

2

Nanotecnologia Computacional

O desenvolvimento de novas tecnologias vem atraindo pesquisadores de todo o mundo. Maior capacidade de processamento e armazenamento para os equipamentos eletrônicos e melhor qualidade de visualização de informações estão entre os objetivos desses estudos.

Para se chegar a tais objetivos, a miniaturização dos componentes eletrônicos é necessária, chegando à escala de nanômetros, onde está definida a Nanotecnologia. A fabricação desses componentes ainda é um desafio para as áreas acadêmica e industrial devido ao estágio em que se encontram as ferramentas que podem ser utilizadas no processo de fabricação.

Contudo, o projeto e a modelagem desses componentes podem ser facilmente realizados com a tecnologia atual, sendo uma maneira fácil e barata de explorar verdadeiramente a ampla escala de sistemas moleculares possíveis de serem implementados, permitindo uma rápida avaliação e eliminação de sistemas não funcionais e definindo o foco de investigação em sistemas promissores.

2.1.

Nanotecnologia

A Nanotecnologia é a ciência e a tecnologia de coisas pequenas – em particular, coisas que possuem tamanho menor que 100nm. No processo de desenvolvimento deste novo conceito de tecnologia, existem duas abordagens – Bottom-Up e Top-Down. A abordagem *Bottom-Up* inicia o desenvolvimento a partir de estruturas nanométricas, como átomos e moléculas, e através de um processo de montagem ou auto-montagem são criados mecanismos maiores. Na abordagem Top-Down mecanismos e estruturas com uma tecnologia já existente são miniaturizados até a escala nanométrica. Aplicações em Nanotecnologia vêm sendo desenvolvidas em todo o mundo buscando avanços tecnológicos. A Eletrônica Molecular, que tem como um dos objetivos criar circuitos moleculares que processem informação na escala molecular, é uma das várias áreas

tecnológicas que possuem aplicações nanotecnológicas. Como o limite de miniaturização dos componentes baseados na tecnologia convencional CMOS está prestes a ser alcançado [4], determinando o fim da trajetória de aumento de capacidade de processamento dos equipamentos eletrônicos, a Eletrônica Molecular poderia ser uma saída para vencer essa barreira.

A Eletrônica Molecular, utilizando moléculas ou conjuntos de moléculas [5], permitiria a construção de equipamentos funcionais com tamanho reduzido e baixo custo de fabricação em relação à tecnologia convencional CMOS, mantendo assim a tendência de crescimento da capacidade de processamento dos equipamentos eletrônicos. Dispositivos eletrônicos moleculares podem oferecer muitas vantagens em relação aos dispositivos CMOS, incluindo integração em áreas muito menores e reduzidos tempos de resposta [6].

A Eletrônica Molecular é um campo interdisciplinar (figura 1) que combina os esforços de biólogos, químicos, físicos, matemáticos, cientistas biomédicos, engenheiros, etc. As moléculas que são usadas para construir sistemas moleculares são capazes de conduzir e transferir energia entre elas. Se o processo puder ser manipulado e controlado, será possível fazer com que essas moléculas ou estruturas moleculares executem tarefas para processamento de informação. Isto inclui tarefas básicas como as dos circuitos, tais como codificar, processar e armazenar informação. Com todo o conhecimento dos químicos, bioquímicos e físicos, há um grande número de possibilidades de pesquisa de estruturas moleculares para processamento de sinal. Isto significa que existem possibilidades suficientes de estruturas e mecanismos, pelo menos em teoria, que podem ser usados para realizar as funções necessárias em nível molecular.

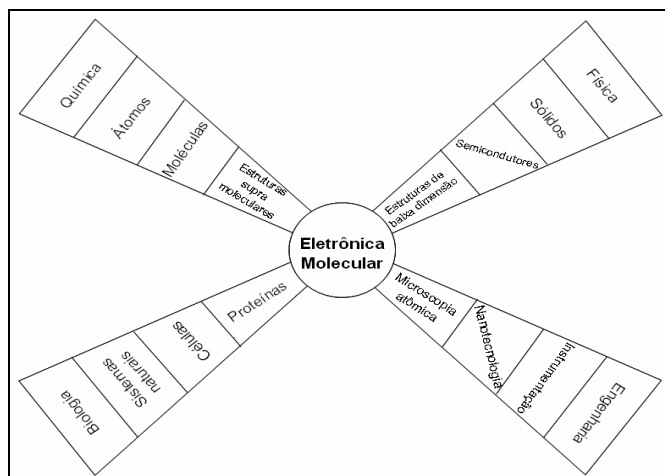


Figura 1 – A interdisciplinaridade da Eletrônica Molecular [7].

