



Carlos Augusto Federico de Faria Rocha Costa

**Projeto de Diodos Orgânicos Emissores de Luz
com o Auxílio de Técnicas da Inteligência
Computacional**

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica.

Orientador: Prof. Marco Aurélio C. Pacheco

Co-Orientador: Prof. Marco Cremona

Rio de Janeiro
Maio de 2011



Carlos Augusto Federico de Faria Rocha Costa

**Projeto de Diodos Orgânicos Emissores de Luz
com o Auxílio de Técnicas da Inteligência
Computacional**

Dissertação apresentada como requisito parcial para
obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica
pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia
Elétrica da PUC-Rio. Aprovada pela comissão
examinadora abaixo assinada

Prof. Marco Aurélio C. Pacheco
Orientador

Departamento de Engenharia Elétrica - PUC-Rio

Prof. Marco Cremona
Co-Orientador

Departamento de Engenharia Elétrica – PUC-Rio

Prof^a. Karla Tereza Figueiredo Leite

Departamento de Engenharia Elétrica – PUC-Rio

Prof. Omar Paranaíba Vilela Neto
UFMG

Prof. André Vargas Abs da Cruz
Pesquisador do ICA – DEE/PUC-Rio

Prof. José Eugênio Leal
Coordenador Setorial do Centro
Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 30 de Maio de 2011

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total o parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Carlos Augusto Federico de Faria Rocha Costa

Graduou-se em Engenharia Elétrica com ênfase em Automação e Controle pela Universidade Santa Úrsula em 2007.

Ficha Catalográfica

Costa, Carlos Augusto Federico de Faria Rocha

Projeto de diodos orgânicos emissores de luz com o auxílio de técnicas da inteligência computacional / Carlos Augusto Federico de Faria Rocha Costa ; orientador: Marco Aurélio C. Pacheco ; co-orientador: Marco Cremona. – 2011.

151 f. : il. color. ; 30 cm

Dissertação (mestrado)—Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Elétrica, 2011.

Inclui bibliografia.

1. Engenharia elétrica – Teses. 2. OLEDs. 3. Inteligência computacional. 4. Redes neurais artificiais. 5. Algoritmos genéticos. 6. Otimização por colônia de formigas. I. Pacheco, Marco Aurélio C. II. Cremona, Marco. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Elétrica. IV. Título.

CDD: 621.3

Aos meus pais, Antonio Augusto e Rosane,
às minhas irmãs, Ana Carolina e Isabella
e à minha noiva, Mara Vanessa

Agradecimentos

Ao CNPq, pelo apoio financeiro, e à PUC-Rio, pelos auxílios concedidos.

Ao meu orientador, Professor Marco Aurélio C. Pacheco, por ter me apoiado e acreditado na minha capacidade.

Ao meu co-orientador, Professor Marco Cremona, pela paciência, pela receptividade e pelos conselhos.

À minha estimada Professora Karla Figueiredo, pelo acompanhamento e pela confiança.

Ao demais professores pelos ensinamentos.

Ao amigo Omar Paranaíba, pelo suporte e pelas instruções.

Aos amigos Douglas, Reinaldo, Iury, Bernardo, Manoela, pela ajuda que prestaram durante esse tempo, cada um a seu modo.

Aos amigos Yolanda, Juan, Rafael, Beatriz, do Departamento de Física, por terem me assistido na parte experimental dos OLEDs.

Aos meus grandes amigos Leonardo, Christiane, Fernanda, Gabriela e Eliezer, pelo amparo espiritual.

Aos meus pais, pelo amor incondicional e a presença constante.

Às minhas irmãs, por estarem comigo sempre.

À minha futura esposa, Mara Vanessa, pelo amor, pela determinação e pela força para realizar este projeto em todos os momentos.

A Deus, por ter me dado força e coragem para vencer este desafio.

Resumo

Costa, Carlos Augusto Federico de Faria; Pacheco, Marco Aurélio C. **Projeto de Diodos Orgânicos Emissores de Luz com o Auxílio de Técnicas da Inteligência Computacional**. Rio de Janeiro, 2011. 155 p. Dissertação de Mestrado – Departamento de Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Esta dissertação trata da investigação, simulação e otimização da estrutura de Diodos Orgânicos Emissores de Luz Multicamadas (ML-OLEDs) através da utilização de técnicas da Inteligência Computacional. Além disso, um desses métodos, chamado Otimização por Colônia de Formigas (ACO), foi implementado com base em um modelo proposto na literatura e aplicado pela primeira vez na otimização de diodos orgânicos. OLEDs são dispositivos optoeletrônicos nanométricos fabricados a partir de materiais semicondutores orgânicos. Ao contrário das tecnologias tradicionais, eles conjugam elevada luminescência e baixo consumo energético. Na fabricação de um OLED, o número configurações possíveis é quase ilimitado, em função da quantidade de parâmetros que se pode variar. Isso faz com que determinação da arquitetura ótima torne-se uma tarefa não trivial. Para simular os OLEDs foram empregados dois modelos distintos de simulação. Assim, as Redes Neurais Artificiais (RNA) foram empregadas com o objetivo de emular um dos simuladores e acelerar o cálculo da densidade de corrente. Os Algoritmos Genéticos (AG) foram aplicados na determinação dos valores ótimos de espessura das camadas, mobilidades dos portadores de carga e concentração dos materiais orgânicos em OLEDs com duas camadas, enquanto o ACO foi aplicado para encontrar os valores de concentração em OLEDs com duas e cinco camadas, constituindo assim três estudos de caso. Os resultados encontrados foram promissores, sobretudo no caso das espessuras, onde houve uma confirmação experimental do dispositivo com duas camadas.

