society for Information Display*, 13(1), 9–16.

Van Mensfoort, S., & Coehoorn, R. (2008). Effect of gaussian disorder on the voltage dependence of the current density in sandwich-type devices based on organic semiconductors. *Physical Review B*, 78(8), 085207.

Van Mensfoort, S. L., Vulto, S., Janssen, R. A., & Coehoorn, R. (2008). Hole transport in polyfluorene-based sandwich-type devices: Quantitative analysis of the role of energetic disorder. *Physical Review B*, 78(8), 085208.

CÁLCULOS

DRIFT DIFFUSION MODEL

Discretizacion Poisson

$$(\epsilon/q) \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 x} - n + p + C = 0 \quad (1)$$

$$(\epsilon/q) \cdot \frac{\frac{\partial \psi}{\partial x}|_{i+1/2} - \frac{\partial \psi}{\partial x}|_{i-1/2}}{\frac{h_i + h_{i+1}}{2}} + (\epsilon/q) \cdot \frac{h_{i-1} - h_i}{4} \frac{\partial^3 \psi}{\partial^3 x}|_i - n + p + C = 0 \quad (2)$$

ignorando el termino $O(h^3)$, ínter-espaciado contante h y cambiando a una notación mas comoda

$$(\epsilon/q) \cdot \frac{\psi(i+1) - 2\psi(i) + \psi(i-1)}{h^2} - n + p + C = 0 \quad (3)$$

luego

$$\frac{(\epsilon/q)}{h^2} \psi(i+1) - \frac{2(\epsilon/q)}{h^2} \psi(i) + \frac{(\epsilon/q)}{h^2} \psi(i-1) = -[P(i) - N(i) + C(i)] \quad (4)$$

sumamos la ecuacion anterior con $-\psi(i)[P(i) + N(i)]$

$$\frac{(\epsilon/q)}{h^2} \psi(i+1) - \left[\frac{2(\epsilon/q)}{h^2} + P(i) + N(i) \right] \psi(i) + \frac{(\epsilon/q)}{h^2} \psi(i-1) = -[P(i) - N(i) + C(i)] - \psi(i)[P(i) + N(i)] \quad (5)$$

Así, la ecuación de Poisson queda discretizada, donde la parte derecha de la ecuación, cumple como función forzadora $-[P(i) - N(i) + C(i)] - \psi(i)[P(i) + N(i)]$
Esto se puede escribir como

$$a_{(i)} \psi(i+1) - b_{(i)} \psi(i) + c_{(i)} \psi(i-1) = F_{(i)} \quad (6)$$

con:

$$a_{(i)} = c_{(i)} = \frac{(\epsilon/q)}{h^2} \quad (7)$$

$$b_{(i)} = -\left[\frac{2(\epsilon/q)}{h^2} + P(i) + N(i) \right] \quad (8)$$

$$F_{(i)} = -[P(i) - N(i) + C(i)] - \psi(i)[P(i) + N(i)] \quad (9)$$

ejemplo de resolución con i=[1,4] :

$$\begin{array}{rclccc} a_1 \psi_2 & + & b_1 \psi_1 & + & 0 & = F_1 \\ a_2 \psi_3 & + & b_2 \psi_2 & + & c_2 \psi_1 & = F_2 \\ a_3 \psi_4 & + & b_3 \psi_3 & + & c_3 \psi_2 & = F_3 \\ 0 & + & b_4 \psi_4 & + & c_4 \psi_3 & = F_4 \end{array} \quad (10)$$

Generalizando matricialmente la ecuación 10:

$$\begin{pmatrix} b_1 & a_1 & 0 & 0 & \dots \\ c_2 & b_2 & a_2 & 0 & \dots \\ 0 & c_3 & b_3 & a_3 & \dots \\ 0 & 0 & c_4 & b_4 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ F_4 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (11)$$

