# 2. Fundamentos Teóricos

Neste capítulo os fundamentos teóricos usados neste trabalho são abordados, dentre os quais a espectroscopia de absorção na região do UV-Vis, espectroscopia de fotoluminescência e eletroluminescência de materiais orgânicos. Por fim, discutem-se os princípios de funcionamento dos dispositivos orgânicos emissores de luz e as eficiências dos mesmos.

# 2.1. Luminescência em moléculas orgânicas

A luminescência é o fenômeno onde ocorre a emissão de fótons (radiação UV, Visível ou infravermelha) por um determinado material quando este retorna de um estado excitado para um estado de menor energia. De acordo com o tipo de energia utilizado na excitação, o fenômeno da luminescência recebe diferentes denominações:

<b>T</b> = 1 1 =	<b>A</b>	<b>T</b> :		Le construction de		- 1 -
l abela	2-1.	LIDOS	ae	iumine	scen	cia

Modo de Excitação	Fenômeno		
Fótons	Fotoluminescência		
Radiação Ionizante	Radioluminescência		
Raios Catódicos	Catodoluminescência		
Calor	Termoluminescência		
Processo Químicos	Quimiluminescência		
Processos Bioquímicos	Bioluminescência		
Atrito	Triboluminescência		
Ultra-som	Sonoluminescência		
Campo Elétrico	Eletroluminescência		

Nesta dissertação, os sistemas moleculares estudados são excitados através de fótons (fotoluminescência) ou mediante um campo elétrico (eletroluminescência). As principais características destes processos são descritas a seguir.

# 2.2. Espectroscopia na região do Ultravioleta-Visivel (UV-Vis)

A incidência de uma radiação continua (feixe de luz) sobre uma amostra resulta em absorção da radiação, onde átomos e moléculas passam de um estado de energia mais baixa (estado fundamental) para um estado de energia maior (estado excitado). A radiação absorvida é quantizada, ou seja tem um valor igual à diferença de energia entre os estados excitado e fundamental<sup>[1]</sup>.

A absorção de energia depende da estrutura eletrônica da molécula, e por isso, a espectroscopia de absorção na região do UV-Vis<sup>[2]</sup> tem ampla aplicação na caracterização de diversas espécies orgânicas e inorgânicas. Como a energia absorvida é quantizada, o espectro de uma única transição eletrônica deveria corresponder a uma linha discreta. Esta previsão não se confirma, uma vez que a absorção eletrônica se sobrepõe a subníveis rotacionais e vibracionais; assim, um espectro de UV-Vis tem o aspecto de uma banda.

As principais características de uma banda de absorção correspondem ao valor de comprimento de onda em que ocorre a máxima absorção de energia e sua intensidade. Este comprimento de onda corresponde ao comprimento de onda da radiação cuja energia é igual à necessária para que ocorra a transição eletrônica. E a intensidade depende, principalmente, da interação entre a energia incidente e o sistema eletrônico.

A quantidade de luz absorvida corresponde a diferença entre a intensidade da radiação incidente  $I_0$  e a radiação transmitida *I*. A quantidade de luz transmitida pode ser expressa tanto em transmitância como absorbância. A transmitância é definida como:

$$T = \frac{I}{I_0}$$
 Equação 2-1

E a absorbância relaciona-se com a transmitância da seguinte forma:

$$\mathbf{A} = \mathbf{log} \frac{1}{\mathbf{T}} = -\mathbf{log} \mathbf{T}$$
 Equação 2-2

Uma expressão mais conveniente para a intensidade da luz, é obtida através da lei de Lambert-Beer, que diz que a fração de luz absorvida por cada camada da amostra é a mesma. Ou seja, estabelece que a absorbância é diretamente proporcional ao caminho (b) que a luz percorre na amostra, à concentração (c) e a absortividade ( $\epsilon$ ):

$$A = \varepsilon c b = \log \left( rac{I_0}{I} 
ight)$$
 Equação 2-3

As medidas de absorção óptica também são de grande utilidade por permitirem a determinação do gap óptico de materiais orgânicos depositados na forma de filmes finos. Para isso, determina-se o comprimento de onda da absorção fundamental (*"edge"*), obtido a partir do ponto de inflexão da curva de absorbância, conforme Figura 2-1.