Palavras-chave

OLEDs; inteligência computacional; redes neurais artificiais; algoritmos genéticos; otimização por colônia de formigas.

Abstract

Costa, Carlos Augusto Federico de Faria; Pacheco, Marco Aurélio C. (Advisor). **Design of Organic Light-Emitting Diodes Supported by Computational Intelligence Techniques**. Rio de Janeiro, 2011. 155 p. MSc. Dissertation.– Departamento de Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

This dissertation deals with the research, simulation and optimization of the structure of Multilayer Organic Light Emitting Diodes (ML-OLEDs) by using Computational Intelligence techniques. In addition, one of these methods, called Ant Colony Optimization (ACO), was implemented based on a model proposed in the literature and applied for the first time in the optimization of organic diodes. OLEDs are nanometric optoelectronic devices fabricated from organic semiconducting materials. Unlike traditional technologies, they combine high luminance and low power consumption. In the manufacturing of an OLED, the number of possible configurations is almost unlimited due to the number of parameters that can be modified. Because of this the determination of the optimal architecture becomes a non-trivial task. Two different simulation models were used to simulate the OLEDs. Thus, the Artificial Neural Networks (ANN) were employed in order to work as the proxy of the commercial simulator and to accelerate the calculation of the current density. The Genetic Algorithms (GA) were applied to determine the optimal values of thickness of the layers, the charge carrier mobility and the concentration of the organic materials in OLEDs with two layers, while the ACO was applied to find the values of concentration in OLEDs with two and five layers, thus establishing three case studies. The employed strategy has proved to be promising, since it has shown good results for two case studies, especially for the optimization of the thickness, where there was an experimental confirmation of the bilayer device.

Keywords

OLEDs; computational intelligence; artificial neural networks; genetic algorithms; ant colony optimization

Sumário

1. Introdução	18
1.1. Motivação	18
1.2. Objetivos	22
1.3. Descrição do Trabalho	23
1.4. Organização da Dissertação	24
2. Diodos Orgânicos Emissores de Luz (OLEDs)	26
2.1. Introdução	26
2.2. Aspectos Básicos	30
2.3. Tipos de Arquitetura	32
2.4. Funcionamento	36
2.5. Características dos Materiais Orgânicos	39
2.5.1. Propriedades de Transporte	39
2.5.2. Propriedades de Emissão	42
2.6. Medidas de Eficiência	48
2.6.1. Eficiência Quântica Externa	48
2.6.2. Eficiência de Corrente	50
2.6.3. Eficiência de Potência	50
3. Modelos de Simulação das Propriedades Elétricas de OLEDs	52
3.1. Introdução	52
3.1.1. Equação de Densidade de Corrente	53
3.1.2. Equação da Continuidade	54
3.1.3. Equação da Poisson	55
3.2. ML-OLEDs com Blendas de Materiais Orgânicos	56
3.3. SimOLED: Módulo Elétrico	59
3.3.1. Aspectos Gerais	59
3.3.2. Dispositivo Monocamada	61
3.3.3. Dispositivo Multicamada	64
3.3.4. Exemplos de Dispositivos Simulados	66

3.3.5. Simulação x Experimental	73
4. Técnicas da Inteligência Computacional	83
4.1. Redes Neurais Artificiais (RNA)	83
4.1.1. Estrutura de uma RNA	84
4.1.2. Função de Ativação	85
4.1.3. Topologia	86
4.1.4. Tratamento de dados	88
4.1.5. Treinamento da RNA	89
4.2. Algoritmos Genéticos	91
4.2.1. Representação	93
4.2.2. Avaliação	94
4.2.3. Operadores	94
4.3. Algoritmo de Colônia de Formigas	95
4.3.1. Experimentos com Formigas Reais	96
4.3.2. Formigas Artificiais	97
4.3.3. Problemas de Representação Real	99
4.3.4. Estrutura, Inicialização e Atualização da Matriz de de Soluções	102
4.3.5. Construção de Soluções Probabilísticas	103
5. Projeto de OLEDs com o Auxílio de Técnicas da IC	106
5.1. Descrição do Problema	106
5.2. RNAs como Aproximadores do SimOLED para o Cálculo da Densidade de Corrente	110
5.2.1 Configuração das Simulações	110
5.2.2 Análise e Tratamento de Dados	112
5.2.3. Configurações das Redes Neurais	114
5.3. Métodos de Otimização	115
5.3.1. Características da Otimização com Algoritmos Genéticos	115
5.3.2. Estrutura e Funcionamento do Algoritmo de Colônia de Formigas	117

