

6

Estudos de Caso e Discussão

Os dispositivos apresentados neste capítulo foram desenvolvidos com o auxílio de técnicas da Inteligência Computacional, a saber, Algoritmos Genéticos e Algoritmo de Colônia de Formigas. A função objetivo a ser minimizada é a razão entre a tensão aplicada e a raiz quadrada da densidade de corrente, $V/J^{0.5}$. As otimizações realizadas com AGs empregaram o GACOM, uma biblioteca de Algoritmos Genéticos criada pelo Laboratório de Inteligência Computacional Aplicada da PUC-Rio. O ACO presente nesta dissertação foi desenvolvido com base na estrutura proposta em [17]. Além disso, é a primeira vez que esta técnica de otimização é utilizada no ICA. Os estudos de caso abordados neste capítulo são os seguintes:

1. Otimização das Espessuras das CTB e CTE em um OLED Bicamada NPB/Alq3;
2. Otimização da Mobilidade dos Buracos na CTE e dos Elétrons na CTE em um OLED Bicamada NPB/Alq3;
3. Determinação da Concentração dos MTE e MTB em um ML-OLED com Blendas na Camada de Emissão.

6.1

Otimização das Espessuras das CTB e CTE em um OLED NPB/Alq3

Este estudo de caso objetiva pretender como a variação da espessura das CTB e CTE de um OLED bicamada afeta as suas características ($J \times V$), as quais, como se sabe, influenciam diretamente as propriedades ópticas e o consumo de energia do dispositivo [14,15]. Para este fim, foram realizados três experimentos, denominados A1, B1 e C1. Em A1 e B1, variou-se espessura das CTB e CTE entre 35 e 65 nm, incluindo o valor mínimo e máximo desse intervalo. A diferença entre esses dois experimentos consistiu nos materiais empregados na

CTB, os quais foram dois tipos de NPB: em A1, utilizou-se o α -NPB e, em B1, o β -NPB. Conforme pode ser visto na Tab. 5.1, as energias dos orbitais moleculares de fronteira HOMO e LUMO desses compostos são distintas, sendo que, no caso de transporte de buracos, somente o HOMO é relevante. Como não foram encontrados artigos na literatura que tratassem da mobilidade de elétrons e buracos no β -NPB, assumiu-se que fossem iguais aos do α -NPB, devido ao fato das estruturas serem muito semelhantes. Em ambos os casos, o dispositivo possui uma espessura fixa de 100 nm e, portanto, o somatório das espessuras das camadas é sempre a esse valor. Como a espessura total é fixa, apenas a CTB teve a espessura variada, enquanto o valor da CTE foi calculado através da diferença entre a espessura total e espessura da CTB. Conforme explicitado no capítulo 2, de acordo com resultados da literatura, o comprimento de difusão do éxciton no Alq3, que é o material emissor, tem um valor de (30 ± 13) nm [68, 70]. Apesar dessa faixa de variação estar entre 17 e 43 nm, 35 nm geralmente é um bom valor mínimo para a espessura [71]. Desse modo, se a espessura da camada for menor que esse comprimento de difusão, o éxciton será absorvido pelo catodo, gerando decaimentos não radioativos e diminuindo a eficiência de emissão. O valor de 65 nm foi escolhido como ponto máximo do intervalo, pois, acima dessa espessura a emissão do OLED também é prejudicada, devido a efeitos de microcavidade [123]. O melhor dentre esse dois casos foi escolhido para compor o experimento C1, o qual consistiu na investigação de espessuras totais menores do que 100 nm, para verificar se era possível aperfeiçoar o valor de $V/J^{0.5}$.

Os parâmetros utilizados na configuração do AG foram escolhidos com base no trabalho de otimização de ML-OLED com blendas na camada de emissão realizado por Quirino et al [13]. Como esses valores conduziram a bons resultados, eles foram utilizados como ponto de partida para estes experimentos. A principal diferença foram o número de gerações e o tamanho da população. Esses parâmetros estão especificados na Tab. 6.1.

Parâmetros do AG	
Experimentos	10
Número de Gerações	30
Tamanho População	30
Taxa de Crossover	[80-60%]
Taxa de Mutação uniforme	[5-10%]
Taxa de Mutação não uniforme	[8-30%]
GAP	80%

Tabela 6.1: Parâmetros utilizados na otimização com AGs.

Executou-se um total de 10 experimentos para cada um dos casos supracitados. As médias dos melhores indivíduos por geração para o α -NPB e para o β -NPB podem ser vistos nas Fig. 6.1 e 6.2, respectivamente.