Discretizacion Corriente

$$\nabla \cdot J_n = qR(n_f, p_f) \quad (12)$$

utilizando la ecuación (12), y discretizando para $J(i + \frac{1}{2})$

$$J_{(i+1/2)}^n = -qn_{(i+1/2)}\mu_{(i+1/2)}^n \nabla \psi + qD_{(i+1/2)}^n \nabla n \quad (13)$$

Multiplicamos por $\exp(-\frac{\mu \nabla \psi}{D}(x - x_i))$

$$J_{(i+1/2)}^n e^{(-\frac{\mu \nabla \psi}{D}(x - x_i))} = (-qn_{(i+1/2)}\mu_{(i+1/2)}^n \nabla \psi + qD_{(i+1/2)}^n \nabla n) e^{(-\frac{\mu \nabla \psi}{D}(x - x_i))} \quad (14)$$

$$J_{(i+1/2)}^n e^{(-\frac{\mu \nabla \psi}{D}(x - x_i))} = qD \frac{\partial}{\partial x} (ne^{(-\frac{\mu \nabla \psi}{D}(x - x_i))}) \quad (15)$$

Considerando las condiciones $n_i = n(x_i)$ y $n_{i+1} = n(x_{i+1})$ e integramos

$$J_{(i+1/2)}^n \int_{x_i}^{x+1} e^{(-\frac{\mu \nabla \psi}{D}(x - x_i))} dx = qD(ne^{(-\frac{\mu \nabla \psi}{D}(x - x_i))}) \Big|_{x_i}^{x+1} \quad (16)$$

$$J_{(i+1/2)}^n \frac{-D}{\mu \nabla \psi} \left(e^{(-\frac{\mu \nabla \psi}{D}\Delta)} - 1 \right) = qD(n_i - n_{i+1} e^{(-\frac{\mu \nabla \psi}{D}\Delta)}) \quad (17)$$

$$J_{(i+1/2)}^n = \frac{-q\mu \nabla \psi}{e^{(-\frac{\mu \nabla \psi}{D}\Delta)} - 1} (n_i - n_{i+1} e^{(-\frac{\mu \nabla \psi}{D}\Delta)}) \quad (18)$$

pero

$$\frac{\mu}{D} = \frac{\mu}{(k_b T/q) \mu g_3} = \frac{q}{V_t g_3} \quad (19)$$

entonces:

$$J_{(i+1/2)}^n = \frac{-q\mu \nabla \psi (n_i - n_{i+1} e^{(\frac{-\nabla \psi}{V_t g_3} \Delta)})}{e^{(\frac{-\nabla \psi}{V_t g_3} \Delta)} - 1} \quad (20)$$

considerando $B(x) = \frac{x}{e^x - 1}$, $V_t = \frac{k_b T}{q}$ y $x = \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{V_t g_3}$ queda finalmente

$$J_{(i+1/2)}^n = \frac{q\mu_{(i+1/2)}^n V_t g_3^n (i+1/2)}{\Delta} \left(n_i B\left(\frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{V_t g_3}\right) - n_{i+1} B\left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{V_t g_3}\right) \right) \quad (21)$$

De forma Análoga

$$J_{(i-1/2)}^n = \frac{q\mu_{(i-1/2)}^n V_t g_3^n (i-1/2)}{\Delta} \left(n_{i-1} B\left(\frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{V_t g_3}\right) - n_i B\left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{V_t g_3}\right) \right) \quad (22)$$

Para la ecuación de corriente de Huecos, es similar, pero usando un factor integrante $\exp\left(\frac{\mu \nabla \psi}{D}(x - x_i)\right)$

$$J_{(i+1/2)}^p = \frac{q\mu_{(i+1/2)}^p V_t g_3^p (i+1/2)}{\Delta} \left(p_i B\left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{V_t g_3^p (i+1/2)}\right) - p_{i+1} B\left(\frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{V_t g_3^p (i+1/2)}\right) \right) \quad (23)$$