Comprimento de Onda ( $\lambda$ )

**Figura 2-1** Espectro de absorção de um material e método para determinar o gap óptico<sup>[3]</sup>.

# 2.3. Espectroscopia de Fotoluminescência (FL)

Antes que a molécula seja excitada os elétrons que estão no estado fundamental ocupam (segundo o princípio de exclusão de Pauli) alguns dos orbitais moleculares, como por exemplo, os orbitais  $\sigma$ ,  $\pi$  ou  $\eta$ , onde o último orbital ocupado é chamado de HOMO (orbital molecular ocupado de maior energia). Quando ocorre a absorção de energia, os elétrons são transferidos para um dos orbitais  $\sigma^*$ ,  $\pi^*$ , dos quais, o primeiro a ser preenchido forma o LUMO (orbital desocupado de menor energia).

Átomos, ou moléculas podem emitir luz quando elétrons, no estado excitado, decaem radiativamente ao estado fundamental. O diagrama de Jablonski (Figura 2-2) é apropriado para se visualizar, de um modo geral, os possíveis processos: absorção de fótons, conversão interna, fluorescência, cruzamento intersistema, fosforescência e fluorescência atrasada. É importante perceber que a absorção é muito rápida (10<sup>-15</sup> s) em relação aos outros processos, pois não há deslocamento do núcleo de acordo com o princípio de Franck-Condon.

À temperatura ambiente, a maioria das moléculas mantém-se no nível fundamental  $S_0$ . Neste nível, a absorção de um fóton pode levar as moléculas para um dos níveis vibracionais de  $S_1$ ,  $S_2$ . Os possíveis processos subseqüentes de decaimento radiativo e não radiativo podem ser:



Figura 2-2 Diagrama de Jablonski.

Conversão Interna: é um decaimento não-radiativo entre dois estados eletrônicos de mesma multiplicidade de spin. Em sólidos, este processo é seguido por uma relaxação vibracional para um nível vibracional de menor energia do que no estado eletrônico final. O tempo de decaimento característico é de 10<sup>-13</sup> a 10<sup>-11</sup> s.

Fluorescência: emissão de fótons é originada pela relaxação  $S_1 \rightarrow S_0$ . A emissão de fluorescência ocorre a partir de  $S_1$  e não depende do comprimento da onda de excitação (considerando que somente existe uma espécie no estado fundamental). A transição 0-0 é geralmente a mesma para a absorção e para a fluorescência. No entanto, o espectro de fluorescência é localizado em comprimentos de onda maiores (com energia mais baixa) em relação ao

#### Fundamentos Teóricos

espectro de absorção, dado a perda de energia no estado excitado (relaxação vibracional).

De acordo com a regra de Stokes (uma observação empírica anterior ao diagrama de Jablonski), o comprimento da onda de emissão de fluorescência deve ser sempre maior que o da absorção. Entretanto, na maioria dos casos, o espectro de absorção se sobrepõe parcialmente ao espectro de fluorescência, ou seja, uma fração de luz é emitida em comprimento de onda menor que a luz absorvida. Tal observação parece estar em contradição com o princípio da conservação da energia. No entanto, isto pode ser explicado (como observou Einstein) pelo fato de que em temperatura ambiente, uma pequena fração de moléculas está num nível vibracional maior que o nível 0 (distribuição entre os níveis de energia de acordo com a lei de Boltzmann), tanto no estado fundamental como no estado excitado. A baixas temperaturas (77K) essa violação da lei de Stokes deve desaparecer.

Em geral, as diferenças entre os níveis vibracionais são similares nos dois estados: fundamental e excitado, tanto que o espectro de fluorescência freqüentemente apresenta a primeira banda de absorção (regra do espelho). O intervalo (expresso em número de onda) entre o máximo da primeira banda de absorção e o máximo de fluorescência é chamado de desvio de Stokes. O tempo de decaimento característico para a emissão de um fóton ( $\sim 10^{-9} - 10^{-6}$ s).

