

1

Introdução

A Nanotecnologia não é uma ciência nova e 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”) [1]. Nesta palestra, Feynman explorou a idéia de escrever toda a enciclopédia britânica na cabeça de um alfinete. Para isso devia-se manipular a matéria na escala de átomos e moléculas individuais.

Muitos processos químicos também possuem características nanométricas. O mundo natural também contém muitos exemplos de estruturas nanométricas. As nanopartículas surgem naturalmente e têm sido criadas há milhares de anos como produtos de combustões e produção de comidas com o cozimento.

Contudo, ferramentas sofisticadas que permitem a manipulação de átomos e moléculas só foram desenvolvidas recentemente, o que contribuiu para a investigação e manipulação da matéria em escala nanométrica, afetando nosso entendimento sobre o mundo nanoscópico. Dominando-se o poder de manipular átomos e moléculas através dessas ferramentas, estruturas moleculares podem ser criadas para realizar funções de armazenamento e transferência de energia. Porém, obter um comportamento bem definido de tais moléculas ainda é um desafio para os pesquisadores.

A Inteligência Computacional tem sido utilizada com sucesso em diversas áreas nos meios acadêmico e industrial. Os Algoritmos Genéticos (AGs), as Redes Neurais Artificiais e a Lógica Fuzzy, por exemplo, são técnicas que imitam aspectos humanos, tais como: evolução, adaptação, aprendizado, percepção e raciocínio. Essas técnicas são usadas para resolver problemas de controle, otimização de produção, reconhecimento digital, alocação de recursos, entre outros.

Os AGs, com base na teoria evolutiva das espécies, foram propostos por John H. Holland nos anos 60, um pesquisador da Universidade de Michigan, que os definiu como um algoritmo matemático para otimização de sistemas complexos [2]. Este algoritmo pretendia simular matematicamente o mecanismo

da evolução biológica, com todas as características e vantagens desse processo. A partir dos anos oitenta, os Algoritmos Genéticos receberam um grande impulso em diversas áreas de aplicação científica, devido, principalmente, a sua versatilidade e aos excelentes resultados apresentados. A popularização dos computadores e o aparecimento de sistemas cada vez mais rápidos e potentes também auxiliaram muito seu desenvolvimento.

A técnica de Hardware Evolucionário (EHW) - síntese automática de circuitos e estruturas físicas por algoritmos evolucionários - explora soluções não imaginadas por um especialista devido a larga abrangência dentro do espaço de soluções possíveis e tem demonstrado o potencial dos AGs em sintetizar circuitos, sistemas e estruturas que estão além do escopo das técnicas tradicionais de projeto.

1.1.

Motivação

Com a iminência de se alcançar o limite de miniaturização dos componentes eletrônicos, a busca por novas tecnologias tem recebido a atenção de pesquisadores em todo o mundo. Os circuitos moleculares, baseados em moléculas ou conjuntos de moléculas, são uma dessas tecnologias estudadas e podem oferecer a possibilidade de se criar novos componentes que permitam um aumento da capacidade de processamento dos equipamentos eletrônicos. Todavia, a interconexão entre esses novos componentes é um desafio, pois se trata de interconexões entre moléculas ou conjunto de moléculas. Além disso, a variação de comportamento entre componentes de um mesmo tipo prejudica o desenvolvimento de circuitos moleculares, pois a escalabilidade dos mesmos é variável.

Outras duas tecnologias estudadas nesta dissertação são os OLEDs (*Organic Light-Emitting Diodes*) e os polímeros condutores. Esses sistemas, em geral, envolvem processos experimentais muito complexos, onde o desperdício de tempo e matéria-prima é grande.

A utilização de softwares que auxiliem o processo de *design* e fabricação desses circuitos, dispositivos e materiais é um dos recursos que possuem os pesquisadores em Nanotecnologia. Todavia, aplicações em Nanotecnologia requerem, em geral, grande poder computacional, devido ao fato de se trabalhar em uma escala métrica muito pequena, onde a manipulação é feita sobre átomos e moléculas. Em conseqüência, soluções para essas aplicações podem

envolver cálculos complexos e em grande número, o que demanda substancial esforço computacional.

1.2.

Objetivos do Trabalho

O objetivo desta pesquisa é investigar o potencial dos Algoritmos Genéticos (AGs) como ferramenta de apoio ao desenvolvimento de aplicações em Nanotecnologia. A expectativa é que essa investigação possa apontar caminhos para a criação (síntese) e otimização de estruturas e sistemas em escala nanométrica, possibilitando a redução de tempo, material e mão-de-obra, variáveis estas indispensáveis para a realização de experimentos nessa área.