De forma Análoga

$$J_{(i-1/2)}^p = \frac{q\mu_{(i-1/2)}^p V_t g_3^p (i-1/2)}{\Delta} \left(p_{i-1} B\left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{V_t g_3^p (i-1/2)}\right) - p_i B\left(\frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{V_t g_3^p (i-1/2)}\right) \right) \quad (24)$$

por ultimo, la corriente total queda dada por

$$J_{Total} = J^n + J^p \quad (25)$$

Ecuaciones de continuidad en estado estacionario

$$\nabla \cdot J^n = qR(n, p) = \frac{1}{\Delta} (J_{(i+1/2)}^n - J_{(i-1/2)}^n) \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot J^n &= \frac{-q\mu_{(i+1/2)}^n V_t g_3^n (i+1/2)}{\Delta^2} B\left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{V_t g_3}\right) n_{i+1} + \\ &\quad \left[\frac{q\mu_{(i+1/2)}^n V_t g_3^n (i+1/2)}{\Delta^2} B\left(\frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{V_t g_3}\right) + \frac{q\mu_{(i-1/2)}^n V_t g_3^n (i-1/2)}{\Delta^2} B\left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{V_t g_3}\right) \right] n_i \\ &\quad - \frac{q\mu_{(i-1/2)}^n V_t g_3^n (i-1/2)}{\Delta^2} B\left(\frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{V_t g_3}\right) n_{i-1} = qR(n, p) \end{aligned} \quad (27)$$

$$\nabla \cdot J^p = -qR(n, p) = \frac{1}{\Delta} (J_{(i+1/2)}^p - J_{(i-1/2)}^p) \quad (28)$$

$$\begin{aligned}\nabla \cdot J^p &= \frac{-q\mu_{(i+1/2)}^p V_t g_3^p(i+1/2)}{\Delta^2} B\left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{V_t g_3^p(i+1/2)}\right) p_{i+1} \\ &+ \left(\frac{q\mu_{(i-1/2)}^p V_t g_3^p(i-1/2)}{\Delta^2} B\left(\frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{V_t g_3^p(i-1/2)}\right) + \frac{q\mu_{(i+1/2)}^p V_t g_3^p(i+1/2)}{\Delta^2} B\left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{V_t g_3^p(i+1/2)}\right) \right) p_i \\ &- \frac{q\mu_{(i-1/2)}^p V_t g_3^p(i-1/2)}{\Delta^2} B\left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{V_t g_3^p(i-1/2)}\right) p_{i-1} = -qR(n, p) \quad (29)\end{aligned}$$

para el programa:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot J^n &= \frac{-q\mu_{(i+1/2)}^n V_t g_3^n(i+1/2)}{\Delta^2} \left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{V_t g_3} \right) \frac{1}{e^{\left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{V_t g_3} \right)} - 1} n_{i+1} + \\ &\left[\frac{q\mu_{(i+1/2)}^n V_t g_3^n(i+1/2)}{\Delta^2} \left(\frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{V_t g_3} \right) \frac{1}{e^{\left(\frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{V_t g_3} \right)} - 1} + \frac{q\mu_{(i-1/2)}^n V_t g_3^n(i-1/2)}{\Delta^2} \left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{V_t g_3} \right) \frac{1}{e^{\left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{V_t g_3} \right)} - 1} \right] n_i \\ &- \left(\frac{q\mu_{(i-1/2)}^n V_t g_3^n(i-1/2)}{\Delta^2} \left(\frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{V_t g_3} \right) \frac{1}{e^{\left(\frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{V_t g_3} \right)} - 1} \right) n_{i-1} = qR(n, p) \quad (30)\end{aligned}$$

entonces, los coeficientes serán:

$$\nabla \cdot J^n = c_n n_{i+1} + b_n n_i + a_n n_{i-1} \quad (31)$$

$$c_n(i) = \frac{-\mu_{(i+1/2)}^n}{\Delta^2} \frac{(\psi_{i+1} - \psi_i)}{e^{\left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{V_t g_3} \right)} - 1} \quad (32)$$