➤ **Cruzamento Intersistema CIS:** é uma transição proibida, não-radiativa entre dois níveis vibracionais isoenergéticos pertencentes a estados eletrônicos de multiplicidades diferentes. Por exemplo, uma molécula excitada no nível vibracional 0 do estado S<sub>1</sub> pode mover-se para o nível vibracional isoenergético do estado tripleto T; então a relaxação vibracional leva-a para o nível vibracional mais baixo de T<sub>1</sub>. O cruzamento intersistema pode ser suficientemente rápido  $(10^{-7} - 10^{-9} s)$  para competir com outros caminhos de desexcitação a partir de S<sub>1</sub> (fluorescência e conversão interna S<sub>1</sub> → S<sub>0</sub>).

**Fosforescência:** corresponde ao decaimento de um estado excitado (T) para um estado de menor energia (S<sub>0</sub>), aqual é proibida por regra de spin, mas pode ser observada devido ao acoplamento spin-órbita. Durante esse processo, que é mais curto em relação à fluorescência, ocorrem numerosas colisões entre moléculas que favorecem o cruzamento intersistema e a relaxação vibracional em S<sub>0</sub>. O tempo de vida do estado tripleto pode, nessas condições, ser longo o

suficiente para se observar a fosforescência em uma escala de tempo 10<sup>-3</sup>s a 1s ou mais.

### 2.4. Eletroluminescência em OLEDs

A eletroluminescência (EL) é a conversão de energia elétrica em radiação luminosa<sup>[4]</sup> por um meio, seja sólido, gás ou plasma. No caso deste trabalho, a EL é produzida em sólidos, mais especificamente, em filmes finos de moléculas orgânicas. O comportamento de EL em OLED ocorre através da formação de éxcitons; que são definidos como quase partículas neutras, resultado da recombinação elétron-buraco, e entre outras características, possui spin que deve ser conservado na emissão de um fóton. De acordo com a mecânica quântica 25% dos éxcitons formados têm spin total S=0 (anti-simétricos) e são chamados de singleto. Já os outros 75% têm spin total S=1 (simétricos) e são chamados éxcitons de tripleto<sup>[5,6]</sup>.

### 2.4.1. Estrutura básica OLEDs

Os OLEDs são dispositivos orgânicos emissores de luz compostos por camadas orgânicas semicondutoras entre dois eletrodos, construído a partir da sobreposição de camadas de diferentes filmes orgânicos, depositadas por evaporação térmica resistiva (capitulo 4). Em função do numero de camadas depositadas entre eletrodos, podem ser escolhidas diferentes arquiteturas para o dispositivo: monocamada, bicamadas, tricamadas e multicamadas.

Nesta dissertação, as arquiteturas utilizadas no trabalho foram: bicamadas e multicamadas. A Figura 2-3a apresenta uma estrutura básica de um OLED bicamada, que é constituído de camadas de: a) anodo injetor buracos de (oxido de índio dopado estanho ITO), b) transportadora de buracos (CTB), (c) material emissor (CE) que possui também propriedades de condução eletrônica e, por fim, (d) catodo de metal injetor de elétrons (AI)<sup>[7]</sup>.



Figura 2-3 Estruturas básicas de OLEDs a. Bicamadas e b. Multicamadas.

A Figura 2-3b mostra um OLED multicamadas, que apresentam as camadas: a) transportadoras de Elétrons (CTE) ou Buracos (CTB), com o objetivo de aperfeiçoar a região de recombinação, b) injetores de cargas (CIE camada injetora de elétrons, ou CIB camada injetora de buracos), são usados para aumentar a injeção de portadores dentro do dispositivo. Outras camadas têm a função de bloquear portadores, isto é, evitar que certo tipo de cargas seja transportada através dela. Estas camadas são conhecidas como Camadas Bloqueadoras de Elétrons (CBE) ou Buracos (CBB).

#### 2.4.2. Funcionamento de OLEDs

Nos OLEDs, a emissão de luz é obtida por excitação elétrica através dos buracos e dos elétrons injetados pelos eletrodos. Para entender esse processo faz-se um resumo esquemático das principais etapas, enumerando-as de 1-4 e acompanhando-as através da (Figura 2-4):

(1') e (1) Injeção de elétrons e de buracos: quando uma diferença de potencial é aplicada entre os eletrodos (anodo e catodo), os elétrons são injetados através do catodo e os buracos são injetados através do anodo.

