

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA
DO RIO DE JANEIRO



Leone Pereira Masiero

Síntese Evolucionária em Nanotecnologia

Dissertação de Mestrado

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

Orientadores: Marco Aurélio Cavalcanti Pacheco
Carlos Roberto Hall Barbosa

Rio de Janeiro, fevereiro de 2006



Leone Pereira Masiero

Síntese Evolucionária em Nanotecnologia

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

Marco Aurélio Cavalcanti Pacheco
Orientador
PUC-RIO

Carlos Roberto Hall Barbosa
Co-orientador
PUC-RIO

José Franco Machado do Amaral
UERJ

Marco Cremona
PUC-RIO

Antonio Carneiro de Mesquita Filho
UFRJ

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

Rio de Janeiro, 10 de fevereiro de 2006

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

Leone Pereira Masiero

Graduou-se em Engenharia de Computação na Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro em 2003.

Ficha Catalográfica

Masiero, Leone Pereira

Síntese evolucionária em nanotecnologia / Leone Pereira Masiero ; orientadores: Marco Aurélio Cavalcanti Pacheco, Carlos Roberto Hall Barbosa . – Rio de Janeiro : PUC, Departamento de Engenharia Elétrica, 2006.

104 f. : il. ; 30 cm

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

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia elétrica – Teses. 2. Nanotecnologia. 3. Circuitos moleculares. 4. Algoritmos genéticos. 5. Polímeros condutores. 6. OLEDs. I. Pacheco, Marco Aurélio Cavalcanti. II. Barbosa, Carlos Roberto Hall. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Elétrica. IV. Título.

CDD: 621.3

A meus pais,
Augusto Jander e Cilene,
pela luta diária e
pelo apoio incondicional

Agradecimentos

A Deus por ter me dado inteligência e saúde para alcançar mais um objetivo em minha vida.

Aos Professores Marco Aurélio, Carlos Hall, Marco Cremona, José Franco e Luiz Gusmão pelas orientações e ajudas.

Aos colegas Ronaldo Giro e André Gusso pelas milhares de dúvidas esclarecidas.

Aos amigos Omar, Juan e Yvan, pela cobrança, pela ajuda, pelo compartilhamento de idéias e por tudo que puderam fazer por mim.

Aos colegas da oficina de manutenção e a Cristiano Legnani pelos experimentos realizados.

A minha família, que sempre me apoiou.

A minha esposa Lidiane, pela compreensão e pelo Amor.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

Resumo

Masiero, Leone Pereira. **Síntese Evolucionária em Nanotecnologia**. Rio de Janeiro, 2006. 104p. Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

A Nanotecnologia teve seus primeiros conceitos introduzidos pelo físico americano Richard Feynman em 1959, em sua famosa palestra intitulada “**There’s plenty of room at the bottom**” (“Ainda há muito espaço sobrando no fundo”). Já a Inteligência Computacional tem sido utilizada com sucesso em diversas áreas no meio acadêmico e industrial. Este trabalho investiga o potencial dos Algoritmos Genéticos na otimização e síntese de dispositivos e estruturas na área de Nanotecnologia, através de 3 tipos de aplicações distintas: síntese de circuitos eletrônicos moleculares, projeto de novos polímeros condutores e otimização de parâmetros de OLEDs (*Organic Light-Emitting Diodes*). A síntese de circuitos eletrônicos moleculares é desenvolvida com base em Hardware Evolucionário (EHW – *Evolvable Hardware*) e tem como principais elementos dois dispositivos moleculares simulados em SPICE: o diodo molecular e o transistor molecular. O projeto de novos polímeros condutores é baseado em uma metodologia que combina uma aproximação *tight-binding* (hamiltoniano de Hückel simplificado) que representa a estrutura eletrônica de uma cadeia polimérica, empregando um AG com avaliação distribuída como mecanismo de síntese. Finalmente, a otimização de parâmetros de OLEDs é desenvolvida por meio de um método que modela o comportamento elétrico do dispositivo com multicamadas, onde cada camada possui uma proporção de MTE (material transportador de elétrons) e uma proporção de MTB (material transportador de buracos). As aplicações apresentam resultados que comprovam que o apoio de técnicas de Inteligência Computacional como os Algoritmos Genéticos no mundo nanométrico pode trazer benefícios para a criação e o desenvolvimento de novas tecnologias.