$$b_n(i) = \frac{\mu_{(i+1/2)}^n}{\Delta^2} \frac{(\psi_i - \psi_{i+1})}{e^{\left(\frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{V_t g_3} \right)} - 1} + \frac{q\mu_{(i-1/2)}^n}{\Delta^2} \frac{(\psi_i - \psi_{i-1})}{e^{\left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{V_t g_3} \right)} - 1} \quad (33)$$

$$a_n(i) = \frac{-\mu_{(i-1/2)}^n}{\Delta^2} \frac{(\psi_{i-1} - \psi_i)}{e^{\left(\frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{V_t g_3} \right)} - 1} \quad (34)$$

$$f_n(i) = R_{n,p} \quad (35)$$

Para los huecos

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot J^p = & \frac{-q\mu_{(i+1/2)}^p V_t g_3^p(i+1/2)}{\Delta^2} \frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{V_t g_3^p(i+1/2)} \left(\frac{1}{e^{\frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{V_t g_3^p}} - 1} \right) p_{i+1} \\
& + \left(\frac{q\mu_{(i-1/2)}^p V_t g_3^p(i-1/2)}{\Delta^2} \frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{V_t g_3^p(i-1/2)} \left(\frac{1}{e^{\frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{V_t g_3^p(i-1/2)}} - 1} \right) + \frac{q\mu_{(i+1/2)}^p V_t g_3^p(i+1/2)}{\Delta^2} \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{V_t g_3^p(i+1/2)} \left(\frac{1}{e^{\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{V_t g_3^p(i+1/2)}} - 1} \right) \right) p_i \\
& - \frac{q\mu_{(i-1/2)}^p V_t g_3^p(i-1/2)}{\Delta^2} \left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{V_t g_3^p(i-1/2)} \right) \left(\frac{1}{e^{\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{V_t g_3^p(i-1/2)}} - 1} \right) p_{i-1} = -qR(n, p) \quad (36)
\end{aligned}$$

los coeficientes son:

$$c_p(i) = \frac{\mu_{(i+1/2)}^p}{\Delta^2} \left(\frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{e^{\frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{V_t g_3^p}} - 1} \right) \quad (37)$$

$$b_p(i) = \frac{-\mu_{(i-1/2)}^p}{\Delta^2} \left(\frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{e^{\frac{\psi_{i-1} - \psi_i}{V_t g_3^p(i-1/2)}} - 1} \right) - \frac{\mu_{(i+1/2)}^p}{\Delta^2} \left(\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{e^{\frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{V_t g_3^p(i+1/2)}} - 1} \right) \quad (38)$$

$$a_p(i) = \frac{\mu_{(i-1/2)}^p}{\Delta^2} \left(\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{e^{\frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{V_t g_3^p(i-1/2)}} - 1} \right) \quad (39)$$

y

$$f_p(i) = R(n, p) \quad (40)$$

Parámetros LED Inorgánico

Parametro	Valor
σ_p [eV]	0.13
n_i [$10^{10} cm^{-3}$]	1.5
τ_n [10^{-6}]	0.1
τ_n [10^{-6}]	0.1
μp [$cm^2 V^{-1} s^{-1}$]	1000
μp [$cm^2 V^{-1} s^{-1}$]	1500
σ_n [eV]	0.07
N_a [$10^{16} cm^{-3}$]	1
N_a [$10^{16} cm^{-3}$]	1
ϵ [$10^{-12} F cm^{-1}$]	1.05
T [K]	300