(2<sup>°</sup>) e (2) Transporte de elétrons e de buracos: os elétrons são transportados através da camada CTE e os buracos são transportados através da camada CTB. Para os buracos o transporte se dá através dos orbitais ocupados, de maior energia HOMO e para os elétrons o transporte se dá através dos orbitais desocupados de menor energia LUMO. À medida que se movimentam através das camadas CTE e CTB formam-se estados excitados chamados

polarons<sup>[8]</sup>. Estes polarons são transportados por um mecanismo de *hopping* dentro dos níveis HOMO e LUMO.

(3) Recombinação de carga: os portadores de cargas (elétrons e buracos) movem-se através das camadas chegando a uma região de recombinação de carga CE, onde se origina uma quase partícula, chamada de éxciton.



Figura 2-4 Processo de eletroluminescência nos OLEDs.

(4) e (4') Emissão: a energia de excitação proveniente dos éxcitons pode ser transferida para os estados moleculares excitados de singleto e de tripleto do composto molecular EL, as quais são denominados éxcitons de singleto e tripleto, respectivamente. A luz é produzida na maioria dos compostos orgânicos fluorescentes pelo rápido decaimento dos estados moleculares excitados de singleto do composto EL, e a cor emitida depende da diferença de energia entre estes estados e o estado fundamental do composto EL.

# 2.4.3. Mecanismos de Injeção de cargas em OLEDs

Para o estudo da injeção dos portadores de carga, a interface eletrodo/camada orgânica é o foco do estudo. Quando um metal é colocado em contato direto com um semicondutor, ocorre uma transferência de cargas de um filme para o outro, criando-se uma barreira de potencial chamada barreira de Schottky<sup>[9]</sup>. Atualmente destacam-se dois processos: o de injeção tipo Fowler-Nordheim (injeção por tunelamento) e a do tipo Richardson-Schottky (Injeção Termiônica), os quais foram desenvolvidas para semicondutores inorgânicos. Os processos de injeção são dominados por uma barreira formada na interface entre as camadas orgânica e de metal. Esta última, por sua vez, é definida como a separação de energia do nível de Fermi E<sub>f</sub> do eletrodo e do HOMO ou do LUMO da camada orgânica.



**Figura 2-5** Representação da injeção por tunelamento tipo Fowler-Nordheim e a injeção termiônica, em uma estrutura metal/semicondutor-intrínseco/metal, onde  $\varphi$  corresponde a altura da barreira de potencial na interface metal/semicondutor e *V* ao potencial elétrico aplicado entre os eletrodos<sup>[10]</sup>.

Inicialmente, Fowler e Nordheim consideraram que os elétrons em um metal obedecem à estatística de Fermi-Dirac, através da qual, a probabilidade de transmissão por tunelamento quântico dos elétrons ocorre através de um potencial triangular, derivado da existência do campo elétrico na superfície do metal<sup>[11]</sup>. O mecanismo de injeção Fowler-Nordheim, é descrito por:

$$J = \left(rac{q^3 V^2 m_0}{8\pi h arphi m^*}
ight) exp\left(-rac{4(2m^*)^{0.5} arphi^{1.5}}{3\hbar qV}
ight)$$
 Equação 2-4

Onde  $m_0$  é a massa do elétron livre, m<sup>\*</sup> massa efetiva, h constante de Planck, V intensidade do campo elétrico,  $\phi$  altura da barreira de potencial na interface.

Da equação 2-4 pode-se observar que a densidade de corrente no caso da emissão de campo não depende da densidade de corrente; e que a emissão não depende da temperatura e sim do campo elétrico aplicado.

O processo de injeção termiônica ocorre quando elétrons do eletrodo possuem energia térmica suficiente para superar a barreira do potencial estabelecida na interface metal/semicondutor<sup>[12]</sup>, como é ilustrado na Figura 2-5. A densidade de corrente é descrita por:

$$J = rac{4\pi qmk}{h^3} T^2 exp\left(-rac{q\varphi}{kT}
ight) \left[exp\left(rac{qV}{kT}
ight) - 1
ight]$$
 Equação 2-5

Onde m é massa efetiva de elétrons (buracos); k é a constante Boltzman e T é a temperatura. Da equação 2-5 é possível obter a dependência da corrente termiônica com a temperatura e o campo elétrico aplicado.