Palavras-chave

Nanotecnologia, Circuitos Moleculares, Algoritmos Genéticos, Polímeros Condutores, OLEDs

Abstract

Masiero, Leone Pereira. **Evolutionary Synthesis in Nanotechnology**. Rio de Janeiro, 2006. 104p. MSc. Dissertation - Departamento de Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

The first Nanotechnology concepts were introduced by the American physicist Richard Feynman in 1959, in his famous lecture entitled "There's plenty of room at the bottom." Computational Intelligence has been successfully used in various areas in the academic and industrial worlds. This work investigates the potential of Genetic Algorithms in the optimization and synthesis of devices and structures in the Nanotechnology domain, by means of 3 types of distinct applications: synthesis of molecular electronic circuits, design of new conducting polymers and optimization of OLEDs (Organic Light-Emitting Diodes) parameters. The synthesis of molecular electronic circuits is developed based on the Evolvable Hardware (EHW) paradigm and has as main elements two molecular devices simulated in SPICE: the molecular diode and the molecular transistor. The design of new conducting polymers is based on a methodology that combines an approximated tight-binding (simplified Hückel Hamiltonian) that represents the electronic structure of a polymer chain, using a GA with distributed evaluation as the synthesis mechanism. Finally, the optimization of OLEDs parameters is developed by means of a method that models the electric behavior of multi-layer devices, where each layer has a ratio of electron transport material (ETM) to hole transport material (HTM). The applications present results that demonstrate that the use of Computational Intelligence techniques, as Genetic Algorithms, in the nanometer world can bring benefits for the creation and development of new technologies.

Keywords

Nanotechnology, Molecular Circuits, Genetic Algorithms, Conductive Polymer, OLEDs

Sumário

1 Introdução	15
1.1. Motivação	16
1.2. Objetivos do Trabalho	17
1.3. Descrição do Trabalho	17
1.4. Organização da Dissertação	19
2 Nanotecnologia Computacional	20
2.1. Nanotecnologia	20
2.2. Nanotecnologia Computacional	23
2.3. Inteligência Computacional	25
3 Síntese de Circuitos Moleculares	28
3.1. Dispositivos Moleculares	28
3.1.1. Diodo Molecular de Tour-Reed	29
3.1.2. Transistor Molecular	31
3.2. Hardware Evolucionário	33
3.3. Síntese de Circuitos Moleculares Robustos	33
3.4. Experimentos	35
3.4.1. Representação Simples	36
3.4.1.1. Otimização de Valores de Componentes	36
3.4.1.2. Otimização da Topologia do Circuito e dos Valores dos Componentes	43
3.4.2. Representação por Matriz de Adjacências	50
3.4.3. Representação por Cubo de Adjacências	59
4 Otimização de Parâmetros de Dispositivos Moleculares	69
4.1. Organic Light-Emitting Diodes	69
4.2. Otimização de Parâmetros	73
4.3. Experimentos	75
5 Projeto de Novos Polímeros Condutores	80
5.1. Introdução	80
5.2. Metodologia	82

5.3. Experimentos	88
6 Conclusões e Trabalhos Futuros	92
6.1. Conclusões	92
6.2. Trabalhos Futuros	94
7 Referências Bibliográficas	95
Apêndice 1	98
GACOM	98
Introdução	98
A Modelagem do GACOM	99
Módulo do Processo de Evolução (Evolution)	100
Módulo do Processo de Avaliação (Evaluation)	100
Módulo das Estruturas Principais (GA)	102
Módulo de Interfaces	104
Referências Bibliográficas	104