Tabla 5: Parámetros del LED simulado

Figuras: Variables 122nm a 10V

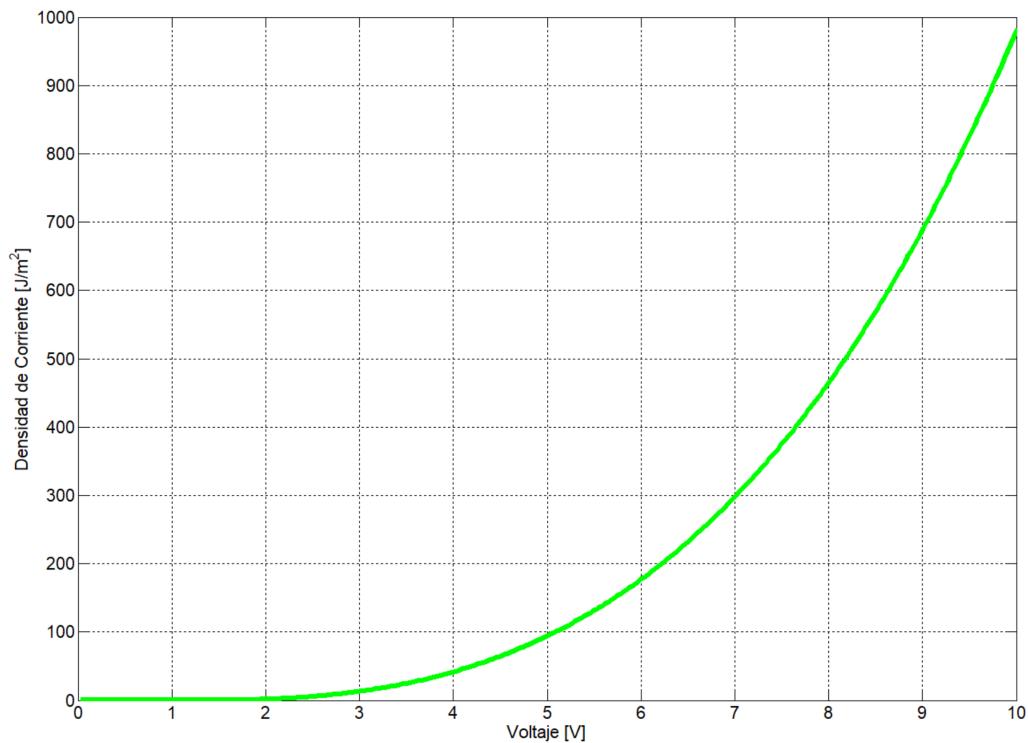


Figura 9: Curva $J(V)$ de ejes lineales simulada de OLED de $L=122[nm]$ a $10[V]$

