

SUMÁRIO

| | |
|------------------------|-----|
| Apresentação | XI |
| Sobre os Autores | XIX |

Parte 1

CONSIDERAÇÕES TEÓRICAS

| | |
|---|----------|
| 1 NANOTECNOLOGIA COMPUTACIONAL INTELIGENTE | |
| <i>Omar Paranaíba Vilela Neto</i> | 3 |
| 1.1 Modelagem Molecular | 5 |
| 1.2 Simulação de Nanodispositivos | 6 |
| 1.3 Computação de Alto Desempenho | 7 |
| 1.4 Nanoinformática | 9 |
| 1.4.1 Tecnologia da Informação em Outras Áreas de Pesquisa | 9 |
| 1.4.2 Os Benefícios da Nanoinformática | 11 |
| 1.5 Computação Inspirada na Nanotecnologia | 14 |
| 1.6 Nanotecnologia Computacional Inteligente | 15 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 2 | INTRODUÇÃO À NANOCIÊNCIA E À NANOTECNOLOGIA | |
| | <i>Omar Paranaíba Vilela Neto</i> | 17 |
| 2.1 | Fundamentos | 24 |
| 2.2 | Taxonomia da Nanociência e da Nanotecnologia | 27 |
| 2.3 | Ferramentas | 31 |
| 2.3.1 | Técnicas de Síntese | 32 |
| 2.3.2 | Técnicas de Análise | 36 |
| 2.4 | Aplicações | 39 |
| 3 | QUÍMICA COMPUTACIONAL | |
| | <i>Renato Barbosa de Oliveira • Bruno Mattos Souza de Souza Melo</i> <i>Douglas Mota Dias • Omar Paranaíba Vilela Neto</i> | 45 |
| 3.1 | Átomos Hidrogenoides | 49 |
| 3.2 | O Método de Hartree-Fock | 57 |
| 3.2.1 | Átomos | 61 |
| 3.2.2 | Moléculas | 62 |
| 3.2.3 | Sistemas Estendidos | 68 |
| 3.3 | A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) | 71 |
| 3.3.1 | Descrição Teórica | 72 |
| 3.3.2 | O Funcional de Correlação e Troca | 75 |
| 3.4 | Métodos <i>ab Initio</i> e Semiempíricos | 79 |
| 3.5 | Métodos Semiclássicos I – Mecânica Molecular | 80 |
| 3.5.1 | Campos de Força | 82 |
| 3.5.2 | Funções de Potencial Importantes | 85 |
| 3.5.3 | O Potencial de Dois Corpos BFW | 92 |
| 3.5.4 | O Potencial <i>ab Initio</i> | 93 |
| 3.5.5 | O Potencial Iônico e Polar | 93 |
| 3.5.6 | Campos de Força Comumente Disponíveis | 94 |
| 3.5.7 | Outros Campos de Potencial Úteis | 101 |
| 3.5.8 | Méritos e Deméritos da Abordagem por Campos de Força | 103 |
| 3.5.9 | Parametrização | 105 |
| 3.5.10 | Alguns Pacotes de <i>Software</i> para MM | 106 |
| 3.6 | Métodos Semiclássicos II – Dinâmica Molecular | 107 |
| 3.6.1 | Princípios Básicos | 108 |
| 3.6.2 | Potenciais em Dinâmica Molecular | 111 |

| | | |
|--------|--------------------------------|-----|
| 3.6.3 | Potenciais Empíricos | 112 |
| 3.6.4 | Potenciais Semiempíricos | 113 |
| 3.6.5 | Métodos <i>ab Initio</i> | 114 |
| 3.6.6 | Métodos Híbridos | 114 |
| 3.6.7 | Integração Numérica | 115 |
| 3.6.8 | Algoritmo de Verlet | 115 |
| 3.6.9 | Algoritmo Leapfrog | 116 |
| 3.6.10 | Técnicas de Simulação | 117 |