Lista de figuras

Figura 1 – A interdisciplinaridade da Eletrônica Molecular [7].	21
Figura 2 – Rolamento molecular.	24
Figura 3 – Rolamento molecular desmontado.	24
Figura 4 – Processo de evolução de um AG.	26
Figura 5 – Curva característica do Diodo Molecular de Tour-Reed [2].	29
Figura 6 – Modelo da fonte de corrente controlada por tensão.	30
Figura 7 – Modelo simulado do diodo molecular em SPICE.	30
Figura 8 – Simulação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed.	30
Figura 9 – Curvas características do transistor molecular.	31
Figura 10 – Modelo simulado do transistor molecular em SPICE.	32
Figura 11 – Curva do dispositivo Spice que representa o Transistor Molecular.	32
Figura 12 – Processo extrínseco de síntese de circuito do Hardware Evolucionário.	34
Figura 13 – Variação do comportamento do Diodo Molecular de Tour-Reed.	35
Figura 14 – Variação do comportamento do Transistor Molecular.	35
Figura 15 – Representação dos valores dos componentes na representação simples.	37
Figura 16 – Inversor com topologia fixa e valores dos resistores otimizados.	37
Figura 17 – Avaliação da curva do inversor.	39
Figura 18 – Curvas de entrada e saída do circuito INVERSOR com valores otimizados dos componentes.	39
Figura 19 – Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos de otimização dos valores dos componentes.	40
Figura 20 – Curva de saída do INVERSOR utilizando a curva da esquerda (azul) da figura 13.	41
Figura 21 – Curva de saída do INVERSOR utilizando a curva do centro (verde) da figura 13.	41
Figura 22 – Curva de saída do INVERSOR utilizando a curva da direita (vermelha) da figura 13.	42
Figura 23 – Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos de otimização dos valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed.	42
Figura 24 – Exemplo do modelo do cromossomo para otimização de topologia e	

valores dos componentes.	43
Figura 25 – Modelagem final do circuito INVERSOR.	44
Figura 26 – Circuito final do cromossomo da figura 24.	45
Figura 27 – Função de avaliação do cromossomo da figura 24.	45
Figura 28 – Circuito sintetizado com otimização de topologia e valores dos componentes.	46
Figura 29 – Curvas do circuito da figura 28.	46
Figura 30 – Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos de otimização de topologia do circuito e valores dos componentes.	47
Figura 31 – Circuito encontrado otimizando a topologia e os valores dos componentes variando a curva do Diodo Molecular de Tour-Reed.	48
Figura 32 – Curva de saída do circuito da figura 31 utilizando a curva da esquerda (azul) da figura 13.	48
Figura 33 – Curva de saída do circuito da figura 31 utilizando a curva do centro (verde) da figura 13.	49
Figura 34 – Curva de saída do circuito da figura 31 utilizando a curva da direita (vermelha) da figura 13.	49
Figura 35 – Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos de otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed.	50
Figura 36 – Modelo de uma matriz de adjacência.	51
Figura 37 – Grafo gerado a partir de uma matriz de adjacência.	51
Figura 38 – Montagem da matriz de adjacência.	52
Figura 39 – Remoção de vértice que representa um nó sem ligação.	53
Figura 40 – Remoção de vértice que representa um nó conectado somente ao terra.	53
Figura 41 – Circuito final gerado através da matriz resultante da validação.	53
Figura 42 – Circuito encontrado utilizando matriz de adjacência.	55
Figura 43 – Curva de saída do circuito da figura 42.	55
Figura 44 – Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos com matriz de adjacência.	56
Figura 45 – Circuito encontrado utilizando matriz de adjacência com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed.	57
Figura 46 – Curva de saída do circuito da figura 45 utilizando a curva da esquerda (azul) da figura 13.	57
Figura 47 – Curva de saída do circuito da figura 45 utilizando a curva do centro	