### 2.4.4. Transporte de carga de materiais

O mecanismo de transporte de cargas nos OLEDs é influenciado pela mobilidade dos portadores de carga e pelo numero de armadilhas presentes nos materiais orgânicos. Geralmente, os compostos orgânicos possuem baixa mobilidade de elétrons, da ordem de 10<sup>-6</sup> cm<sup>2</sup>/(V.s), enquanto que a mobilidade dos buracos é alta, 10<sup>-4</sup> cm<sup>2</sup>/(V.s).

Na Figura 2-6, é possível observar o comportamento de uma curva de densidade corrente (J), em função do campo elétrico aplicado *E*. O uso do gráfico em escala logarítmica permite evidenciar os diversos modelos utilizados para o estudo de transporte de cargas em semicondutores orgânicos. Entre eles estão o ôhmico, corrente limitada por carga espacial (SCLC, Space Charge Limited Current), e a corrente limitada por cargas aprisionadas (TCL, Trapped Charge Limited Current).



**Figura 2-6** Comportamento elétrico da densidade de corrente versus campo elétrico E=V/d aplicado a um dispositivo OLED<sup>[13]</sup>.

> Lei de Ohm  $(j \propto V)$ : Considerando um arranjo eletrodo/semicondutor/eletrodo, que satisfaça as seguintes condições: i) os eletrodos sejam os mesmos, ii) o material semicondutor seja intrínseco,iii) ausência de armadilhas de portadores de carga (traps), e iv) baixos valores de tensão; espera-se que a densidade de corrente varie linearmente com a tensão aplicada<sup>[14]</sup>.

$$j = q \mu_n n_0 rac{V}{d}$$
 Equação 2-6

Onde q é a carga eletrônica,  $\mu_n$  mobilidade de elétrons,  $n_0$  densidade de carga livre gerada termicamente, d espessura do material orgânico, V voltagem aplicada ao dispositivo.

▶ Lei de Mott-Gurney ou de Chield ( $j \propto V^2$ ): quando a tensão aplicada é suficientemente grande, resulta em alta densidade de elétrons injetados, e a carga em excesso vai se formar nas proximidades do eletrodo injetor de elétrons, a densidade desses portadores é alta nesta região e sua carga diminui o campo elétrico local; como consequência, sendo a velocidade dos portadores proporcional ao campo elétrico, eles se movem lentamente nas proximidades do catodo. Diz-se então que existe uma carga espacial próxima ao catodo cujo campo elétrico limita o transporte dos elétrons naquele local e com isso limita também a corrente ou a condutividade elétrica do dispositivo. O processo acima descrito denomina-se de corrente limitada por carga espacial (SCLC)<sup>[15,16]</sup>.

$$j = rac{9}{8} \mu_n arepsilon rac{V^2}{d^3}$$
 Equação 2-7

Onde  $\varepsilon$  significa permissividade,  $\mu_n$  mobilidade de elétrons, d espessura do material orgânico e V voltagem aplicada ao dispositivo.

Limite de cargas aprisionadas TCL ( $j \propto V^{m+1}$ , m≥2): Com o incremento da tensão aplicada no dispositivo, o nível de Fermi move-se em direção ao LUMO graças ao aumento da densidade de elétrons injetados. As armadilhas que estão abaixo do nível de Fermi são preenchidas, reduzindo a quantidade de armadilhas vazias e aumentando a mobilidade efetiva dos elétrons.

$$J = N_{LUMO} \mu_n q^{1-m} \left(\frac{\varepsilon_m}{N_{m+1}}\right)^m \left(\frac{2m+1}{m+1}\right)^{m+1} \frac{V^{m+1}}{d^{2m+1}}$$
 Equação 2-8

Onde N<sub>LUMO</sub> corresponde a densidade de estados na banda LUMO,  $m = T_t/T$ onde  $T_t$  é a temperatura característica da distribuição exponencial de armadilhas dada por  $T_t = E_t/k$ ,  $E_t$ , que por sua vez corresponde, a energia característica das armadilhas.