Para alcançar este objetivo, esta dissertação apresenta a aplicação de Algoritmos Genéticos em três casos da Nanotecnologia:

- Desenvolvimento de uma plataforma extrínseca baseada em Hardware Evolucionário para sintetizar circuitos moleculares, levando em consideração a variabilidade do funcionamento dos dispositivos moleculares;
- Otimização de parâmetros de OLEDs (*Organic Light-Emitting Diodes*) com multicamadas;
- Projeto de novos polímeros condutores utilizando um AG com avaliação distribuída.

1.3.

Descrição do Trabalho

Este trabalho apresenta três aplicações em Nanotecnologia utilizando a Inteligência Computacional como ferramenta de apoio. Para isso, inicialmente realizou-se um estudo na área de engenharia de software para o desenvolvimento de um *framework* de componentes de software para Algoritmos Genéticos, denominado GACOM (ver apêndice 1), o qual foi empregado nos estudos de caso. A seguir, foi realizada uma pesquisa bibliográfica sobre nanoeletrônica, com o intuito de levantar informações quanto às técnicas já existentes e aos dispositivos moleculares já estudados para a síntese de circuitos moleculares. Além disso, foi feito um estudo bibliográfico sobre o comportamento dos OLEDs e métodos computacionais que pudessem descrever

esse comportamento. Por fim, realizou-se um estudo sobre cadeias poliméricas e metodologias que definem a estrutura eletrônica dessas cadeias.

Depois do desenvolvimento do GACOM (ver apêndice 1) e do estudo bibliográfico, foram desenvolvidas 3 aplicações:

Plataforma evolucionária

Esta plataforma foi desenvolvida, baseada em Hardware Evolucionário, para sintetizar circuitos com componentes moleculares. Na primeira fase, a plataforma limitava-se a sintetizar circuitos com componentes moleculares de dois terminais com topologia fixa, nos quais eram otimizados somente os valores dos componentes que formavam o circuito. Na segunda fase, a plataforma já permitia a variação da topologia dos circuitos, dando maior flexibilidade ao AG mas gerando muitos circuitos inválidos. Na terceira fase, foi utilizada uma técnica denominada matriz de adjacências [3], que permite a geração de poucos circuitos inválidos. Na quarta e última fase desse estudo, foi criada uma técnica denominada cubo de adjacências, que permite a criação de circuitos com componentes moleculares de três terminais com poucos indivíduos inválidos.

Otimização de parâmetros de OLEDs

Uma aplicação que otimiza parâmetros de OLEDs com multicamadas foi desenvolvida. Cada camada possui uma proporção de MTE (material transportador de elétrons) e uma proporção de MTB (material transportador de buracos). Nesta aplicação, a proporção de cada material em cada camada é otimizada de forma a se encontrar uma configuração de proporções que represente um dispositivo com uma relação $V/J^{1/2}$ (tensão aplicada sobre fluxo de corrente no dispositivo) mínima.

Projeto de novos polímeros condutores

O projeto de novos polímeros condutores é uma aplicação que utiliza um AG com avaliação distribuída, com o objetivo de encontrar polímeros (cadeias poliméricas) com máxima condutividade possível. Para desenvolver essa aplicação, primeiro foi desenvolvido um *plugin* para o GACOM (ver apêndice 1) que tratasse da distribuição da avaliação de uma população do AG. A partir desse *plugin*, foram realizados casos de teste e comparações com o trabalho de referência.

1.4.

Organização da Dissertação

Esta dissertação está dividida em 5 capítulos adicionais. O capítulo 2 introduz o conceito de Nanotecnologia Computacional, onde alguns trabalhos relacionados ao tema são apresentados. No capítulo 3, apresentam-se os dispositivos moleculares simulados, que foram utilizados na síntese de circuitos com componentes moleculares, bem como os resultados obtidos. No capítulo 4 são apresentadas a aplicação de otimização de parâmetros de OLEDs e a técnica utilizada, juntos com os resultados da simulação. O capítulo 5 descreve o método utilizado para projetar cadeias poliméricas e seus resultados, em comparação com um trabalho de referência. O capítulo 6 finaliza a dissertação apresentando conclusões sobre os estudos realizados e uma discussão sobre trabalhos futuros.