

# 1

## Introdução

### 1.1

#### Motivação

A Nanociência e a Nanotecnologia têm sido vistas com um grande potencial para propiciar benefícios em diversas áreas, tais como o desenvolvimento de novos medicamentos, despoluição da água e do ar, aperfeiçoamento das tecnologias de comunicação e informação, produção eficiente de energia, desenvolvimento de materiais mais leves e resistentes etc.

A Nanotecnologia e a Nanociência são áreas genuinamente interdisciplinares. Elas têm possibilitado a colaboração entre pesquisadores de áreas diferentes, permitindo a troca de informações, ferramentas e técnicas. Um entendimento da química e física da matéria e de processos na escala nanométrica é relevante para todas as disciplinas científica, desde a química e a física até a biologia, medicina, engenharia e ciência dos materiais. A figura 1.1 ilustra algumas áreas de atuação da Nanotecnologia e algumas de suas aplicações.

Esta área do conhecimento lida com estruturas da matéria que possuem dimensões da ordem de um bilionésimo do metro. Não é fácil determinar quando o ser humano tirou proveito de materiais na escala nanométrica pela primeira vez. Sabe-se que no século IV antes de cristo os romanos fabricavam vidros usando metais na escala nanométrica. Por exemplo, a grande variedade de diferentes e bonitas cores nos vitrais das catedrais medievais é devido à presença de nanopartículas, como ouro e prata, no vidro fabricado (Poole, 2003).

Porém, foi somente nos últimos anos que ferramentas sofisticadas foram desenvolvidas para investigar e manipular a matéria na escala nanométrica, propiciando um avanço nas pesquisas e um aumento significativo no número de descobertas e desenvolvimentos tecnológicos. Dois marcos deste novo avanço científico e tecnológico foram as invenções do microscópio de tunelamento (scanning tunneling microscope - STM) em 1982 e o microscópio de força atômica (atomic force microscope - AFM) em 1986. Estas ferramentas utilizam uma ponta nanométrica para produzir imagens de uma superfície com resolução atômica, além de serem capazes de manipular átomos e moléculas, possibilitando a criação de nanoestruturas

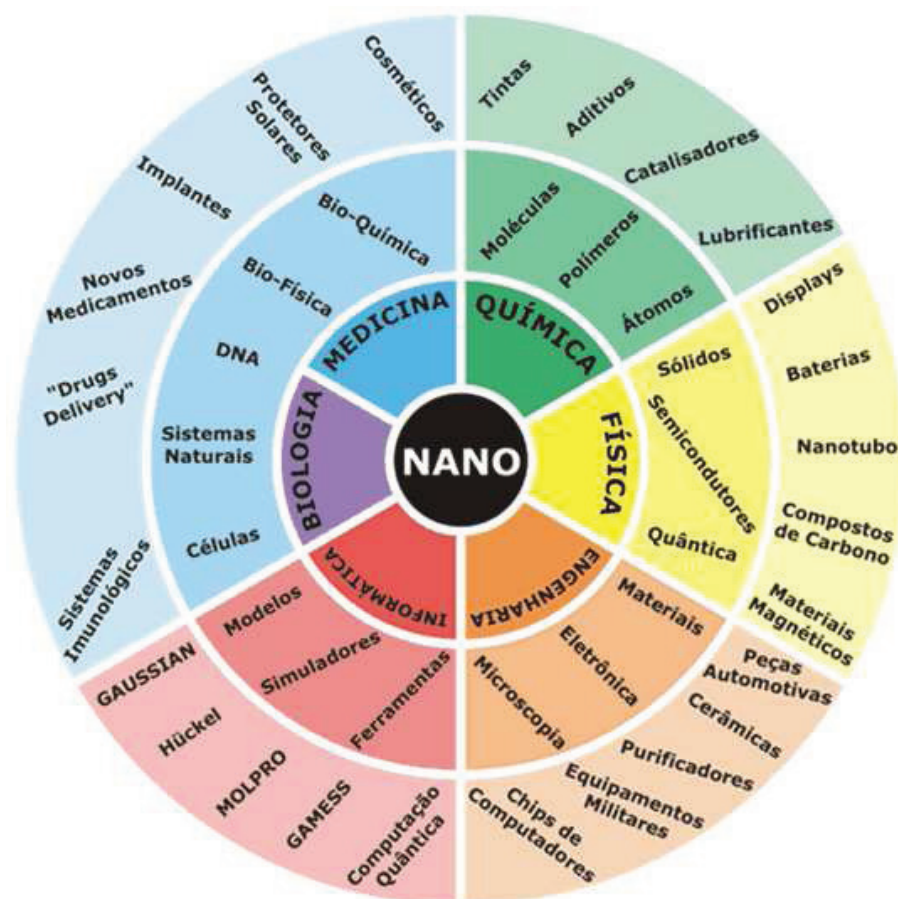


Figura 1.1: Áreas de Atuação e desenvolvimento da Nanotecnologia.

rudimentares.