Além do processamento de informação, sistemas moleculares podem emitir luz, como pode ser visto na tecnologia dos OLEDs (*Organic Light-Emitting Diodes*). Esta tecnologia utiliza compostos que emitem luzes vermelha, verde, azul e branca, uma vez que submetidos à excitação elétrica. Sem qualquer outra fonte de iluminação, equipamentos que utilizam esta tecnologia apresentam brilho, vídeos nítidos e imagens fáceis de serem vistas de qualquer ângulo [8].

A tecnologia OLED foi inventada pela Eastman Kodak por volta de 1980 e está começando a substituir a tecnologia LCD em dispositivos portáteis tais como PDAs e telefones celulares, por permitir maior brilho (intensidade de luz), ter tamanho reduzido, ser mais rápida e ter maior luminosidade do que a tecnologia LCD, além de consumir menos energia, oferecer maior contraste e ser mais barata para produzir. Algumas empresas já produzem aparelhos com a tecnologia OLED como, por exemplo, Sony e Samsung [9]. No capítulo 4 é descrito de forma mais detalhada o funcionamento da tecnologia OLED.

Outra aplicação da Nanotecnologia é a construção de novos materiais condutores, mais especificamente polímeros condutores. Há aproximadamente 30 anos atrás, todos os polímeros baseados em carbono eram considerados como isolantes. Certamente, os plásticos foram usados extensivamente pela indústria da eletrônica como material para empacotamento e como isolante. A idéia de que poderiam ser produzidos plásticos para conduzir eletricidade era considerada absurda. Esta perspectiva vem mudando rapidamente, e vem surgindo uma nova classe de polímeros, conhecida como polímero condutor ou polímero eletroativo. Embora esta nova classe esteja em seu início de desenvolvimento, como esteve a indústria plástica nas décadas de 30 a 50, o uso potencial destes novos polímeros é extremamente significativo [10].

Embora diversos polímeros condutores tenham suas vantagens, concluiu-se que eles não poderiam competir com os metais em aplicações elétricas tradicionais, como fios e cabos de transmissão, por exemplo. Uma dentre as diversas aplicações desses polímeros foi desenvolvida na área biomédica, onde foi criado um dispositivo chamado biosensor de glicose [11]. Este dispositivo não somente detecta a presença de glicose como estima a concentração dessa substância. O princípio envolve a imobilização de uma enzima e um apropriado mediador em uma matriz de polímeros condutores, revestindo um chip apropriado. Neste dispositivo, a quantidade de carga transferida (isto é, a corrente que passou num intervalo de tempo) é proporcional à concentração de glicose presente na solução. A especificidade da enzima (que oxida somente glicose) dá ao dispositivo uma característica muito importante, que é a habilidade

de saber detectar glicose mesmo com a presença de diversos outros componentes (como por exemplo, sangue ou urina).

Protótipos desses biosensores microamperométricos de glicose baseados em chips de silício vêm sendo fabricados por várias companhias e estarão em breve em laboratórios de análises clínicas para estimativa de glicose, para supervisão *on-line* de pacientes diabéticos, por exemplo. Outras aplicações de polímeros condutores, como baterias poliméricas, displays eletrocromáticos e OLEDs estão em desenvolvimento [11].

2.2.

Nanotecnologia Computacional

Um dos princípios básicos dos pesquisadores em Nanotecnologia é inspirado na frase do matemático Paul Dirac: **“As leis fundamentais necessárias para o tratamento matemático de uma grande parte da física e de todas as partes da química são completamente conhecidas. A dificuldade está somente no fato de que as aplicações dessas leis levam a equações muito complexas de serem resolvidas”** [12].