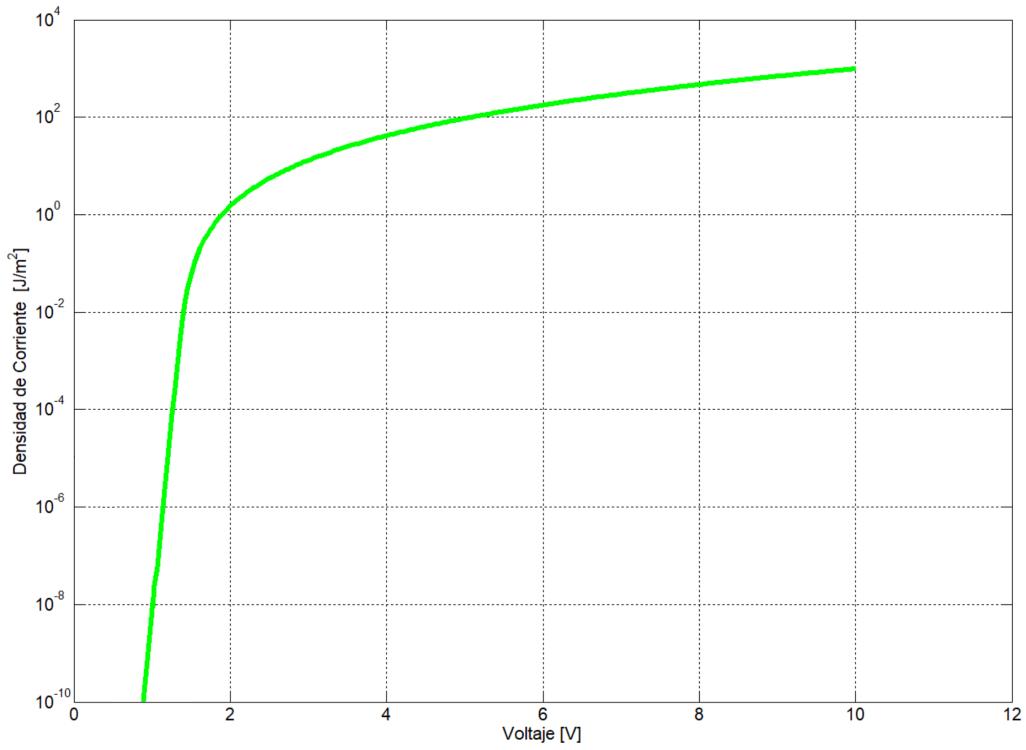


Figura 10: Curva $J(V)$ de eje y Logarítmico simulada de OLED de $L=122[\text{nm}]$ a $10[\text{V}]$