Aliado a este desenvolvimento da Nanotecnologia e da Nanociência vem o desenvolvimento de modelos computacionais de sistemas químicos e físicos, que permitem aos pesquisadores a simulação de possíveis nanomateriais, dispositivos e aplicações. O apoio dos sistemas de computação recebe o nome de “Nanotecnologia Computacional”. Alguns desses sistemas de apoio à Nanotecnologia utilizam técnicas de Inteligência Computacional, o que poder-se-ia chamar de “Nanotecnologia Computacional Inteligente”. Porém, o uso de técnicas de Inteligência Computacional no desenvolvimento e auxílio da Nanotecnologia e da Nanociência pode ser mais explorado, até mesmo pelo fato de se poder considerar a Nanotecnologia e a Nanociência como áreas novas e ainda pouco exploradas.

A Inteligência Computacional fornece uma variedade de técnicas inspiradas na natureza, tais como Algoritmos Genéticos (AG), Redes Neurais Artificiais (RNA) e Sistemas Fuzzy, empregadas no desenvolvimento de sistemas inteligentes. Hardware Evolucionário (EHW), por exemplo, se refere à síntese automática e à otimização de circuitos eletrônicos, utilizando sistemas reconfiguráveis controlados por Algoritmos Genéticos. EHW pode ser adaptada e, conseqüentemente, aplicada no desenvolvimento de nanodispositivos. No caso dos circuitos eletrônicos,

os processos de síntese automática e otimização consideram um espaço de busca composto por todos os possíveis circuitos que podem ser implementados com os dispositivos disponíveis. Circuitos são continuamente simulados e avaliados a fim de encontrar um circuito otimizado que implemente a lógica desejada. EHW já foi aplicado com sucesso na síntese automática de circuitos convencionais e não convencionais (Zebulum, 2002), em diferentes aplicações (digital, analógico, VLSI CMOS, etc.). Redes Neurais Artificiais, por outro lado, são inspiradas na estrutura e comportamento do cérebro humano e têm sido usadas em uma variedade de problemas. As RNA podem, por exemplo, serem usadas na classificação de padrões, previsão de séries temporais e aproximação de funções, abstraindo informações de grandes bases de dados.

A combinação destas técnicas inteligentes com a Nanociência e a Nanotecnologia pode ser fundamental para acelerar o desenvolvimento de aplicações nanotecnológicas revolucionárias. Dentre os possíveis benefícios causados por essas técnicas podemos citar a síntese automática de nanoestruturas e nanodispositivos inimagináveis, a inferência de propriedades de novos materiais baseado em experimentos anteriores, a simulação mais eficientes de nanodispositivos, etc.

## 1.2

### Objetivos

Este trabalho tem como objetivo principal investigar o papel da Inteligência Computacional no desenvolvimento da Nanotecnologia e Nanociência. As aplicações de Inteligência Computacional na Nanotecnologia e Nanociência são investigadas em três diferentes processos: caracterização, projeto e simulação. Em caracterização, o objetivo é investigar o uso de técnicas de inferência no desenvolvimento de um sistema de previsão do comportamento de nanodispositivos em função dos parâmetros utilizados na síntese. Já o projeto pode ser dividido em dois subprojetos distintos. O primeiro visa, em conjunto com o sistema de inferência já descrito, obter os parâmetros ótimos para a síntese de nanodispositivos. O segundo projeto pretende projetar novas estruturas com o auxílio de simuladores, através da otimização dos parâmetros e da estrutura. Por fim, a respeito da simulação, o objetivo é investigar como a Inteligência Computacional pode aumentar a eficiência dos simuladores e auxiliar os pesquisadores a obterem resultados semelhantes aos obtidos experimentalmente.

## 1.3

### Contribuições

Em função dos objetivos apresentados acima, este trabalho se concentrou na investigação do papel da Inteligência Computacional no apoio ao desenvolvimento

da Nanociência e Nanotecnologia. Diferentes estudos foram realizados e as contribuições fornecidas por este trabalho estão listadas a seguir:

