

1

Introdução

1.1

Motivação

Diferentemente da Eletrônica tradicional, que utiliza materiais inorgânicos, como silício, germânio e cobre, a Eletrônica Orgânica (EO) emprega materiais orgânicos, tais como plásticos (polímeros) condutores e pequenas moléculas, que contém basicamente carbono e hidrogênio, além de outros elementos não metálicos, como oxigênio e nitrogênio. Dentre as suas principais vantagens estão a fabricação de dispositivos mais leves, flexíveis, com maior eficiência energética e o menor custo de produção.

A EO engloba quatro grandes áreas de aplicação: Diodos Emissores de Luz (OLEDs), Células Fotovoltaicas (OPV), Transistores de Efeito de Campo (OFET) e Spintrônica [1]. Dentre elas, a área dos OLEDs foi aquela que obteve os maiores avanços nas últimas duas décadas, devido principalmente à maior eficiência de emissão e eficiência de potência desses dispositivos. Além disso, como as propriedades optoeletrônicas dos compostos orgânicos podem ser facilmente alteradas através de processos químicos de dopagem, os OLEDs podem emitir luz em uma gama variada de comprimentos de onda [2]. Essas características fazem com que eles se destaquem frente a outras tecnologias, como as lâmpadas incandescentes e fluorescentes e mesmo em relação aos LEDs (Tab. 1.1).

As telas construídas com OLED possuem inúmeras vantagens se comparados aos tradicionais displays de cristal líquido (LCDs), tais como: ângulo de visão de quase 180°, elevada faixa de temperatura de operação, tempo de resposta mil vezes menor, além de serem extremamente finas – com poucos milímetros de espessura – ou até mesmo flexíveis [3] e transparentes, podendo ser dobradas e enroladas, sendo assim mais resistentes a danos por impacto.

	OLED	Lâmpada incandescente	Lâmpada fluorescente	LED
Ilustração				
Princípio de emissão de luz	Emite luz pela aplicação de uma diferença de potencial a um material semiconductor orgânico.	Emite luz através da passagem de uma corrente elétrica por um filamento metálico.	Raios ultravioletas gerados por uma corrente elétrica colidem com um material fluorescente para gerar luz visível.	Emite luz pela aplicação de uma diferença de potencial a um semiconductor inorgânico.
Características	<ul style="list-style-type: none"> • Ilumina superfícies com áreas extensas; • Eficiência energética; • Pouca geração de calor; • É fino e leve; • Flexibilidade; • Adaptável ao ambiente. 	<ul style="list-style-type: none"> • Iluminação de pequenas áreas (fonte de luz pontual); • Alto consumo energético; • Elevada geração de calor; • Se aproxima da iluminação natural. 	<ul style="list-style-type: none"> • O tamanho da área iluminada fica entre a do OLED e da lâmpada incandescente; • Eficiência energética; • Emprega substâncias prejudiciais à saúde. 	<ul style="list-style-type: none"> • Ilumina pequenas áreas (fonte de luz pontual); • Eficiência energética; • Tempo de vida elevado; • Facilidade na redução do tamanho; • É adaptável ao ambiente.
Usos	Iluminação decorativa, para casa, escritório, interior de carros e anúncios.	Luz fotográfica, espaço interiores tais como sala de jantar, banheiro, etc.	Espaço interiores, escritórios, estabelecimentos comerciais.	Iluminação indireta, iluminação do piso, holofotes para pequenos espaços, etc.

Tabela 1.1: Comparação entre as principais tecnologias de emissão de luz [4].

O segmento de displays é um negócio que movimenta bilhões de dólares por ano e os OLEDs estão ganhando cada vez mais espaço nesse setor. Segundo relatório publicado pelo grupo *Markets and Markets* [5], “espera-se que o mercado global de displays de OLEDs cresça mais de 3 bilhões de dólares até 2015”. Ainda, conforme exposto no *Display Search* [6], “há um potencial de crescimento de 126% ao ano para a demanda de TVs de OLED até 2015”. Segundo relatório recente assinado pelos analistas de mercado e tecnologia do *Nanomarkets*, “o mercado de iluminação de OLEDs deve gerar uma receita em torno de 4,8 bilhões de dólares até 2016” [7]. No mercado de iluminação, além da redução no consumo energético, a flexibilidade permite o desenvolvimento de

luminárias com os mais diversos formatos e tamanhos, que podem ser aplicadas em todo tipo de superfície, podendo inclusive ser costuradas em roupas.

Atualmente, ainda existem algumas dúvidas sobre como será a produção em grande escala dos produtos derivados dos OLEDs, sobre montagem das instalações para esse propósito, os métodos de fabricação utilizados e o modelo de negócios. Acredita-se que haverá uma série de pequenas firmas produtoras de OLEDs, cujo objetivo serão nichos específicos de mercados, como iluminação para a área médica ou mercados de luxo. Assim, elas irão optar por modelo de mercado do tipo *fabless*, ou seja, elas irão terceirizar o serviço de fabricação. Isso certamente criará oportunidade para as chamadas “fundições” na indústria de semicondutores, mas que poderá receber outro nome na indústria de OLEDs [8].