(verde) da figura 13.....	58
Figura 48 – Curva de saída do circuito da figura 45 utilizando a curva da direita (vermelha) da figura 13.....	58
Figura 49 – Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos com matriz de adjacência com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed.....	59
Figura 50 – Representação gráfica do cubo de adjacências.....	60
Figura 51 – Representação em matrizes do cubo de adjacências da figura 50..	61
Figura 52 – Circuito representado pelo cubo de adjacências da figura 50.....	62
Figura 53 – Cubo de adjacências depois da remoção do nó inválido.....	62
Figura 54 – Circuito montado através do cubo de adjacências da figura 53.....	63
Figura 55 – Circuito encontrado utilizando cubo de adjacência.....	64
Figura 56 – Curva de saída do circuito da figura 55.....	65
Figura 57 – Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos com cubo de adjacência.....	65
Figura 58 – Circuito encontrado utilizando cubo de adjacência com variação da curva do Transistor Molecular.....	66
Figura 59 – Curva de saída do circuito da figura 58 utilizando a curva da esquerda (azul) da figura 14.....	66
Figura 60 – Curva de saída do circuito da figura 58 utilizando a curva do centro (verde) da figura 14.....	67
Figura 61 – Curva de saída do circuito da figura 58 utilizando a curva da direita (vermelha) da figura 14.....	67
Figura 62 – Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos com cubo de adjacência com variação da curva do Transistor Molecular.....	68
Figura 63 – Modelo básico de um OLED.....	70
Figura 64 – Estrutura molecular do NPB.....	70
Figura 65 – Estrutura molecular do Alq3.....	71
Figura 66 – Taxa de recombinação ao longo das camadas de um dispositivo.....	72
Figura 67 – Estrutura de subcamadas do dispositivo [45].....	73
Figura 68 – Exemplo de cromossomo do AG com 5 subcamadas internas.....	75
Figura 69 – Resultados obtidos em [45].....	76
Figura 70 – Curva de evolução dos experimentos com n igual a 1 e n' igual a 1.....	77
Figura 71 – Curva de evolução dos experimentos com n igual a 2 e n' igual a 2.....	77

Figura 72 – Curva de evolução dos experimentos com n igual a 1,5 e n' igual a 1,5.....	78
Figura 73 – Curva de evolução dos experimentos com n igual a 1,5 e n' igual a 2.	78
Figura 74 – Curva de evolução dos experimentos com n igual a 1 e n' igual a 2.	78
Figura 75 – Estrutura de um monômero denominado benzeno.....	81
Figura 76 – Representação gráfica de um benzeno.....	81
Figura 77 – Exemplo de uma cadeia polimérica.....	81
Figura 78 – Passos da montagem de uma cadeia.	83
Figura 79 – Definição da posição de cada unidade a partir de uma ordem aleatória.	83
Figura 80 – Unidades utilizadas em [53].	84
Figura 81 – Exemplo de unidade com suas posições.	85
Figura 82 – Cálculo da matriz hamiltoniana.	85
Figura 83 – Modelo de classes da implementação da distribuição da avaliação.86	
Figura 84 – Troca de informações entre cliente e servidor.....	87
Figura 85 – Processo de distribuição de avaliação do <i>plug-in</i>	88
Figura 86 – Curva de evolução dos experimentos com as unidades A e F.	89
Figura 87 – Curva de evolução dos experimentos com as unidades C e F.	89
Figura 88 – Curva de evolução dos experimentos com as unidades A, C e F....	90
Figura 89 – Curva de evolução dos experimentos com as unidades A, B, C, D e F.	91

Lista de tabelas

Tabela 1 – Valores dos componentes do circuito da figura 28.	46
Tabela 2 – Valores dos componentes do circuito da figura 31.	48
Tabela 3 – Valores dos componentes do circuito da figura 42.	55
Tabela 4 – Valores dos componentes do circuito da figura 45.	57
Tabela 5 – Componentes do cubo de adjacências da figura 50.	61
Tabela 6 – Valores dos componentes do circuito da figura 55.	64
Tabela 7 – Valores de $V/J^{1/2}$ apresentados em [45] e obtidos nesta dissertação.	79
Tabela 8 – Parâmetros de Hückel das unidades estudadas.....	84
Tabela 9 – Comparação entre os resultados obtidos e de referência.....	91