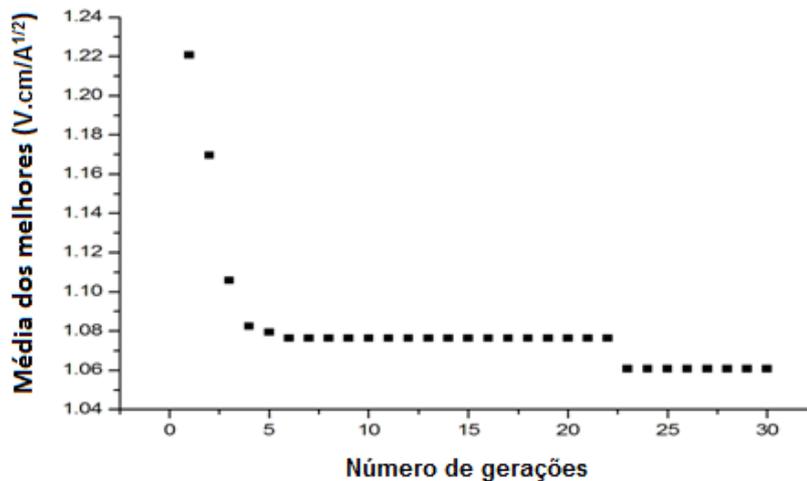


Figura 6.1: Média dos melhores indivíduos por geração Para o experimento A1.

Como pode ser observado, o número de gerações e o tamanho da população necessária para se obter a melhor configuração são bem reduzidos. Na Fig. 6.1, observa-se também que a população converge muito rapidamente para a solução ótima. A partir quinta até a vigésima terceira geração a média dos melhores indivíduos é praticamente constante, diminuindo apenas um pouco a partir da vigésima quarta geração e se mantendo assim até a última geração. Nota-se um comportamento semelhante a esse na Fig. 6.2, diferenciando-se apenas pela convergência mais rápida.

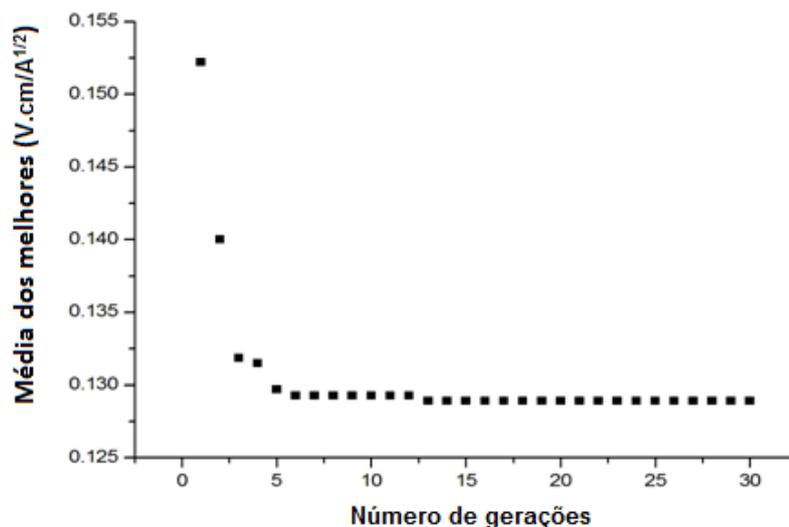


Figura. 6.2: Média dos melhores indivíduos por geração para o experimento B1.

Esses resultados indicam que a consideração de apenas duas variáveis, a saber, a espessura das CTB e CTE não torna o problema em questão complexo o suficiente para justificar o emprego de AGs, pois o espaço de busca ficou bastante limitado. Um dos fatores limitantes nesse caso é o fato do SimOLED só permitir a simulação valores inteiros de espessura. Além disso, seria necessário considerar um maior número de variáveis simultaneamente, de forma a tornar as configurações encontradas mais próximas dos dispositivos experimentais.

Como é possível verificar na Tab. 6.3, as configurações dos dispositivos sugeridos pelo AG são inversas. Conforme mostrado na Tab. 6.2, o valor de $V/J^{0.5}$ obtido em B1, que emprega o β -NPB na CTB, foi 90% menor do que aquele encontrado A1. Uma possível explicação para esse comportamento assimétrico reside no fato da energia do orbital molecular HOMO do β -NPB ser mais próxima do valor da função trabalho do ITO, causando assim uma redução da barreira de potencial para a injeção de buracos. Contudo, para compreender melhor essa questão, é preciso realizar um estudo mais detalhado à respeito das características da interface metalorgânica e dos diferentes mecanismos de injeção de portadores, como a injeção termiônica e o tunelamento.

V	Experimento A1		Experimento B1		Experimento C1	
	J (A/cm ²)	V/J ^{0.5} (V.cm/A ^{1/2})	J (A/cm ²)	V/J ^{0.5} (V.cm/A ^{1/2})	J (A/cm ²)	V/J ^{0.5} (V.cm/A ^{1/2})
2	1.56E-06	1601.12	7.93E-05	224.57	2.81E-04	119.41
3	1.71E-05	726.47	1.87E-03	69.42	8.41E-03	32.71
4	8.58E-05	431.87	1.25E-02	35.74	6.53E-02	15.66
5	3.04E-04	286.72	4.98E-02	22.41	2.75E-01	9.54
6	8.67E-04	203.75	1.40E-01	16.01	8.31E-01	6.58
7	2.11E-03	152.49	3.20E-01	12.38	2.06E+00	4.88
8	4.51E-03	119.12	6.33E-01	10.06	4.47E+00	3.79
9	8.66E-03	96.71	1.14E+00	8.43	8.81E+00	3.03
10	1.52E-02	80.98	1.91E+00	7.24	1.63E+01	2.48
11	2.46E-02	70.09	3.01E+00	6.35	2.86E+01	2.06
12	3.79E-02	61.63	4.54E+00	5.63	4.79E+01	1.73
13	5.84E-02	53.78	6.68E+00	5.03	7.71E+01	1.48
14	9.21E-02	46.14	9.60E+00	4.52	1.20E+02	1.28
15	1.47E-01	39.07	1.35E+01	4.08	1.80E+02	1.12