Na fabricação de um OLED, além do número de configurações possíveis ser muito grande, em função da quantidade de parâmetros que se pode variar, os dispositivos correspondentes da cada uma dessas configurações possuem propriedades optoeletrônicas distintas, tais como as relação tensão-corrente-luminância ($V_x J_x L$). Em relação à sua arquitetura, pode-se modificar, por exemplo, o número e a espessura de camadas, o tipo de material orgânico e a sua concentração - no caso de blendas de dois ou mais compostos - e a rugosidade do filme orgânico. As propriedades físico-químicas de interesse dos materiais orgânicos são as mobilidades dos portadores de carga e as energias dos orbitais HOMO e LUMO. Tal estudo permite verificar de que maneira essas propriedades influenciam no desempenho do OLED e também pode auxiliar na síntese desses compostos. Portanto, melhorar a eficiência dos OLEDs não é uma tarefa trivial e envolve diversos elementos [2]. Além disso, não é viável realizar os experimentos em quantidade suficiente para abarcar todas as possibilidades por duas razões: (i) os recursos e o tempo são limitados e (ii) nem todos os dispositivos serão eficientes. Uma alternativa recomendável para investigar as características optoeletrônicas dos OLEDs é a utilização de simuladores, pois essas ferramentas permitem examinar um número praticamente ilimitado de configurações a um custo

bastante reduzido. Apesar disso, dependendo da complexidade do modelo analítico empregado e dos parâmetros variados, as simulações tornam-se mais lentas. Nesse caso, uma busca aleatória pela melhor configuração não é a estratégia mais vantajosa, devido à quantidade de simulações necessária. A solução para procurar a melhor configuração de forma eficiente reside na aplicação das técnicas da Inteligência Computacional (IC), uma vez que elas já foram utilizadas de forma bem sucedida no projeto, otimização, simulação e predição de propriedades de nanoestruturas [9].

A IC compreende um conjunto de métodos inspirados no comportamento inteligente que existe de forma intrínseca nos sistemas biológicos. Dentre eles podemos citar as Redes Neurais Artificiais (RNA), os Algoritmos Genéticos (AG) e o Algoritmo de Otimização de Colônia de Formigas (ACO), que foram empregadas neste trabalho. As RNAs são modelos matemáticos inspirados no comportamento do cérebro humano e, de forma análoga, são capazes de aprender, memorizar e generalizar o conhecimento. Isso permite a realização de tarefas complexas como a classificação de padrões, a previsão de séries temporais e a aproximação de funções não-lineares. AG e ACO são algoritmos estocásticos de busca e otimização. O primeiro baseia-se nos conceitos de sobrevivência do mais apto da teoria darwiniana da evolução e na herança genética. O ACO é uma técnica inspirada no comportamento social de uma colônia de formigas reais e de sua habilidade de encontrar o caminho mais curto entre o formigueiro e a fonte de alimento. Eles são considerados algoritmos inteligentes pela sua habilidade de lidar com problemas para os quais não existe forma algoritmo exato para se obter a solução [10] ou que são considerados complexos para outros de métodos de otimização, tais como os métodos de subida e descida por gradiente que buscam, respectivamente, o máximo e o mínimo de uma função, através do cálculo da derivada.

A otimização da estrutura dos OLEDs não foi um tema muito examinado até o presente momento, sendo a maioria dos trabalhos existentes na literatura de cunho experimental [11]. A utilização de simuladores constitui um diferencial na investigação das propriedades

desses dispositivos, conforme explicado anteriormente. Nesse contexto, as RNAs podem ser empregadas na emulação dos simuladores para um número limitado de parâmetros. A principal vantagem é que as RNAs são mais rápidas que os simuladores, pois elas não precisam resolver sistemas de equações diferenciais, que descrevem matematicamente a dinâmica de sistemas físicos [12]. Os AGs já foram aplicados com sucesso na síntese automática de circuitos convencionais e não convencionais [13], em diferentes aplicações (digital, analógico, VLSI, CMOS, etc.), na otimização da concentração de materiais orgânicos em OLEDs com blendas na região de emissão [14] a partir de um modelo analítico simplificado [15,16] e no projeto de polímeros condutores [17]. O ACO também foi aplicado a esse último problema [18], obtendo soluções semelhantes ao do AGs. Com base nesses resultados, seria interessante empregar AGs no projeto de OLEDs variando outros parâmetros importantes, referentes à sua arquitetura, com o auxílio de um modelo matemático mais rigoroso, e testar o desempenho do ACO no problema dos OLEDs com blendas e compará-lo com o AG.