Com o avanço da tecnologia, a possibilidade de se desenvolver softwares que resolvam tais equações complexas originou o conceito de Nanotecnologia Computacional. Softwares de CAD molecular, de modelagem molecular que incluem pacotes computacionais na área de química, isto é, mecânica molecular e programas semi-empíricos e *ab initio*, vêm sendo desenvolvidos e, juntamente com ferramentas correlatas, podem permitir aos pesquisadores um planejamento de fabricação de sistemas moleculares.

Como um dos grandes desafios da Nanotecnologia é construir macro dispositivos com precisão em nível atômico, a utilização de softwares que permitam a visualização dos sistemas moleculares que compõem um determinado objeto seria extremamente útil. Estes softwares são desenvolvidos com base em algumas técnicas como, por exemplo, a mecânica molecular e cálculos *ab initio* de ordem mais elevada.

A mecânica molecular permite a modelagem computacional das posições e das trajetórias dos núcleos de átomos individuais sem uma carga computacional desnecessária. Os pacotes atuais disponíveis em computadores pessoais podem prontamente fazer minimizações de energia em sistemas com milhares de átomos, enquanto que supercomputadores podem resolver sistemas com centenas de milhares de átomos ou mais. Análises mais complexas,

particularmente as que envolvem busca em grandes espaços de configurações, podem limitar o tamanho do sistema que pode ser efetivamente resolvido.

Enquanto campos empíricos de força devam ser suficientemente exatos para modelar o comportamento das estruturas quimicamente estáveis que interagem com outras estruturas quimicamente estáveis, a mecânica molecular não garante (atualmente) a exatidão suficiente para tratar as reações químicas. Assim, se é desejado modelar a estrutura de uma parte molecular (tal como o eixo do rolamento nas figuras 2 e 3) então deve-se usar técnicas *ab initio* de ordem mais elevada.

Estas técnicas impõem restrições no número de átomos que podem ser modelados (dependendo do hardware, do software e do tipo específico de modelagem), mas podem fornecer uma exatidão suficiente para analisar as reações químicas que devem necessariamente ocorrer durante a síntese de estruturas grandes, atômicas precisas [13].

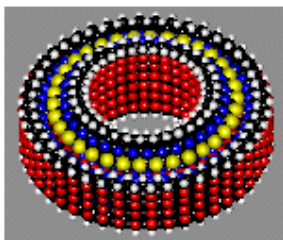


Figura 2 – Rolamento molecular.

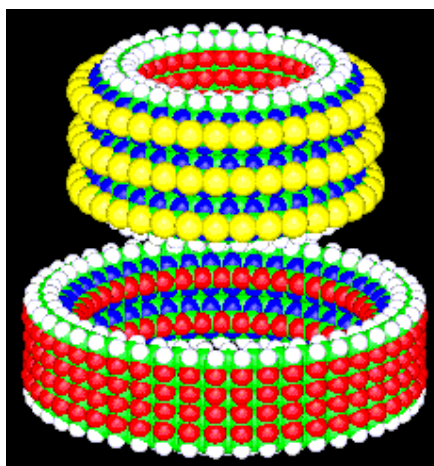


Figura 3 – Rolamento molecular desmontado.

2.3.

Inteligência Computacional

A Inteligência Computacional busca, através de técnicas inspiradas na Natureza, o desenvolvimento de sistemas inteligentes que imitem aspectos do comportamento humano, tais como: aprendizado, percepção, raciocínio, evolução e adaptação. Algoritmos Genéticos (AGs) são modelos inteligentes inspirados na evolução biológica que, através de métodos adaptativos, conseguem localizar soluções potenciais, sem considerar exaustivamente todas as possíveis soluções para o problema.

Os AGs são aplicados à solução de problemas reais, através de métodos generalizados de busca e otimização que simulam os processos naturais de evolução, aplicando a idéia darwiniana de seleção. De acordo com a aptidão e a combinação com outros operadores genéticos, são produzidos métodos de grande robustez e aplicabilidade.