Tabela 6.2: Resultados da otimização realizada no 1º estudo de caso.

Assim, conforme explicado inicialmente, foi realizada uma terceira otimização, nos mesmos moldes do experimento B1, porém, permitindo-se a variação simultânea das espessuras nas duas orgânicas, de modo a encontrar a melhor espessura total. Novamente, houve uma minimização de 73% em relação ao segundo experimento e de 97% em relação ao primeiro, conforme apresentado na Tab. 6.2. O OLED otimizado ficou uma espessura total de 70 nm, sendo 35 nm para cada uma das camadas orgânicas. Esse resultado é plausível, visto que a espessura da camada de Alq3 está dentro do limite de difusão do éxciton. Além disso, há trabalhos experimentais na literatura que contém OLEDs semelhantes [10]. A Tab. 6.3 contém os valores de espessura encontrados para as CTB e CTE nos três experimentos apresentados.

Experimento	CTB (nm)	CTE/CEL (nm)
A1	35	65
B1	65	35
C1	35	35

Tabela 6.3: Resultado das otimizações com AG.

A partir do resultado de B1, foram fabricados quatro OLEDs bicamadas do tipo ITO/NPB/Alq3/AI-LiF, com o objetivo de validar a configuração sugerida pelo AG. Foi utilizado um anodo de ITO com 120 nm, pré-padronizado e pré-depositado em um substrato de vidro. No

catodo, empregou-se uma combinação de alumínio (Al) e LiF, com espessura 200 nm e 10 nm, respectivamente. A fina camada de LiF foi utilizada para melhorar a injeção de elétrons. A espessura total das camadas orgânicas foi 100 nm, variando-se da espessura das camadas de NPB/Alq3 de 35 a 65 nm, com um incremento 10 nm para a camada de NPB e um decréscimo de 10 nm para a camada de Alq3, a cada experimento sucessivo. As configurações dos dispositivos são: 35/65, 45/55, 55/45 e 65/35. Os gráficos de comparação entre as simulações e os experimentos foram apresentados no capítulo 3. A Fig. 6.3 mostra o valor de $V/J^{0.5}$ para cada um desses dispositivos.

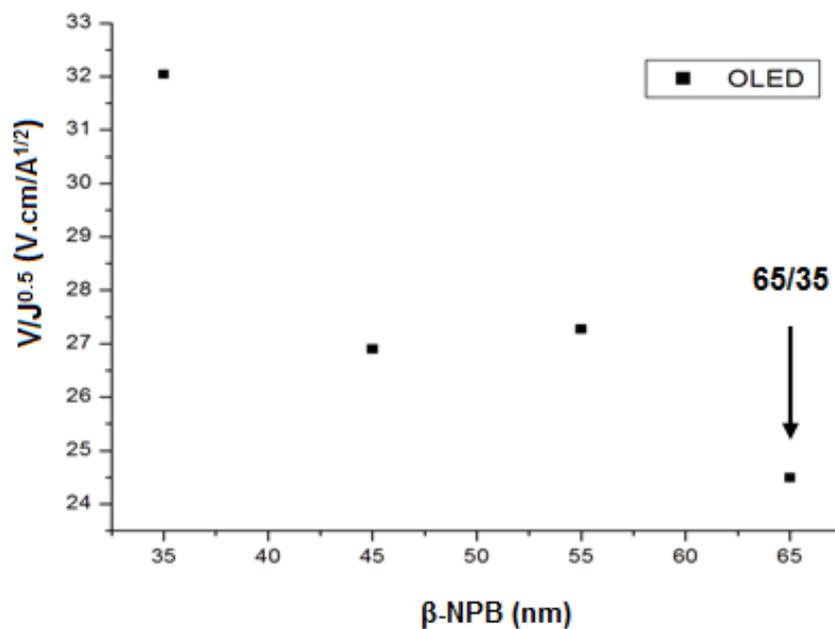


Figura 6.3: Diminuição do valor de $V/J^{0.5}$ dos OLEDs com variação de espessura do β -NPB.