6. Estudos de Caso e Discussão	122
6.1. Otimização das Espessuras das CTB e CTE em um OLED NPB/Alq3	122
6.2. Otimização da Mobilidade de Buracos na CTB e de Elétrons na CTE em um OLED Bicamada NPB/Alq3	128
6.3. Determinação dos Perfis de Concentração MTE/MTB em um ML-OLED com Blendas na Camada de Emissão	131
6.3.1. Cinco Camadas de Blendas	133
6.3.2. Duas Camadas de Blendas	135
7. Conclusões e Trabalhos Futuros	138
8. Referências Bibliográficas	141

Lista de Figuras

2.1 Estrutura química da acridina, do antraceno e do tetraceno.	27
2.2 Histórico da evolução na eficiência de OLEDs e LEDs de 1965 a 2010.	30
2.3 Estrutura de um OLED.	31
2.4 Comparação entre as dimensões de um OLED e as dimensões de átomos e moléculas, nanotubos de carbono, vírus, hemácias e fios de cabelo.	31
2.5 Estrutura de um OLED monocamada.	32
2.6 Estrutura de um OLED bicamada.	33
2.7 Estrutura de um OLED tricamada.	34
2.8 Estrutura geral de um ML-OLED.	34
2.9 Estrutura de um ML-OLED com blendas de MTE e MTB	35
2.10 Injeção de buracos e elétrons.	37
2.11 Transporte de buracos e elétrons.	37
2.12 Formação de pares elétron-buraco.	38
2.13 Recombinação de portadores de carga e emissão de luz.	38
2.14 Estrutura química do NPB e do TPD.	40
2.15 Estrutura química do Alq3, Gaq3 e Inq3	40
2.16 Transporte de carga nos compostos orgânicos	41
2.17 Representação dos estados de singleto e tripleto	42
2.18 Esquema representando os éxcitons de Wannier-Mott e éxcitons de Frenkel.	45
2.19 Diagrama esquemático mostrando os processos que ocorrem desde a formação do éxciton até a emissão.	49
2.20 Modelo clássico para distribuição de luz no interior de um OLED.	50
3.1 Configuração do dispositivo com blendas de materiais orgânicos.	57
3.2 Perfil de concentração de NPB e Alq3 nas camadas.	57
3.3 Representação esquemática da interface entre duas camadas orgânicas.	65

3.4 de um éxciton através da interface entre duas camadas orgânicas.	66
3.5 Representação do OLED monocamada no SimOLED.	67
3.6 Densidade de éxcitons no interior do OLED monocamada.	68
3.7 Representação do OLED bicamada no SimOLED.	69
3.8 Densidade de éxcitons no interior do OLED bicamada.	70
3.9 Representação do OLED tricamada no SimOLED.	71
3.10 Densidade de éxcitons no interior do OLED tricamada	72
3.11 ML-OLED proposto pelo especialista.	74
3.12 Zona de recombinação de OLED proposto pelo especialista.	76
3.13 ML-OLED proposto pelo AG.	76
3.14 Zona de recombinação de OLED proposto pelo AG.	77
3.15 Simulação x experimental dos OLEDs NPB (35 nm)/Alq3 (65 nm).	79
3.16 Simulação x experimental dos OLEDs NPB (45 nm)/Alq3 (55 nm)	79
3.17 Simulação x experimental dos OLEDs NPB (55 nm)/Alq3 (45 nm).	81
3.18 Simulação x experimental dos OLEDs NPB (65 nm)/Alq3 (35 nm).	82
4.1 Representação gráfica de um neurônio artificial.	85
4.2 Estrutura de uma rede neural não recorrente.	87
4.3 Exemplo de uma rede neural recorrente com duas entradas e duas saídas.	88
4.4 Diagrama esquemático do treinamento supervisionado de uma rede neural.	91
4.5 Estrutura básico de um Algoritmo Genético.	93
4.6 Exemplo do comportamento de formigas reais na busca por alimento.	95
4.7 Distribuições discreta e contínua de probabilidade.	101
4.8 Estrutura da matriz de soluções.	103
5.1: Estrutura química do (a) α -NPB e (b) β -NPB.	111