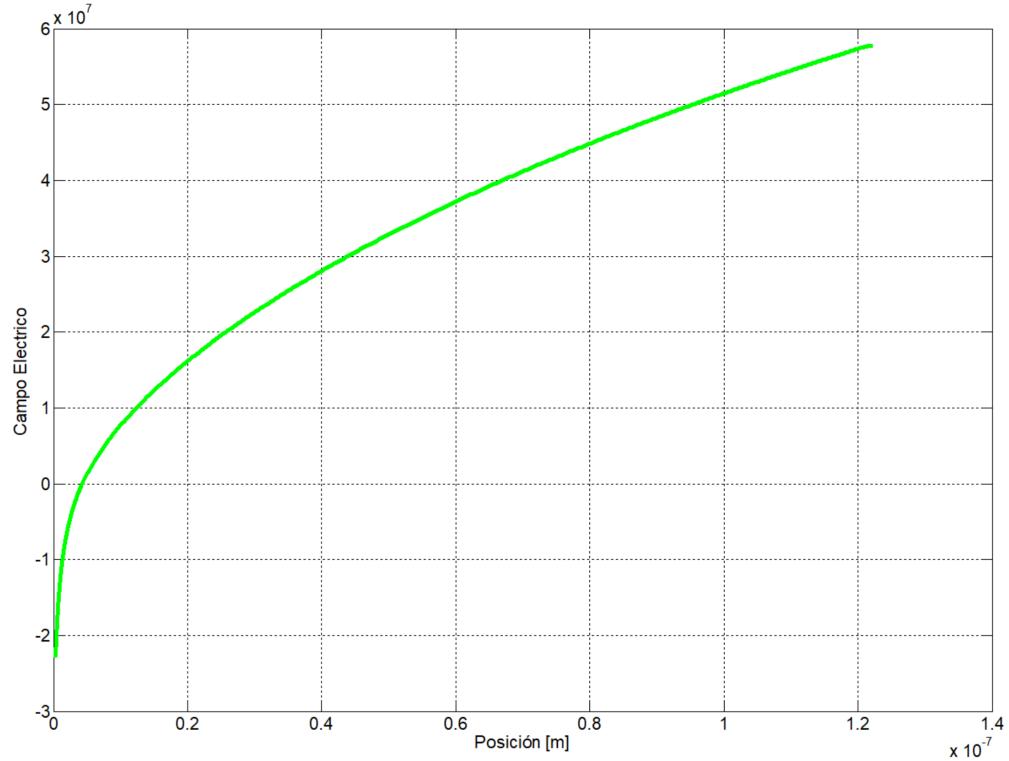


Figura 11: Curva $E(x)$ simulada de OLED de $L=122[\text{nm}]$ a $10[\text{V}]$

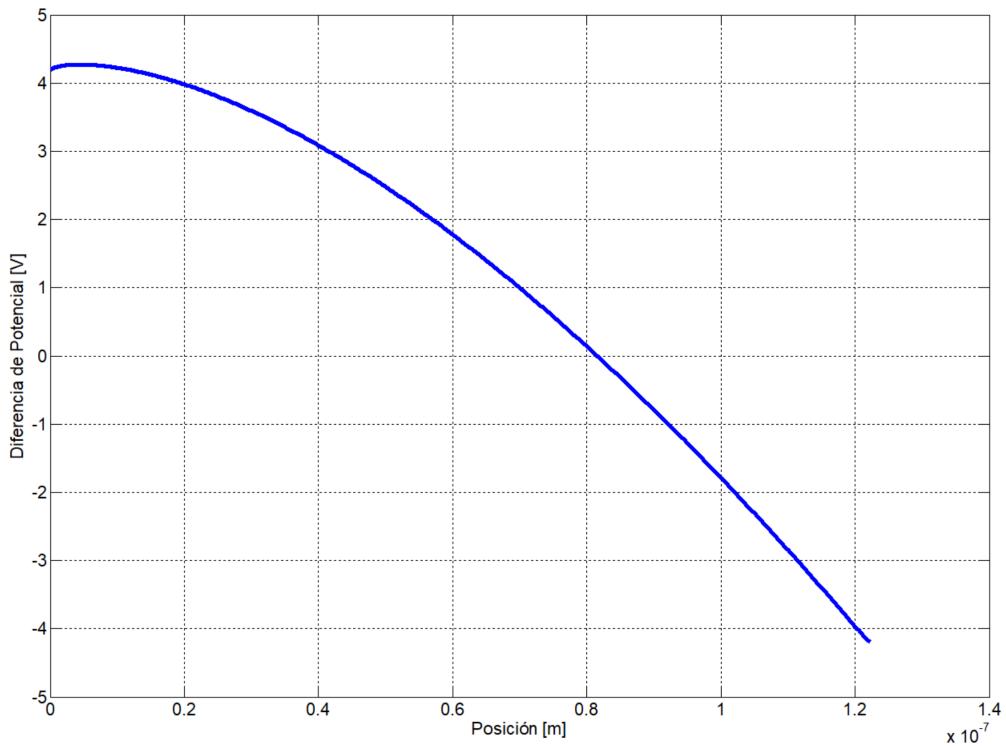


Figura 12: Curva $\psi(x)$ simulada de OLED de $L=122[\text{nm}]$ a $10[\text{V}]$