Estes algoritmos estão baseados nos processos genéticos dos organismos biológicos, onde uma possível solução a um problema pode ser representada por um *cromossomo* composto por cadeia de *bits* e caracteres. Estes cromossomos representam indivíduos que são levados ao longo de várias gerações, na forma similar aos problemas naturais, evoluindo de acordo com os princípios de seleção natural e sobrevivência dos mais aptos, descritos pela primeira vez por Charles Darwin em seu livro "Origem das Espécies" [14].

Emulando estes processos, os AGs são capazes de *evoluir* soluções de problemas do mundo real. Na natureza os indivíduos competem entre si por recursos como comida, água e refúgio. Adicionalmente, entre os animais de uma mesma espécie, aqueles que não obtêm êxito tendem provavelmente a ter um número reduzido de descendentes, tendo portanto menor probabilidade de que seus genes sejam propagados ao longo de sucessivas gerações. A combinação entre os genes dos indivíduos que perduram na espécie pode produzir um novo indivíduo muito mais adaptado às características de seu meio ambiente.

Os AGs utilizam uma analogia direta com este fenômeno de evolução na natureza, onde cada indivíduo representa uma possível solução para um determinado problema. A cada indivíduo se atribui uma pontuação de adaptação, dependendo da resposta dada ao problema por este indivíduo. Aos mais adaptados é dada a oportunidade de reproduzir-se mediante cruzamentos com outros indivíduos da população, produzindo descendentes com características de ambas as partes.

Se um AG for desenvolvido corretamente, a população (conjunto de possíveis respostas) convergirá a uma solução sub-ótima ou ótima para o problema proposto. Os processos que mais contribuem para a evolução são: o *crossover*, a adaptação baseada na *seleção/reprodução* e a *mutação*, que também tem um papel significativo. Mesmo em uma evolução aleatória, o AG assegura que nenhum ponto do espaço de busca tem probabilidade zero de ser examinado.

Toda tarefa de busca e otimização possui vários componentes, entre eles o espaço de busca, onde são consideradas todas as possibilidades de solução de um determinado problema, e a função de avaliação, uma maneira de avaliar os membros do espaço de busca. As técnicas de busca e otimização tradicionais iniciam-se com um único candidato que, iterativamente, é manipulado utilizando algumas heurísticas (estáticas) diretamente associadas ao problema a ser solucionado. Por outro lado, as técnicas de computação evolucionária operam sobre uma população de candidatos em paralelo. Assim, elas podem realizar a busca simultaneamente em diferentes áreas do espaço de solução, alocando um número de membros apropriado para a busca em várias regiões.

AGs são muito eficientes para busca de soluções ótimas, ou sub-ótimas, em uma grande variedade de problemas, pois não possuem muitas das limitações encontradas nos métodos de busca tradicionais. Um AG pode ser descrito como um processo contínuo que repete ciclos de evolução controlados por uma condição de parada, conforme apresentado pela figura 4.

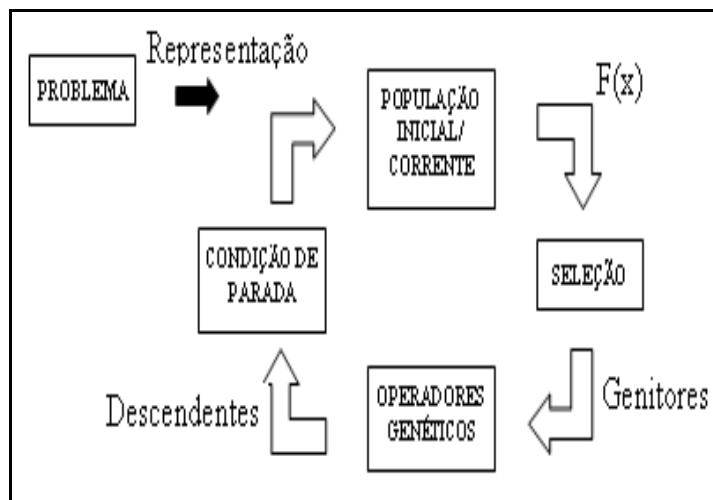


Figura 4 – Processo de evolução de um AG.

O poder computacional inteligente fornecido por um AG pode trazer benefícios às ferramentas nanotecnológicas computacionais, onde geralmente grandes espaços de busca devem ser explorados de forma a encontrar uma solução para um determinado problema.