De maneira geral, o gráfico mostra que a razão $V/J^{0.5}$ diminui conforme a espessura da camada de β -NPB aumenta até atingir um mínimo em 65 nm, conforme previsto pelo AG neste estudo de caso. Somente um dos pontos, relativo ao terceiro dispositivo, de configuração 55/45, é que destoa do padrão descrito, estando possivelmente relacionado à fabricação do dispositivo. Embora seja preciso repetir os experimentos para posterior confirmação, esses resultados demonstram como a espessura das camadas influencia nas propriedades elétricas do

dispositivo. Também seria fabricar os dispositivos sugeridos pelos outros dois experimentos para efeitos de comparação.

Outro ponto notável é a relação entre a injeção de elétrons e buracos e as espessuras das CTB e CTE sugeridas para os dispositivos dos experimentos A1 e B1, as quais são o inverso uma da outra. No primeiro dispositivo a injeção de elétrons é mais eficiente do que a injeção de buracos, devido à maior diferença entre a função trabalho do ITO e a energia do orbital HOMO do α -NPB. Para compensar o desbalanceamento entre a corrente de elétrons e buracos, devido ao excesso da primeira, houve um aumento na CTE. No segundo dispositivo, com β -NPB, houve uma melhora na injeção de buracos e por isso a CTB foi proporcionalmente aumentada.

6.2

Otimização da Mobilidade dos Buracos na CTE e dos Elétrons na CTE em um OLED Bicamada NPB/Alq3

Neste segundo estudo de caso também foram elaborados três experimentos, designados A2, B2 e C2, onde as configurações dos OLEDs foram iguais às de A1, B1 e C1. Como as simulações contendo variação de mobilidade são bastante demoradas no SimOLED e também por elas terem sido realizadas inicialmente apenas para um OLED com α -NPB na CTB, a otimização foi executada com base na melhor estrutura obtida para esse composto. No experimento A2, variou-se a mobilidade intrínseca de buracos (MIB) na CTB e a mobilidade intrínseca de elétrons (MIE) na CTE, tendo como base os valores apresentados na Tabela 5.1. Considerando-se a suposição feita previamente, de que as MIB e MIE seriam as mesmas no α -NPB e no β -NPB, os valores encontrados no experimento A2 foram aplicados na simulação da estrutura do dispositivo obtido em B1.

Devido Os intervalos analisados para as mobilidades supracitadas foi de uma ordem de grandeza acima e abaixo das mobilidades intrínsecas de elétrons e buracos, como apresentado na Tab. 5.2. Como a mobilidade de buracos no NPB é de $1 \times 10^{-4} \text{ cm}^2/(\text{V.s})$, a faixa de variação

foi de 1×10^{-3} até 1×10^{-5} $\text{cm}^2/(\text{V.s})$. Em relação ao Alq3, variou-se a mobilidade de elétrons entre de 1×10^{-5} até 1×10^{-7} $\text{cm}^2/(\text{V.s})$, a partir do valor padrão de 1×10^{-6} $\text{cm}^2/(\text{V.s})$. Mesmo sabendo que a mobilidade é uma propriedade inerente ao composto orgânico e que não pode ser alterada livremente como a espessura, objetiva-se estudar como ela influencia a eficiência do diodo orgânico, pois esse conhecimento pode auxiliar na procura e na síntese de novos materiais. Assim como no estudo de caso anterior, os parâmetros utilizados na configuração do AG (Tab. 6.4) foram escolhidos com base no trabalho de otimização de ML-OLED com blendas na camada de emissão realizado por Quirino et al [13].

Parâmetros do AG	
Experimentos	10
Número de Gerações	50
Tamanho População	50
Taxa de Crossover	[80-60%]
Taxa de Mutação uniforme	[5-10%]
Taxa de Mutação não uniforme	[8-30%]
GAP	80%

Tabela 6.4: Parâmetros utilizados na otimização com AGs.

Efetuuou-se um total de 10 experimentos para cada um dos casos abaixo. Na Fig. 6.4 é mostrada a média dos melhores indivíduos por geração.

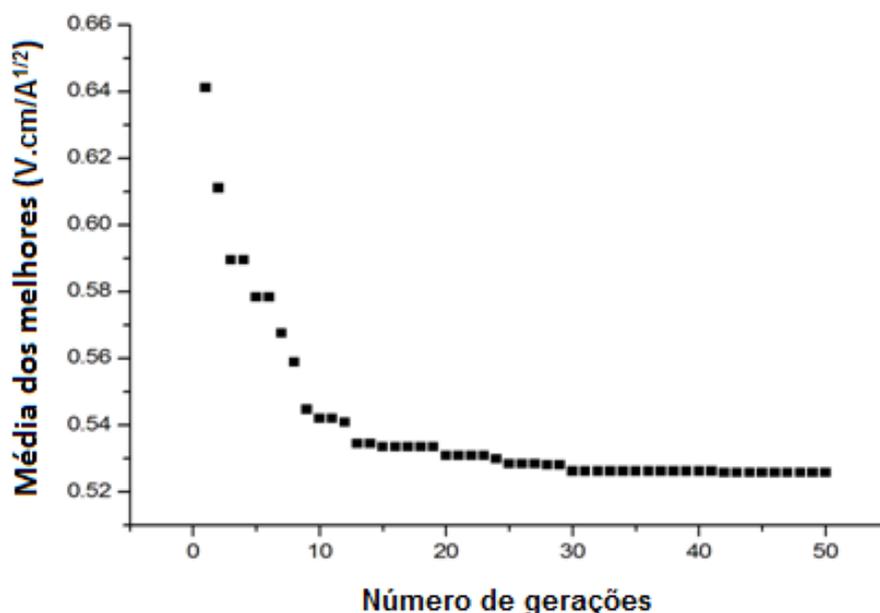


Figura. 6.4: Média dos melhores indivíduos por geração para as mobilidades.

