

Conclusões e Trabalhos Futuros

Esta pesquisa consistiu no estudo de estratégias variadas para otimização da arquitetura de OLEDs multicamadas, a partir da análise das suas características elétricas ($V \times J$) e da minimização da razão $V/J^{0.5}$ entre elas, com o objetivo de aumentar a sua eficiência luminosa e energética do dispositivo. Investigou-se como esse fator se comportava com a variação das espessuras e das MIE e MIB nas CTE e CTB, respectivamente, e das concentrações dos MTE e MTB. Assim, foram empregados dois modelos de simulação para descrever as propriedades elétricas de ML-OLEDs. O primeiro é um modelo mais simples, porém capaz de simular dispositivos com blendas de materiais orgânicos [15]. O segundo é uma solução comercial chamada SimOLED[®], a qual consiste em um modelo mais complexo por fundamentar-se na solução de um sistema de equações diferenciais. No segundo caso, foi necessário recorrer a uma RNA para emular o simulador no cálculo da densidade de corrente dos dispositivos com variação de espessura e MIE e MIB nas CTE e CTB. Para realizar a otimização, foram aplicados um AG e um ACO. Este último método foi desenvolvido e implementado neste trabalho através do software Matlab.

O SimOLED[®] mostrou ser uma ferramenta adequada aos propósitos deste trabalho, visto que foi capaz reproduzir as características elétricas de seis resultados experimentais com relativa acurácia. Dentre as quatro RNAs treinadas para substituir o SimOLED[®] como função de avaliação do AG, o erro de validação máximo foi de 6,83%, tendo a vantagem adicional calcular a densidade de corrente muito mais rapidamente. O modelo de blendas de materiais orgânicos, implementado em outro trabalho de otimização com AG [14], além de trabalhar em conjunto com o ACO, também foi utilizado para a obtenção dos valores das MIE e MIB nas camadas com diferentes concentrações de MTE e MTB, possibilitando modelar no SimOLED[®] dois dispositivos experimentais apresentados na literatura [14].

A comparação entre a configuração apresentada pelo AG no primeiro estudo de caso e os dados experimentais evidencia que ambos estão em consonância. Em função disso, foi possível um aumento na eficiência de emissão de um OLED bicamada do tipo β -NPB/Alq3 com espessura total de 100 nm. Os valores ótimos encontrados para as CTB e CTE foira, respectivamente 65 nm e 35 nm de Alq3, considerando-se as limitações impostas pela interface gráfica do SimOLED[®]. Não havendo um valor fixo de espessura total, o melhor valor encontrado foi de 70 nm, cada camada com espessura de 35 nm. Verificou-se também que o OLED uma variação nas características elétricas do OLED com a utilização de dois tipos de NPB, a saber, α -NPB e β -NPB. No primeiro caso, contatou-se que a eficiência do OLED melhora com o aumento progressivo da camada de Alq3, que é um padrão oposto ao do β -NPB, mencionado no início deste parágrafo. Quanto ao segundo estudo de caso, constatou-se que um aumento da MIB na CTB e da MIE na CTE também amplia a eficiência do OLED. A verificação desses resultados é um pouco mais complexa, pois seria necessário sintetizar versões do NPB e do Alq3 com mobilidades modificadas. No terceiro e último estudo de caso a Otimização por Colônia de Formigas (ACO) foi aplicada com o objetivo de otimizar a estrutura de ML-OLED, com duas e com cinco camadas de blindas de ETM e HTM. Neste caso, o parâmetro otimizado foi a concentração de ETM em cada uma dessas camadas. No primeiro caso, os resultados para a relação $V/J^{0.5}$ foi melhores do que todos os estudos de caso presentes em [15]. Em relação à otimização realizada por outros dois métodos bio-inspirados, os resultados foram um pouco piores. Essa diferença é atribuída ao mecanismo de busca inerente ao método e ao número de dimensões do espaço de busca. No entanto, a observação dos perfis de concentrações e a comparação com os obtidos em [14,15], juntamente com as análises realizadas no SimOLED permitiu identificar a importância da camada central no desempenho do dispositivo. No segundo caso, entretanto, os valores de $V/J^{0.5}$ encontrados pelo ACO foram ainda menores do que os relatados na literatura até agora, estabelecendo um novo patamar. Estes resultados foram validados pela aplicação de um GA no mesmo experimento. Uma vez que a fabricação

de OLEDs com camadas de blendas é mais complexa, a diminuição do número de camadas é uma grande vantagem pois simplifica o processo. Estes dispositivos foram testados no SimOLED[®] para confirmar os resultados acima. O dispositivo 5L mostrou uma luminosidade de 16.750 cd/m², enquanto no duas camadas alcançado 17.730 cd/m². Assim, há uma diferença em termos de luminosidade de quase 1.000 cd/m² entre os dois dispositivos. Contudo, é preciso fabricar estes dispositivos para confirmar se eles são realmente mais eficientes do que aqueles com cinco camadas.

Em relação aos trabalhos futuros, são feitas as seguintes sugestões:

- Estudar com maior profundidade as propriedades optoeletrônicas de ML-OLEDs, através da versão integrada SimOLED Plus, que permite simular as características elétricas e ópticas;
- Testar o módulo optoeletrônico software de simulação SETFOS que, além da interface, também pode ser acessado através de um arquivo de entrada com os parâmetros do experimento. Essa abordagem aparente ser mais promissora, uma vez que o SETFOS poderá se conectar diretamente ao Algoritmo Genético;
- Construir um simulador de OLEDs que englobe o modelo de blendas de materiais orgânicos, que possua um módulo otimizador e também seja capaz de extrair os automaticamente parâmetros dos materiais orgânicos com base em dados experimentais, com o auxílio de RNA;
- Empregar as ferramentas da Química Computacional, tais como a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), para calcular a propriedades físico-químicas dos materiais orgânicos, tais como as MIB e MIE as energias dos orbitais HOMO-LUMO, a partir de suas estruturas químicas.