1.2

Objetivos

Sabendo-se que as características optoeletrônicas de um ML-OLED são influenciadas pela sua arquitetura e pelas propriedades físico-químicas dos compostos orgânicos, objetiva-se: (i) investigar como os parâmetros descritos anteriormente influenciam na eficiência dos diodos orgânicos contendo apenas materiais orgânicos puros ou blendas de materiais orgânicos tradicionalmente encontrados na literatura, como Alq3 e NPB; (ii) projetar estruturas com duas e cinco camadas que possuam eficiência superior a estruturas semelhantes da literatura; (iii) implementar um ACO com base em um modelo proposto na literatura; (iv) aplicar RNAs, AGs e ACO no projeto e simulação dos OLEDs citados acima; e (v) comparar os resultados obtidos pelos por AG e ACO para os OLEDs com blendas.

1.3

Descrição do Trabalho

Este trabalho foi desenvolvido conforme as seguintes etapas:

- 1. Um estudo sobre os fundamentos teóricos dos Diodos Orgânicos Emissores de Luz (OLEDs).** Primeiramente foi feita uma pesquisa bibliográfica focada nos aspectos considerados relevantes no que concerne à teoria dos OLEDs.
- 2. Um estudo das técnicas de Inteligência Computacional utilizadas: Redes Neurais Artificiais, Algoritmos Genéticos e Otimização por Colônia de Formigas.** Nessa etapa foi realizado um estudo à respeito dessas técnicas e foram reunidas as informações relevantes em relação as mesmas.
- 3. Um estudo dos modelos de simulação de OLEDs: (i) com blends de materiais orgânicos e (ii) SimOLED.** Essa etapa foi essencial para se conhecer as principais características de ambos os modelos, seu funcionamento e suas limitações, além de esclarecer como ele poderiam se adequar aos propósitos desta pesquisa.
- 4. Realização de vários experimentos com o SimOLED, de forma a construir duas bases de dados, necessárias para efetuar o treinamento da RNA.** Na primeira base variou-se a espessura das camadas orgânicas e na segunda, variou-se a mobilidade dos portadores de carga. Foi feita uma análise em ambas as bases com o intuito de investigar a relação entre os parâmetros de síntese do dispositivo e a densidade de corrente medida. Essa RNA foi empregada para emular o comportamento do SimOLED e assim atuar como função de avaliação para o AG. Essa abordagem foi necessária, pois não houve um modo de interligar o simulador e o AG.
- 5. Implementação do Algoritmo de Colônia de Formigas.** Esse algoritmo foi implementado em linguagem de programação do

software Matlab, com base no modelo utilizado em um outro problema de otimização de polímeros condutores [18].

- 6. Realização de estudos de casos.** As otimizações realizadas por meio das técnicas de inteligência computacional foram divididas em três estudos de casos: (i) Otimização das Espessuras das CTB e CTE em um OLED NPB/Alq₃; (ii) Otimização da Mobilidade de Buracos na CTB e de Elétrons na CTE em um OLED Bicamada NPB/Alq₃ (iii) Determinação dos Perfis de Concentração MTE/MTB em um ML-OLED com Blendas na Camada de Emissão.

1.4

Organização da Dissertação

Esta dissertação está dividida em sete capítulos adicionais, os quais serão apresentados a seguir:

O capítulo 2 faz uma breve introdução sobre a história dos OLEDs e discorre à respeito da teoria necessária para a compreensão deste trabalho, tais como suas configurações, seu funcionamento, as propriedades de transporte e emissão dos materiais orgânicos transporte e recombinação de portadores e as medidas de eficiência de OLEDs.

O capítulo 3 apresenta as equações necessárias para simular as características elétricas de diodos orgânicos, assim como os dois modelos de simulação empregados neste trabalho: (i) um modelo matemático simplificado para as propriedade elétricas de um OLED com blendas de materiais orgânicos e (ii) um simulador comercial chamado SimOLED (módulo elétrico), que permite calcular as propriedades elétricas de OLED com múltiplas camadas. Com o auxílio do SimOLED foram elaborados alguns exemplos para ilustrar o funcionamento dos OLEDs. Por fim, foi feita uma análise comparativa entre os resultados de seis dispositivos experimentais e suas versões simuladas, com o intuito avaliar o acurácia do simulador.

O capítulo 4 trata da explicação do funcionamento das técnicas de Inteligência Computacional aplicadas no projeto dos OLEDs: Redes

Neurais Artificiais, Algoritmos Genéticos e Otimização por Colônia de Formigas.

O capítulo 5 consiste na descrição detalhada do problema, incluindo a explicação sobre a construção das bases de dados e o treinamento das RNAs, da sua aplicação como *proxy* do simulador de OLEDs para o cálculo da densidade de corrente, assim como a apresentação da configuração das melhores redes. Em seguida apresenta-se a configuração do AG e o funcionamento do ACO.

No capítulo 6 apresenta-se e discutem-se os resultados obtidos para os três estudos de caso investigados.

O capítulo 7 contém a conclusão e as sugestões de trabalhos futuros.

Por fim, o Capítulo 8 encerra as referências bibliográficas utilizadas neste trabalho.