A Figura 2-7, apresenta uma curva característica de um dispositivo Mg/Alq<sub>3</sub>/Mg, que demonstra um comportamento típico em função da densidade de corrente versus campo elétrico aplicado E=V/d, este dispositivo permite a injeção de um único tipo portador de carga. A partir do gráfico pode se visualizar três regiões: **Região A** compreende valores de campo elétrico maiores >80 kV/cm, onde a densidade de corrente é proporcional ao campo aplicado (Lei de Ohm  $j \propto V$ ); **Região B** compreende valores de campo elétrico na faixa de 80 ate 400 kV/cm, onde a densidade de corrente incrementada é proporcional a V<sup>8</sup> (TCL ( $j \propto V^{m+1}$ )). A **Região C** para campos elétricos maiores a 400 kV/cm, onde a densidade de corrente é proporcional a V<sup>2</sup> (Lei de Mott-Gurney ( $j \propto V^2$ )). Neste trabalho cerca de 100 dispositivos<sup>[17]</sup> foram construídos e as densidades de corrente estiveram compreendidas entre 10<sup>-10</sup> e 10<sup>-2</sup> A/cm<sup>2</sup> para campos aplicados entre 1kV/cm e 1 MV/cm.



**Figura 2-7** Densidade de corrente versus campo elétrico aplicado E=V/d para um dispositivo Mg/Alq<sub>3</sub>/Mg. Para baixa tensão aplicada o comportamento e ôhmico (A), com aumento da tensão o transporte limitado por cargas aprisionadas TCL (B), seguido do regime SCLC (C)<sup>[17]</sup>.

### 2.5. Eficiências dos OLEDs

Em OLEDs, os seguintes processos acontecem sucessivamente: A injeção de correntes de cargas opostas, a formação de éxcitons, e a emissão de luz durante a recombinação de elétrons e buracos. Durante a excitação elétrica um éxciton singleto spin total = 0 é gerado para cada três éxciton de tripleto spin total = 1 (0,25:0,75), geralmente o estado fundamental tem spin anti-simétrico com spin total S=0, de forma que o decaimento dos éxcitons de singleto seja permitido, a passo que o decaimento S=1 é proibido pelas regras de seleção (Figura 2-8). Assim, se a energia dos éxcitons de tripleto não puder ser utilizada para a luminescência do material, há uma limitação importante nos OLEDs fabricados cuja eficiência máxima é de 25%.



Figura 2-8 Diagrama esquemático do processo de eletroluminescência em um OLED.

Dependendo das propriedades do material os éxcitons podem interagir de formas diferentes, dentre os quais os éxcitons Mott-Wannier (MW) e os de Frenkel (Figura 2-9). No primeiro caso (MW), o material orgânico possui uma constante dielétrica alta, assim a interação coulombiana entre elétrons e buracos torna-se fraca, com um raio grande e uma baixa energia de ligação (na ordem 0.01eV) que se estende por vários sítios atômicos e movem-se com facilidade. Estes éxcitons não são observados à temperatura ambiente.

Para o caso dos éxcitons de Frenkel o material semicondutor possui baixa constante dielétrica. Neste caso, a interação colombiana entre o elétron e o buraco torna-se muito forte, o que faz com que estes estados localizados estejam fortemente interligados. Entre os átomos e as moléculas o raio é menor e tem grande energia de ligação (na ordem 0,1-1eV), assim estes éxcitons são bem mais estáveis à temperatura ambiente. A Figura 2-9 apresenta o comportamento eletroluminescente gerado pela recombinação sucessiva dos éxcitons do tipo Frenkel.



Figura 2-9 Tipos de éxcitons formados em materiais semicondutores orgânicos ou inorgânicos.

# 2.6. Diagrama de Cromaticidade (CIE)

As cores do espectro visível podem ser reproduzidas pela combinação criteriosa de três componentes monocromáticas. A *Comission Internacionale l'Eclairage* (CIE) adota um colorímetro padrão que representa os atributos de cor através de um diagrama tridimensional. Os valores cartesianos deste diagrama tridimensional derivam-se dos estímulos espectrais  $x(\lambda)$ ,  $y(\lambda) e z(\lambda)$  (Figura 2-10), os quais são visualizados pelo olho humano devido à incidência de luz. A curva  $y(\lambda)$  corresponde à resposta fotônica pelo olho humano da cor verde e a normalização desta curva corresponde a um pico em 550nm<sup>[18]</sup>. As curvas  $z(\lambda) e x(\lambda)$  correspondem a cor azul e vermelha, respectivamente.