Comparando-se com o gráfico da Fig. 6.4 com aqueles do primeiro estudo de caso (Fig. 6.1 e 6.2), observa-se um aumento no tamanho da população e no número de gerações. Isso ocorre devido à extensão do espaço de busca, que nesse caso é consideravelmente do que aquele do problema anterior, uma vez que as mobilidades são variáveis reais e o número de pontos possíveis entre o limite inferior e superior do intervalo é infinito. Assim, há uma variedade muito maior de indivíduos na população. O melhor valor de mobilidade de buracos encontrado para a CTB foi de $1 \times 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{Vs}$ e para a CTE, de $1 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{Vs}$.

Caso fosse possível, o ideal seria variar as espessuras das CTE e CTB juntamente com as mobilidades de elétrons e buracos em ambas as camadas, integrando assim os dois estudos de caso. Devido a isso, e com o intuito de verificar se esses valores eram capazes de minimizar o valor de $V/J^{0.5}$, os experimentos da Tabela 6.2 foram executados novamente, porém, empregando os valores de mobilidade encontrados neste segundo experimento, cujos resultados se encontram na Tab. 6.5.

V	Experimento A2		Experimento B2		Experimento C2	
	J (A/cm ²)	V/J ^{0.5} (V.cm/A ^{1/2})	J (A/cm ²)	V/J ^{0.5} (V.cm/A ^{1/2})	J (A/cm ²)	V/J ^{0.5} (V.cm/A ^{1/2})
2	9.00E-03	21.08	3.57E-02	10.58	2.81E-01	3.776
3	9.47E-02	9.75	5.99E-01	3.88	8.41E+00	1.034
4	4.59E-01	5.90	3.94E+00	2.02	6.53E+01	0.495
5	1.55E+00	4.02	1.62E+01	1.24	2.75E+02	0.302
6	4.03E+00	2.99	4.89E+01	0.86	8.31E+02	0.208
7	8.86E+00	2.35	1.21E+02	0.64	2.06E+03	0.154
8	1.73E+01	1.92	2.58E+02	0.50	4.47E+03	0.120
9	2.98E+01	1.65	4.97E+02	0.40	8.81E+03	0.096
10	5.05E+01	1.41	8.85E+02	0.34	1.63E+04	0.078
11	8.75E+01	1.18	1.49E+03	0.29	2.86E+04	0.065
12	1.52E+02	0.97	2.38E+03	0.25	4.79E+04	0.055
13	2.59E+02	0.81	3.68E+03	0.21	7.71E+04	0.047
14	4.26E+02	0.68	5.53E+03	0.19	1.20E+05	0.040
15	6.74E+02	0.58	8.13E+03	0.17	1.80E+05	0.035

Tabela 6.5: Dados da Simulação dos dispositivos otimizados no 2º estudo de caso.

As simulações comprovam que os valores das mobilidades intrínsecas dos elétrons da CTE e dos buracos na CTB otimizados pelo AG para as são capazes de melhorar ainda mais a razão $V/J^{0.5}$ dos três

dispositivos. Conforme visto no capítulo 2, na equação 2.1, a mobilidade varia em função do campo elétrico, da temperatura e de mais dois outros termos constantes, próprios de cada material orgânico, sendo um deles a mobilidade intrínseca $\mu(0, T)$, também conhecida mobilidade na ausência do campo elétrico. Um aumento ou redução dessa última irá influenciar na primeira, já que elas são diretamente proporcionais. A possível explicação para isso pode estar na equação de densidade corrente, que é uma das três equações diferenciais parciais necessárias para efetuar a simulação numérica de um OLED, juntamente com a equação de Laplace e a equação da continuidade. Existem duas equações de densidade corrente, sendo uma para elétrons e outra para buracos. Elas contêm um termo de deriva e um termo de difusão, esse último ignorado pelo primeiro modelo descrito no capítulo 3 [14], mas considerado pelo SimOLED. Um dos parâmetros desse termo de difusão é a mobilidade do portador de carga. Assim, é possível que um aumento nessa mobilidade cause um aumento na densidade de corrente e, conseqüentemente, a razão $V/J^{0.5}$ será menor. Assim, se forem sintetizadas MTE e MTB com mobilidades intrínsecas maiores, teoricamente haverá um ganho na eficiência do dispositivo.

