

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.

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

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 Lidiene, 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 molecular24
Figura 3 – Rolamento molecular desmontado24
Figura 4 – Processo de evolução de um AG26
Figura 5 – Curva característica do Diodo Molecular de Tour-Reed [2]
Figura 6 – Modelo da fonte de corrente controlada por tensão
Figura 7 – Modelo simulado do diodo molecular em SPICE
Figura 8 – Simulação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed
Figura 9 – Curvas características do transistor molecular
Figura 10 – Modelo simulado do transistor molecular em SPICE32
Figura 11 - Curva do dispositivo Spice que representa o Transistor Molecular. 32
Figura 12 - Processo extrínseco de síntese de circuito do Hardware
Evolucionário
Figura 13 - Variação do comportamento do Diodo Molecular de Tour-Reed35
Figura 14 - Variação do comportamento do Transistor Molecular
Figura 15 - Representação dos valores dos componentes na representação
simples
Figura 16 - Inversor com topologia fixa e valores dos resistores otimizados37
Figura 17 – Avaliação da curva do inversor
Figura 18 - Curvas de entrada e saída do circuito INVERSOR com valores
otimizados dos componentes
Figura 19 - Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos de
otimização dos valores dos componentes40
Figura 20 - Curva de saída do INVERSOR utilizando a curva da esquerda (azul)
da figura 1341
Figura 21 - Curva de saída do INVERSOR utilizando a curva do centro (verde)
da figura 1341
Figura 22 - Curva de saída do INVERSOR utilizando a curva da direita
(vermelha) da figura 1342
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-Reed42
Figura 24 - Exemplo do modelo do cromossomo para otimização de topologia e

valores dos componentes43
Figura 25 – Modelagem final do circuito INVERSOR
Figura 26 – Circuito final do cromossomo da figura 2445
Figura 27 – Função de avaliação do cromossomo da figura 2445
Figura 28 - Circuito sintetizado com otimização de topologia e valores dos
componentes46
Figura 29 – Curvas do circuito da figura 2846
Figura 30 - Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos de
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes47
Figura 31 - Circuito encontrado otimizando a topologia e os valores dos
componentes variando a curva do Diodo Molecular de Tour-Reed48
Figura 32 - Curva de saída do circuito da figura 31 utilizando a curva da
esquerda (azul) da figura 1348
Figura 33 - Curva de saída do circuito da figura 31 utilizando a curva do centro
(verde) da figura 1349
Figura 34 - Curva de saída do circuito da figura 31 utilizando a curva da direita
(vermelha) da figura 1349
Figura 35 - Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos de
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed
otimização de topologia do circuito e valores dos componentes com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-Reed

(verde) da figura 1358
Figura 48 - Curva de saída do circuito da figura 45 utilizando a curva da direita
(vermelha) da figura 1358
Figura 49 - Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos com
matriz de adjacência com variação da curva do Diodo Molecular de Tour-
Reed59
Figura 50 – Representação gráfica do cubo de adjacências60
Figura 51 - Representação em matrizes do cubo de adjacências da figura 5061
Figura 52 - Circuito representado pelo cubo de adjacências da figura 5062
Figura 53 – Cubo de adjacências depois da remoção do nó inválido62
Figura 54 – Circuito montado através do cubo de adjacências da figura 5363
Figura 55 – Circuito encontrado utilizando cubo de adjacência64
Figura 56 – Curva de saída do circuito da figura 5565
Figura 57 - Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos com
cubo de adjacência65
Figura 58 - Circuito encontrado utilizando cubo de adjacência com variação da
curva do Transistor Molecular66
Figura 59 - Curva de saída do circuito da figura 58 utilizando a curva da
esquerda (azul) da figura 1466
Figura 60 - Curva de saída do circuito da figura 58 utilizando a curva do centro
(verde) da figura 1467
Figura 61 - Curva de saída do circuito da figura 58 utilizando a curva da direita
(vermelha) da figura 1467
Figura 62 - Curvas de evolução dos melhores indivíduos dos experimentos com
cubo de adjacência com variação da curva do Transistor Molecular68
Figura 63 – Modelo básico de um OLED70
Figura 64 – Estrutura molecular do NPB70
Figura 65 – Estrutura molecular do Alq371
Figura 66 – Taxa de recombiação ao longo das camadas de um dispositivo72
Figura 67 – Estrutura de subcamadas do dispositivo [45]73
Figura 68 – Exemplo de cromossomo do AG com 5 subcamadas internas75
Figura 69 – Resultados obtidos em [45]76
Figura 70 – Curva de evolução dos experimentos com <i>n</i> igual a 1 e <i>n'</i> igual a 1.
Figura 71 – Curva de evolução dos experimentos com n igual a 2 e n' igual a 2.

Figura 72 – Curva de evolução dos experimentos com n igual a 1,5 e n' igual a
1,5
Figura 73 – Curva de evolução dos experimentos com n igual a 1,5 e n' igual a 2.
Figura 74 – Curva de evolução dos experimentos com n igual a 1 e n' igual a 2.
Figura 75 – Estrutura de um monômero denominado benzeno81
Figura 76 - Representação gráfica de um benzeno81
Figura 77 – Exemplo de uma cadeia polimérica81
Figura 78 – Passos da montagem de uma cadeia
Figura 79 - Definição da posição de cada unidade a partir de uma ordem
aleatória83
Figura 80 – Unidades utilizadas em [53]84
Figura 81 – Exemplo de unidade com suas posições
Figura 82 – Cálculo da matriz hamiltoniana
Figura 83 - Modelo de classes da implementação da distribuição da avaliação.86
Figura 84 - Troca de informações entre cliente e servidor
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 F89
Figura 88 - Curva de evolução dos experimentos com as unidades A, C e F90
Figura 89 - Curva de evolução dos experimentos com as unidades A, B, C, D e
F

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 di	ssertação.
	79
Tabela 8 – Parâmetros de Hückel das unidades estudadas	84
Tabela 9 – Comparação entre os resultados obtidos e de referência	91