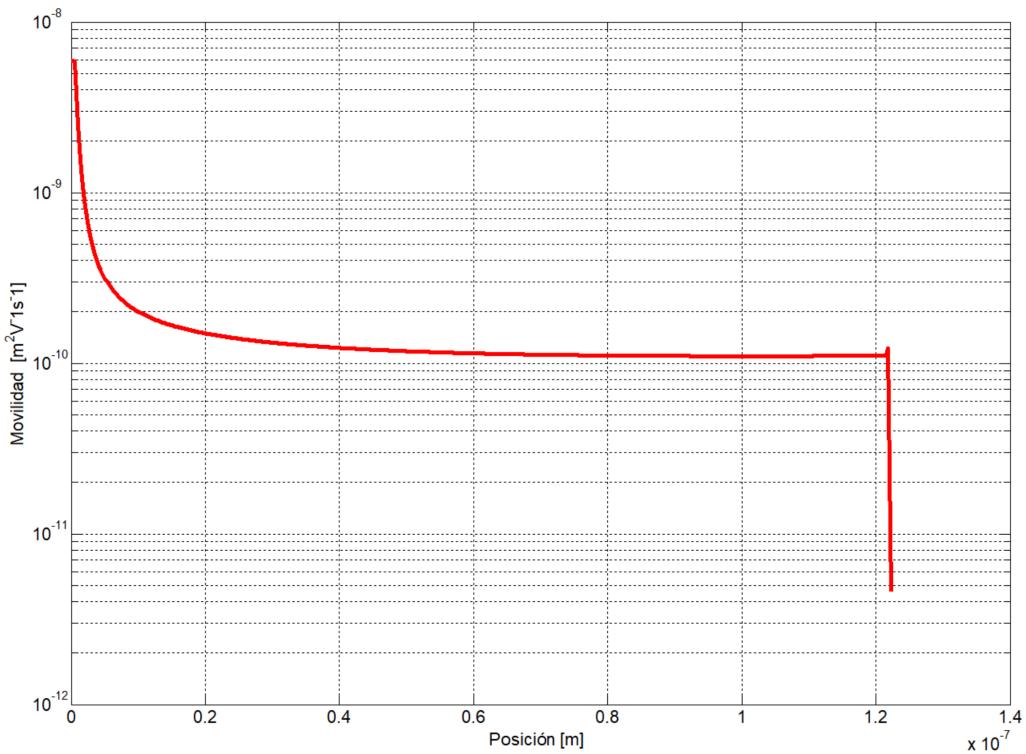


Figura 13: Curva $\mu_p(x)$ simulada de OLED de $L=122[\text{nm}]$ a $10[\text{V}]$

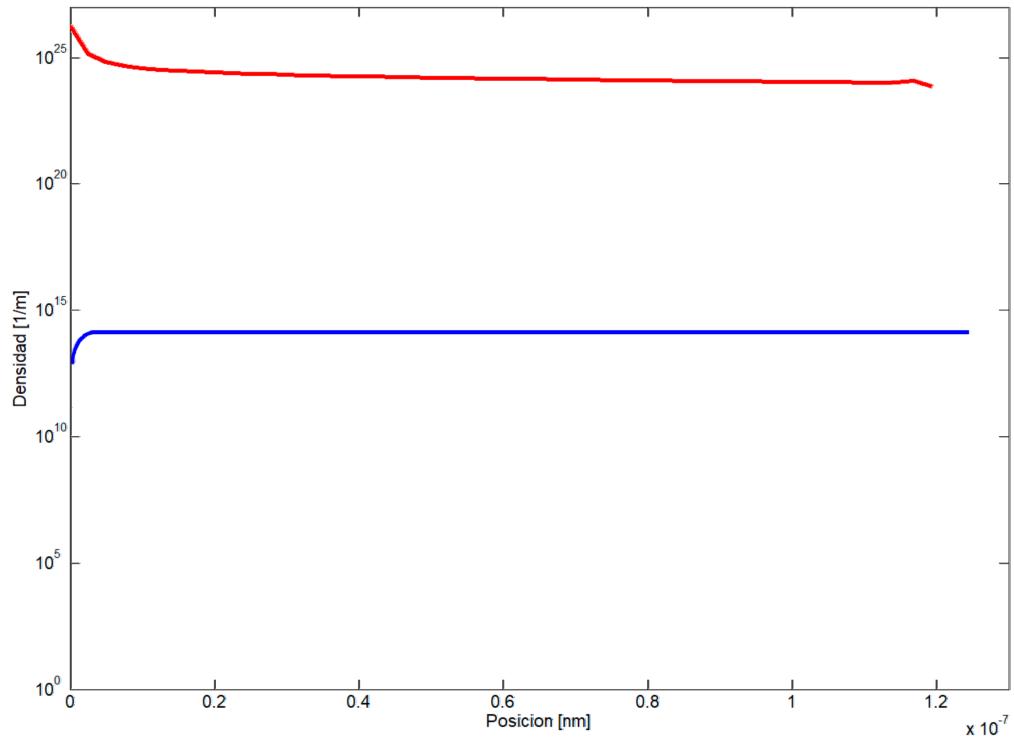


Figura 14: Densidad de Huecos $p(x)$ simulada de OLED de $L=122[\text{nm}]$ a $10[\text{V}]$