6.3

Determinação da Concentração dos Perfil de Concentração MTE/MTB em um ML-OLED com Blendas na Camada de Emissão

Os resultados e análises apresentados a seguir correspondem a dois experimentos distintos com ML-OLED contendo blendas de MTE e MTB na camada emissão: (i) com cinco subcamadas de blendas; e (ii) duas subcamadas de blendas. O dispositivo com cinco subcamadas é apresentado primeiramente por tratar-se do problema original investigado na literatura [11,16], enquanto o segundo dispositivo é uma proposição do presente estudo. Nas simulações efetuadas, considerou-se como fixa a espessura nas camadas com blendas, variando-se apenas as concentrações dos materiais orgânicos, devido à sua considerável influência na mobilidade dos portadores de carga e na eficiência de

emissão do dispositivo. Assim, foram considerados cinco estudos de caso, cada qual associado a um par de parâmetros n e n' . Isso foi necessário para se obter um melhor ajuste com os resultados experimentais, devido às de se medir as mobilidades nas blendas. Além disso, essa variação permite analisar o desempenho dos dispositivos simulados dentro da faixa de valores proposta pela literatura. É interessante mencionar que, em cada um desses casos a complexidade da busca é diferente, visto que há uma modificação na geometria do espaço de soluções, que é descrito pela função $V/J^{0.5}$.

A Tab. 6.6 contém os parâmetros que foram utilizados na otimização por ACO para os OLED de cinco e duas camadas. Para o primeiro caso foram realizados um total de 82.500 avaliações, sendo 1650 avaliações a cada passo e para o segundo, um total de 4500 avaliações, com 150 avaliações a cada passo. para os OLED de duas camadas.

Parâmetros do ACO		
Camadas	5	2
Experimentos	1	5
Formigas	150	30
Número de Passos	50	30
Constante a	1	1
Constante b	10	10
Constante c	0,001	0,001
Taxa de Evaporação	0,95	0,95
Tamanho do passo	0,01	0,01

Tabela 6.6: Parâmetros utilizados no ACO.

A Tab. 6.7 contém os parâmetros que foram utilizados na otimização através de AGs apenas para o dispositivo com 2 camadas de blendas.

Parâmetros do AG	
Experimentos	5
Número de Gerações	30
Tamanho População	30
Taxa de Crossover	[80-60%]
Taxa de Mutação uniforme	[5-10%]
Taxa de Mutação não uniforme	[8-30%]
GAP	80%

Tabela 6.7: Parâmetros utilizados no AG.

6.3.1

Cinco Camadas de Blendas

A comparação entre os resultados obtidos pelo ACO neste trabalho e aqueles presentes na literatura [13,14] pode ser vista na Tab. 6.8. Primeiramente, verifica-se que o ACO foi capaz de encontrar valores de $V/J^{0.5}$ de 0,5 a 6,36% menores do que aqueles propostos em [13] para todos os estudos de caso. Comparando-se com otimização efetuada por GA, o ACO obteve um valor de $V/J^{0.5}$ 1,56% menor no primeiro estudo de caso. Nos estudos de caso restantes esse valor foi de 0,95 a 3,15 % maior. O mesmo pode ser expresso em relação ao PSO, uma vez que os seus resultados são idênticos aos do AG, com exceção do primeiro estudo de caso, onde o ACO chega bem perto, com uma diferença de apenas 0,08%. Apesar disso, os três métodos de otimização sugerem a existência de um mínimo global da função $V/J^{0.5}$ na direção dos valores encontrados.

Param. Mob		$V/J^{0.5}$ (V.cm/A ^{1/2})				Δ (%)		
n	n'	Gusso [14]	GA [13]	PSO	ACO	$\Delta 1$	$\Delta 2$	$\Delta 3$
1	1	23,18	22,82	22,41	22,43	1,67	3,32	3,23
2	2	17,97	17,72	17,72	17,88	1,45	1,45	0,5
1.5	1.5	21,51	19,98	19,97	20,14	7,16	7,16	6,36
1.5	2	20,25	18,76	18,76	19,41	7,3	7,3	4,15
1	2	21,89	20,36	20,34	20,76	6,98	7,3	5,16

Tabela 6.8: Comparação entre a otimização de $V/J^{0.5}$ realizada neste trabalho e em [14,16].

onde $\Delta 1$, $\Delta 2$ e $\Delta 3$ são as diferenças percentuais entre os valores da razão $V/J^{0.5}$ obtidas pelo GA, PSO e ACO, respectivamente, e em [14].

Contudo, é preciso analisar os perfis de concentração obtidos pelo ACO de forma a interpretar, compreender e comparar os resultados. Na Tab. 6.9 observa-se que os valores obtidos pelo ACO também são fracionários, de forma similar à otimização executada por GA, e diferentemente de [14], na qual tais valores são inteiros. Além disso, a concentração de ETM vai diminuindo gradativamente da primeira até a última camada, estando assim de acordo com o modelo apresentado. A

Tab. 6.10 apresenta as concentrações de ETM de forma percentual, permitindo assim uma melhor interpretação dos dados contidos na Tab. 6.9. A partir desses dados nela é possível calcular concentração média da camada central em [14] que é de 52%. Entretanto, nas configurações otimizadas por ACO essa concentração média foi de 37%. Esse valor ficou bem próximo daquele obtido pelo AG, de 38,5.