- **Sistema de Inferência de Nanoestruturas:** esta tese propôs e desenvolveu um sistema de inferência capaz de prever as propriedades de diferentes nanoestruturas antes mesmo de sua produção. Tal sistema é aqui denominado “Experimento Virtual”. Tal caracterização só pode ser realizada devido ao desenvolvimento de um sistema computacional que, a partir de experimentos anteriormente realizados, aprende a relacionar os parâmetros de síntese das nanoestruturas com as propriedades de saída. Neste trabalho, dois estudos de casos diferentes são apresentados e ambos apresentam bons resultados. Um estudo foi publicado no Journal of Crystal Growth (Singulani, 2008), um dos mais renomados meios de circulação na área de crescimento epitaxial no meio acadêmico, e o outro foi recentemente submetido a uma revista científica na área de compósitos.
- **Projeto Automático de Nanodispositivos:** neste caso, utiliza-se Algoritmos Genéticos para o projeto automático de nanodispositivos, otimizando a estrutura de modo a encontrar soluções inovadoras e otimizadas. Dois tipos de nanodispositivos diferentes foram automaticamente projetados neste trabalho. Circuitos de Autômatos Celulares com Pontos Quânticos (QCA) robustos e LEDs orgânicos emissores de luz (OLED). Ambos apresentaram soluções inovadoras e inimagináveis.
- **Otimização de Parâmetros para Simulação:** os Algoritmos Genéticos, juntamente com o software de modelagem molecular Gaussian03, otimizam os parâmetros de funções que geram expoentes de primitivas gaussianas de funções de base para cálculos hartree-fock, obtendo energias menores do que aquelas apresentadas nas referências. Estes resultados serão em breve submetidos para publicação.
- **Otimização de Agregados Atômicos e Moleculares:** novamente os Algoritmos Genéticos, em conjunto com algoritmos de otimização local presentes no Gaussian03, se mostram eficientes na busca pelas geometrias de baixa energia dos agregados atômicos de  $(LiF)_nLi^+$ ,  $(LiF)_n$  e  $(LiF)_nF^-$ , obtendo uma série de novos isômeros ainda não propostos na literatura, principalmente para  $n > 2$ ; Os resultados obtidos para os agregados neutros e positivos foram recentemente publicados no Journal of Physical Chemistry A (Fernandez, 2009). Já os resultados para os agregados negativos já foram aceitos e serão publicados em breve na mesma revista. Além disso, uma metodologia semelhante é aplicada em um sistema inédito para entender a formação de agregados moleculares de  $H_2O$  iônicos, partindo-se de agregados neutros. Os resultados

mostram como os agregados podem ser obtidos a partir de diferentes perspectivas, formando estruturas ainda não investigadas na área científica. Os resultados obtidos estão sendo compilados em um artigo que será em breve submetido a uma revista científica internacional.

#### 1.4

#### Descrição do Trabalho

Este trabalho foi desenvolvido em 8 etapas descritas a seguir:

- **Um estudo sobre Nanociência e Nanotecnologia.** Para isso realizou-se uma pesquisa bibliográfica sobre Nanociência e Nanotecnologia. Nesta etapa estudaram-se os aspectos históricos, os fundamentos, bem como o desenvolvimento da Nanotecnologia até os dias atuais.
- **Um estudo das técnicas de Inteligência Computacional.** O estudo resultou na escolha das técnicas utilizadas nas aplicações desenvolvidas neste trabalho.
- **Um estudo sobre Nanotecnologia Computacional.** Realizou-se uma pesquisa bibliográfica com o objetivo de verificar a situação atual do apoio computacional à Nanociência e Nanotecnologia. Fez-se um estudo sobre modelagem molecular a fim de conhecer e utilizar os métodos computacionais.
- **Inferência de Nanodispositivos.** Esta etapa pode ser dividida em três sub-etapas. A primeira é a obtenção de dados a partir de experimentos realizados por especialistas. A segunda é a escolha do modelo de inferência utilizado. E por fim a realização dos experimentos e validação dos resultados.
- **Inferência e Otimização de Nanodispositivos.** Esta etapa utiliza-se do sistema de inferência descrito anteriormente. Os parâmetros de entrada do sistema de inferência são otimizados por um Algoritmo Genético com o objetivo de sintetizar nanodispositivos com características pré-determinadas.
- **Otimização de Nanodispositivos.** Esta etapa visa à utilização de um Algoritmo Genético, juntamente com um simulador de nanodispositivo, para projetar automaticamente o nanodispositivo de maior eficiência.
- **Otimização de Parâmetros de Simulação.** Aqui, pretende-se otimizar parâmetros usados em sistemas de modelagem molecular, aplicados tanto para cálculos de dispositivos nanométricos quanto para cálculo de sistema sub-nanométricos. Pretende-se otimizar as funções de base de modelos *ab initio*.
- **Otimização da Geometria Molecular.** Nesta etapa foram usados sistemas evolutivos para a otimização da geometria molecular e busca de conformações de agregados atômicos e moleculares.

## 1.5

### Organização do Trabalho

Esta tese está dividida em 7 capítulos adicionais, descritos a seguir:

O capítulo 2 discute o apoio computacional à Nanociência e Nanotecnologia, classificando e discutindo cada uma das linhas importantes.

O capítulo 3 introduz e descreve resumidamente as principais técnicas de Inteligência Computacional usadas neste trabalho.

O capítulo 4 discute a utilização de técnicas de Inteligência Computacional no projeto e otimização de dispositivos nanoestruturados. Duas aplicações são apresentadas: Pontos Quânticos e Nanocompósitos.

O capítulo 5 apresenta o projeto automático de nanodispositivos através da otimização das estruturas e dos parâmetros envolvidos. Duas aplicações são apresentadas: Os circuitos de QCA e os OLEDs multicamadas.

O capítulo 6 apresenta e discute a otimização de funções de base utilizadas em cálculos de modelagem molecular *ab initio*.

O capítulo 7 apresenta o uso da computação evolutiva na otimização da geometria de agregados atômicos e moleculares. Os casos estudados e os novos operadores propostos serão apresentados e discutidos.

E, finalmente, o capítulo 8 conclui o trabalho e apresenta as sugestões de trabalhos futuros.