

## 6

### Conclusões e Trabalhos Futuros

#### 6.1.

##### Conclusões

O estudo de novos materiais e dispositivos moleculares possui um ciclo de desenvolvimento complexo. A criação em laboratório dos materiais, bem como dos dispositivos que utilizam esses materiais, envolve processos demorados e caros, limitando a velocidade de evolução de tecnologias que se baseiam nesses estudos. A utilização de poder computacional inteligente para alavancar esses estudos é um dos grandes recursos que pesquisadores em Nanotecnologia possuem.

O desenvolvimento de softwares que simulam dispositivos moleculares contribui de forma significativa para o desenvolvimento de estudos em Nanotecnologia, trazendo maior velocidade e menor custo de desenvolvimento. A Nanotecnologia Computacional permite a simulação de processos químicos e físicos gerando resultados que podem orientar a direção de pesquisa de um determinado projeto, fazendo com que os caminhos que se podem percorrer diminuam, focalizando os esforços em caminhos mais promissores.

O desenvolvimento de circuitos moleculares é um dos caminhos promissores da Nanotecnologia. A possibilidade de se criar circuitos na escala molecular pode aumentar em muitas ordens de grandeza o poder de processamento dos equipamentos eletrônicos. A possibilidade de implementação de lógica em moléculas permitirá a criação de circuitos muito pequenos, mais rápidos e mais baratos, além de consumirem menos energia. A fabricação desses circuitos ainda é um desafio para a comunidade científica, visto que a interconexão em grande escala entre dispositivos moleculares com o mundo macroscópico ainda é muito complicada. Mas a criação de softwares que simulem o comportamento desses circuitos é de grande utilidade para o desenvolvimento da área. Isto porque a exatidão e a repetitividade em escala molecular são muito difíceis de serem obtidas, visto que o comportamento dos dispositivos moleculares pode variar de elemento para elemento devido ao

processo de fabricação ainda ser pouco desenvolvido. A utilização de uma plataforma molecular para simular tais circuitos moleculares mostrou que a síntese de circuitos moleculares pode ser feita, mesmo utilizando componentes com comportamentos diferenciados. Isso mostra que a fabricação de circuitos lógicos moleculares pode ser viável, mesmo que os dispositivos não tenham a repetitividade de comportamento que se deseja. A plataforma desenvolvida neste trabalho permitiu a simulação de circuitos moleculares ainda muito pequenos em comparação com o necessário, mas mostrou que a fabricação dos circuitos moleculares pode ser possível.

Dos estudos de otimização de parâmetros de dispositivos moleculares e criação de novos materiais (polímeros condutores) pode-se tirar conclusões semelhantes. A utilização de software com poder computacional inteligente pode fornecer resultados que direcionem expectativas para caminhos mais promissores e vantajosos.

O processo de fabricação de OLEDs, por exemplo, é um processo demorado e consome muito material, pois não se sabe *a priori* se um determinado modelo de dispositivo atenderá as expectativas. Depois que um dispositivo é fabricado, algumas medições são feitas com equipamentos especializados e pode-se chegar à conclusão que o dispositivo não atende ao que se deseja. Portanto, uma quantidade de material foi dispendida neste dispositivo, e esse processo se repete por algumas vezes até que se consiga algo satisfatório. Todo esse processo pode ser substituído por algumas simulações computacionais, economizando tempo e dinheiro.

Além do processo de fabricação dos OLEDs, o processo de criação de novos polímeros condutores passa pelo mesmo problema. A criação de cadeias que possuam uma condutância aceitável envolve gasto de material e tempo. Tudo isso pode ser diminuído se a simulação computacional desses materiais for feita, mostrando que determinadas soluções podem não ser aceitáveis.

Nas 3 aplicações desenvolvidas nesse trabalho, a Inteligência Computacional, como mais um recurso da Nanotecnologia Computacional, mostrou ser capaz de resolver problemas complexos na área da Nanotecnologia. Este pode ser um passo inicial para o desenvolvimento da Nanotecnologia Computacional com apoio inteligente de técnicas inspiradas no comportamento humano.

## 6.2.

### Trabalhos Futuros

A plataforma molecular desenvolvida mostrou ser capaz de simular circuitos moleculares, mas os circuitos simulados ainda estão aquém do necessário em complexidade. A criação de novas portas, como por exemplo a porta NAND e a porta NOR, poderá permitir a criação de circuitos maiores, como por exemplo um *full-adder*, e assim a conexão destes circuitos maiores poderá se chegar à criação de um computador molecular. Para isso, o aperfeiçoamento de dispositivos moleculares e a concepção de novos são necessários,.

Na otimização de parâmetros dos OLEDs, a única variação feita pelo AG foi a proporção de cada material em cada subcamada. Em trabalhos futuros, a variação das larguras das camadas, assim como o número de camadas, pode ser feita. Assim, além da composição de cada camada, a estrutura do OLED pode ser otimizada, podendo trazer resultados melhores, visto que a estrutura do dispositivo não é fixa. A utilização de outros materiais que não o Alq3 e o NPB também pode ser feita.

No projeto de novos polímeros condutores, a variação do número de unidades monoméricas na cadeia pode ser feita, a fim de verificar se algumas propriedades convergem. A utilização de outros tipos de unidades monoméricas também pode ser feita de forma a encontrar polímeros com condutâncias melhores, além de otimizar a ordem das unidades na cadeia.