Perfil de Concentração [ETM]:[HTM]		
Gusso	GA	ACO
10:1; 6:1; 1:1; 1:6; 1:10	7,24:1; 7,22:1; 0,92:1; 0,13:1; 0,13:1	19:1; 9,53:1; 0,16:1; 0,06:1; 0,05:1
2:1; 2:1; 1:1; 1:2; 1:2	2,09:1; 2,09:1; 0,57:1; 0,57:1; 0,57:1	1,86:1; 1,86:1; 0,69:1; 0,47:1; 0,47:1
3:1; 2:1; 1:1; 1:2; 1:3	2,49:1; 2,49:1; 0,46:1; 0,44:1; 0,44:1	2,33:1; 2,33:1; 2,01:1; 0,49:1; 0,46:1
3:1; 2:1; 1:1; 1:2; 1:3	2,68:1; 2,68:1; 0,59:1; 0,59:1; 0,59:1	4:1; 3,21:1; 0,50:1; 0,47:1; 0,36:1
7:2; 5:2; 3:2; 2:3; 1:2	4,03:1; 4,02:1; 0,67:1; 0,58:1; 0,58:1	5,67:1; 4,26:1; 0,38:1; 0,34:1; 0,32:1

Tabela 6.9: Perfis de concentração encontrados pelo ACO e pela literatura [14,15].

Isso aponta que a concentração na camada central tem considerável influência na minimização de $V/J^{0.5}$, uma vez que a variação mais significativa nas configurações dos três dispositivos é justamente nessa camada. No segundo, terceiro e quinto estudos de caso, observa-se que os valores de concentração de ETM encontrados por AG e ACO para duas primeiras e nas duas últimas camadas são bastante próximos, sendo a diferença muito pequena. Já na camada central, todos os valores obtidos pelo AG foram menores do que 50%, enquanto no ACO a máxima porcentagem foi de 68%. Isso é corroborado pela observação do primeiro estudo de caso, onde a principal diferença é justamente a concentração de ETM, na terceira camada, que é 71% menor do que aquela do dispositivo otimização por GA.

Concentração de MTE (%)		
Gusso	GA	ACO
91 – 86 – 50 – 14 – 9	88 – 88 – 48 – 11,5 – 11,5	95 – 90 – 14 – 5,4 – 5,1
67 – 67 – 50 – 33 – 33	68 – 68 – 36 – 36 – 36	65 – 65 – 41 – 32 – 32
75 – 67 – 50 – 33 – 25	71 – 71 – 31,5 – 30,5 – 30,5	70 – 70 – 68 – 32 – 31
75 – 67 – 50 – 33 – 25	73 – 73 – 37 – 37 – 37	80 – 76 – 34 – 32 – 27
78 – 71 – 60 – 40 – 33	80 – 80 – 40 – 37 – 37	85 – 81 – 28 – 26 – 25

Tabela 6.10: Quantidade de MTE em valores percentuais dos perfis de concentração apresentados na Tab. 6.9.

Para validar essa hipótese, os dois dispositivos fabricados em [13] foram simulados com o auxílio de um simulador comercial de OLEDs conhecido como SimOLED. Verificou-se que o pico da densidade de éxcitons na região de emissão ocorre na terceira camada. Isso confirma e reforça a importância dessa camada no desempenho do dispositivo.

6.3.2

Duas Camadas de Blendas

O objetivo deste segundo experimento é verificar a influência de um menor número de camadas de blendas na minimização de $V/J^{0.5}$. O OLED simulado possui duas camadas de blendas, cada uma com espessura de 25 nm. Como a fabricação dos dispositivos multicamadas contendo blendas é mais complexa, pois os materiais precisam ser codepositados, exigindo assim uma maior controle das taxas de deposição, uma diminuição no número de camadas torna o processo mais simples. Se for possível obter uma eficiência equivalente ou até mesmo superior com 2L ao invés de cinco camadas, então é muito mais vantajoso fabricá-lo. A Tab. 6.11 contém uma comparação entre os resultados da otimização de $V/J^{0.5}$ para o dispositivo com cinco e duas camadas, esta última realizada apenas com AG e ACO. Observa-se que os dois métodos de otimização foram capazes de obter uma minimização de $V/J^{0.5}$ ainda melhor do que a anterior, além de terem encontrado valores idênticos.