**Figura 2-10** Curvas das cores padrões CIE para  $X(\lambda)$ ,  $Y(\lambda) \in Z(\lambda)$ .

A partir destas curvas, os valores tri-estímulos X, Y e Z são assim definidos:

 $X = \int \Phi(\lambda) \overline{x}(\lambda) d\lambda; \quad Y = \int \Phi(\lambda) \overline{y}(\lambda) d\lambda; \quad Z = \int \Phi(\lambda) \overline{z}(\lambda) d\lambda \quad \text{Equação 2-9}$ 

onde  $\phi(\lambda)$  corresponde à curva de emissão da fonte de luz. As coordenadas de cores x, y e z do CIE são definidas pelas seguintes equações:

$$x = \frac{X}{X+Y+Z};$$
  $y = \frac{Y}{X+Y+Z};$   $z = \frac{Z}{X+Y+Z}$  Equação 2-10

Normalmente apresentam-se apenas os valores das variáveis x e y, pois a variável z pode ser determinada a partir destes valores. Desta forma, o mapa de cor pode ser expresso como projeção bidimensional num plano xy; o qual definese pelo diagrama de cromaticidade CIE (Figura 2-11)<sup>[19]</sup>.

Calculam-se as coordenadas *xy* a partir dos espectros de emissão obtidos e no que se refere a dispositivos multicoloridos, tais coordenadas devem localizar-se nos vértices do diagrama CIE, os quais correspondem as cores primárias. Tais cores correspondem ao vermelho, verde e azul; e através da combinação criteriosa destas três componentes podem-se obter todas as cores do espectro visível.



Figura 2-11 Diagrama de cromaticidade CIE ilustrando as coordenadas de cores da região espectral visível.

## Referências

[1] Pavia, D. L. et al. Introdução à espectroscopia 4. 2010.

[2] Skoog, D. A.; Leary, J. J. **Principles of Instrumental Analysis 4.** Bookman, 1992.

[3] Quirino, W. G. Tese de Doutorado, PUC-Rio, 2007.

[4] Mueller, G. Electroluminescence I, Semiconductor and Semimetals 64, Acad. Press, 2000.

 [5] Baldo, M. A.; Thompson M. E.; Forrest S. R. Phosphorescent materials for application to organic light emitting devices. Pure and Applied Chemistry 71, p. 2095-2105, 1999.

[6] Tsuboi, T. Electronic states of phosphorescent molecules Ir(ppy)<sub>3</sub> and PtOEP used in organic light emitting diodes. Journal of Luminescence 119, p. 288-292, 2006.

[7] Teixeira, K. Dissertação de Mestrado, PUC-Rio, 2010.

[8] Stafstrom, S. et al. Polaron lattice in highly conducting polyaniline: Theoretical and optical studies. Physical Rewiew Letters. 59, p. 1464-1467, 1987.

[9] Rezende, S. A. Física de materiais e dispositivos eletrônicos Edit. UFPR, 1996.

[10] Paredes, Y. Tese de doutorado, PUC-Rio, 2012.

[11] Arkhipov, V. I. et al. Charge injection into light-emitting diodes: Theory and experiment. Journal of Applied Physics 84, p. 848-856, 1998.

[12] Franky, S. Organic Electronics Materials Processing Devices and Appliations, 2010.

[13] http://ceot.ualg.pt/OptoEl/theory/2terminal/

[14] Lessman, R. Dissertação de Mestrado, Curitiba, 2005.

[15] Lampert, M.A.; Mark, P. Current injection in solids, 1970.

[16] Burrows, P. E., et al. Relationship between electroluminescence and current transport in organic heterojunction light-emitting devices. Journal of Applied Physics. 79, p. 7991-8006, (1996).

[17] kiy, M. Observation of the Mott–Gurney law in tris (8-hydroxyquinoline) aluminum films. Applied Physics Letters 80, p. 1198-1200, 2002.

[18] Ono, Y. A.; Electroluminescent Displays, World Scientific: Singapore, 1995.

[19] http://www.rpi.edu/~schubert/Light-Emitting-Diodes-dotorg/chap10/F10, 2004