5.2 Representação esquemática do indivíduo no 1º estudo de caso.	116
5.3 Representação esquemática do indivíduo no 2ª estudo de caso.	116
5.4 Estrutura básica do Algoritmo de Colônia de Formigas.	118
5.5 Os quatro possíveis movimentos das formigas em um espaço bidimensional.	119
5.6 Exemplo de como criar uma solução a partir de um vetor de concentrações.	120
6.1 Média dos melhores indivíduos por geração para o experimento A1.	127
6.2 Média dos melhores indivíduos por geração para o experimento B1.	128
6.3 Diminuição do valor de $V/J0.5$ dos OLEDs com variação de espessura do β -NPB.	137
6.4 Média dos melhores indivíduos por geração para as mobilidades.	133

Lista de Tabelas

1.1 Comparação entre as tecnologias de emissão de luz existentes.	19
3.1 Tensão, densidade de corrente e luminância do exemplo 1.	67
3.2 Tensão, densidade de corrente e luminância do exemplo 2.	69
3.3 Tensão, densidade de corrente e luminância do exemplo 3.	72
3.4 Configurações dos dispositivos simulados nos experimentos 1 e 2.	73
3.5 Configurações dos dispositivos simulados nos experimentos 3, 4, 5 e 6.	73
3.6 Parâmetros de simulação do dispositivo não otimizado.	75
3.7 Parâmetros das blendas da região de emissão.	77
3.8 Resultados experimentais e de simulação.	78
3.9 Valores das densidades de corrente (mA/cm^2) obtidos experimentalmente e por simulação para uma faixa de tensão de 2 a 15 V.	80
3.10 Erros relativos ao ajuste entre as simulações e os dados experimentais.	81
5.1 Parâmetros dos materiais utilizados nas simulações.	111
5.2 Faixas de variação dos parâmetros de simulação.	112
5.3 Avaliação da base de dados de espessura.	113
5.4 Avaliação da base de dados de mobilidades.	113
5.5 Faixa de tensão de cada cluster.	114
5.6 Configurações e erros de treinamento, validação e teste das quatro melhores redes neurais para a variação das espessura das CTE e CTB.	115
5.7 Configurações e erros de treinamento, validação e teste das quatro melhores redes neurais para a variação das MIE na CTE e MIB na CTB.	115
6.1 Parâmetros utilizados na otimização com AGs.	124
6.2 Resultados da otimização realizada no 1º estudo de caso.	126
6.3 Resultado das otimizações AG.	126

6.4 Parâmetros utilizados na otimização com AGs.	129
6.5 Dados da Simulação dos dispositivos otimizados no 2º estudo de caso.	130
6.6 Parâmetros utilizados no ACO.	132
6.7 Parâmetros utilizados no AG.	132
6.8 Comparação entre a otimização de $V/J^{0.5}$ realizada neste trabalho e em [14,16].	133
6.9 Perfis de concentração encontrados pelo ACO e pela literatura [14,15].	133
6.10 Quantidade de MTE em valores percentuais dos perfis de concentração apresentados na Tab. 6.9.	134
6.11 Comparação entre a otimização de $V/J^{0.5}$ para os dispositivos de cinco e duas camadas de blendas.	135
6.12 Comparação entre os perfis de concentração encontrados para os dispositivos de duas e cinco camadas de blendas.	136

Siglas

ACO	Otimização por Colônia de Formigas
AG	Algoritmos Genéticos
CBB	Camada bloqueadora de buracos
CBE	Camada bloqueadora de elétrons
CEL	Camada eletroluminescente
CIB	Camada injetora de buracos
CIE	Camada injetora de elétrons
CTB	Camada transportadora de buracos
CTE	Camada transportadora de elétrons
EQE	Eficiência quântica externa
EQI	Eficiência quântica interna
HOMO	Orbital molecular ocupado de maior energia
IC	Inteligência Computacional
ITO	Óxido de Índio e Estanho
LCD	Display de cristal líquido
LED	Diodo Emissor de Luz
LUMO	Orbital molecular desocupado de menor energia
LM	Levenberg-Marquardt
OFET	Transistor de Efeito de Campo Orgânico
EO	Eletrônica Orgânica
OLED	Diodo Orgânico Emissor de Luz
OPV	Células Fotovoltaicas Orgânicas
MAPE	Erro percentual médio absoluto
MIB	Mobilidade Intrínseca de Buracos
MIE	Mobilidade Intrínseca de Elétrons
MTB	Material transportador de buracos
MTE	Material transportador de elétrons
NCE	Neurônio na camada escondida
PSO	<i>Particle Swarm Optimization</i>
RNA	Redes Neurais Artificiais

*Imagination will often carry us to worlds that never were.
But without it we go nowhere.*

Carl Sagan