5 Camadas			2 Camadas		$\Delta(\%)$		
Gusso	GA	ACO	GA	ACO	$\Delta 1$	$\Delta 2$	$\Delta 3$
23,18	22,82	22,43	22,17	22,17	4,35	2,48	1,15
17,97	17,72	17,88	17,54	17,54	2,39	1,01	1,90
21,51	19,98	20,14	19,74	19,74	8,22	1,20	1,98
20,25	18,76	19,41	18,58	18,58	8,25	0,95	4,28
21,89	20,36	20,76	20,21	20,21	7,67	0,73	2,64

Tabela 6.11: Comparação entre a otimização de $V/J^{0.5}$ para os dispositivos de cinco e duas camadas de blendas.

onde $\Delta 1$, $\Delta 2$ e $\Delta 3$ são as diferenças percentuais entre os valores da razão $V/J^{0.5}$ obtidas para os dispositivos cinco e duas camadas.

Para justificar esse aumento de eficiência é preciso recorrer a alguns conceitos básicos da teoria de OLEDs. Nesse sentido, sabe-se que a eficiência depende essencialmente de três fatores: injeção, transporte e recombinação. Conforme explicado anteriormente, as camadas de blendas estão entre duas camadas puras de ETM e HTM, as quais não foram modificadas em nenhum dos dois experimentos. Assim, o primeiro fator não contribui em nada, uma vez que não houve modificação na barreira de injeção de portadores de carga. A propriedade de transporte de portadores é modificada em ambos os casos, uma vez que as mobilidades variam em função das concentrações de HTM. Analisando as configurações otimizadas por GA, percebe-se que elas podem facilmente ser reduzidas a dispositivos equivalentes de duas ou três camadas. Tomando-se como exemplo o segundo dispositivo [2.09:1, 2.09:1, 0.57:1, 0.57:1, 0.57:1], onde cada camada possui 10 nm de espessura, podemos chegar à configuração [2.09:1, 0.57:1], onde a primeira camada possui 20 nm e a segunda, 30 nm. Observando-se as Tab. 6.9 e 6.12, verifica-se uma pequena diferença nos perfis de concentração e assim nas mobilidades dos elétrons e buracos.

Param. Mob		Perfil de Concentração [ETM:HTM]		Concentração de MTE (%)	
n	n'	AG	ACO	AG	ACO
1	1	6,54:1; 0,16:1	6,14:1; 0,16:1	87 - 14	86 - 14
2	2	2,01:1; 0,56:1	1,94:1; 0,55:1	67 - 36	66 - 35
1.5	1.5	2,57:1; 0,41:1	2,33:1; 0,43:1	72 - 29	70 - 30
1.5	2	2,58:1; 0,58:1	2,45:1; 0,62:1	72 - 37	71 - 38
1	2	4,27:1; 0,58:1	4,26:1; 0,55:1	81 - 37	81 - 35

Tabela 6.12: Comparação entre os perfis de concentração encontrados para os dispositivos de cinco e duas camadas de blendas.

Simulando-se esses dispositivos verificou-se que a mobilidade dos elétrons no dispositivo de duas camadas é maior do que no dispositivo com cinco camadas. Na fórmula empregada para a simulação das propriedades elétricas do OLED [14,15] observa-se que o valor da função $B(x)$, que é o principal termo de $V/J^{0.5}$, é inversamente proporcional às mobilidades relativa de elétrons. Assim, uma maior mobilidade resulta em um menor valor de cálculo de $V/J^{0.5}$. Além disso, há uma pequena

diferença a espessura das camadas; esses dois fatores contribuem para que haja uma maior taxa de recombinação no dispositivo com duas camadas. Os dispositivos foram testados no SimOLED de forma a averiguar esses resultados e o primeiro resultou em uma luminância de 16.750 cd/m^2 , enquanto no segundo, a luminância foi de 17.730 cd/m^2 . Desse modo, há uma diferença de luminância entre os dois dispositivos é de quase 1.000 cd/m^2 , o que confirma os resultados da Tab. 6.11.

A simulação do dispositivo de duas camadas também foi importante para compreender melhor a razão do ACO não ter conseguido encontrar valores de $V/J^{0.5}$ tão bons quanto o AG no caso de cinco camadas. O principal obstáculo foi o tipo de busca efetuado pelas formigas. Como essa busca é espacialmente orientada, as formigas precisam percorrer o espaço de busca ponto a ponto, através da criação e destruição de trilhas de feromônio, que são os processos-chave desse algoritmo. Como o espaço de busca do problema em questão é muito amplo, o funcionamento desse mecanismo está sendo prejudicado, pois as formigas não estão conseguindo convergir para uma única trilha e assim encontrar a solução ótima. Outro fator que interfere no desempenho do algoritmo é intervalo de discretização do espaço de busca, que é equivalente ao tamanho do passo da formiga. Esse parâmetro define a quantidade de soluções disponíveis. Assim, mais formigas são. Contudo, como cada formiga precisa realizar 11 avaliações por passo e devido ao fato de nem todas essas avaliações conduzirem a soluções válidas, empregar mais de 150 formigas aumenta demasiadamente o custo computacional. Isso fica evidente ao se diminuir o número de dimensões do problema de cinco para duas. Nesse caso, a solução encontrada pelo ACO foi idêntica à obtida por AG nas mesmas condições.