4 MODELAGEM DE NANODISPOSITIVOS

| | |
|--|------------|
| <i>Anderson Pires Singulani</i> | 121 |
| 4.1 Modelagem do Mundo Físico | 123 |
| 4.1.1 Equações Diferenciais | 123 |
| 4.1.2 Discretização para Abordagem Computacional | 124 |
| 4.2 Métodos Numéricos | 127 |
| 4.2.1 Sistema de Equações Lineares | 128 |
| 4.2.2 Sistema de Equações não Lineares | 128 |
| 4.3 Simuladores | 129 |
| 4.3.1 QCADesigner | 129 |
| 4.3.2 Nextnano | 129 |
| 4.3.3 ADEPT | 130 |
| 4.3.4 SIMOLED | 130 |

5 COMPUTAÇÃO DE ALTO DESEMPENHO

| | |
|---|------------|
| <i>Douglas Mota Dias • Cleomar Pereira da Silva</i> | 131 |
| 5.1 Introdução | 131 |
| 5.2 Computação Paralela | 132 |
| 5.3 Computadores Paralelos | 133 |
| 5.3.1 Instrução Única, Dados Únicos (SISD) | 133 |
| 5.3.2 Instrução Única, Dados Múltiplos (SIMD) | 133 |
| 5.3.3 Instrução Múltipla, Dados Múltiplos (MIMD) | 134 |
| 5.4 Principais Modelos de Programação Paralela | 135 |
| 5.4.1 Memória Compartilhada | 135 |
| 5.4.2 Linhas de Execução (<i>Threads</i>) | 136 |

| | | |
|-------|--|-----|
| 5.4.3 | Troca de Mensagens | 137 |
| 5.4.4 | Paralelismo de Dados | 138 |
| 5.5 | Computação Reconfigurável | 139 |
| 5.6 | Computação de Propósito Geral em Processadores | |
| | Gráficos | 139 |
| 5.7 | Aplicações..... | 140 |
| 5.7.1 | Química Quântica..... | 140 |
| 5.7.2 | Dinâmica Molecular | 141 |
| 5.7.3 | Simulação de Nanodispositivos | 142 |

6 TÉCNICAS DE INTELIGÊNCIA COMPUTACIONAL

André Vargas Abs da Cruz • Carlos Roberto Hall Barbosa

Juan Guillermo Lazo Lazo • Karla Figueiredo

Leandro Fontoura Cupertino • Luciana Faletti Almeida

Marco Aurélio C. Pacheco • Marley Maria B. R. Vellasco

Omar Paranaíba Vilela Neto • Yván Jesús Túpac Valdivia **145**

| | | |
|-------|---|-----|
| 6.1 | Computação Evolucionária | 146 |
| 6.1.1 | Algoritmos Genéticos..... | 147 |
| 6.1.2 | Coevolução..... | 152 |
| 6.1.3 | Algoritmo Genético com Inspiração na Computação Quântica | 158 |
| 6.1.4 | Algoritmos Genéticos Distribuídos | 162 |
| 6.1.5 | Programação Genética (PG) | 169 |
| 6.2 | Redes Neurais | 186 |
| 6.2.1 | Histórico | 186 |
| 6.2.2 | Definição | 187 |
| 6.2.3 | O Neurônio Artificial | 188 |
| 6.2.4 | Função de Ativação..... | 189 |
| 6.2.5 | Topologia das Redes Neurais Artificiais..... | 190 |
| 6.2.6 | Tipo de Treinamento | 193 |
| 6.2.7 | <i>Backpropagation</i> | 194 |
| 6.2.8 | Redes de Elman..... | 196 |
| 6.2.9 | Funções Radiais (<i>Radial Basis Functions</i> – RBF) | 199 |

Parte 2

APLICAÇÕES

7 INFERÊNCIA E OTIMIZAÇÃO DE NANOESTRUTURAS

Omar Paranaíba Vilela Neto • Anderson Pires Singulani

Leandro Fontoura Cupertino • Marco Aurélio C. Pacheco

Marley Maria B. R. Vellasco • José Roberto d'Almeida

Maurício Pamplona Pires • Patrícia Lustoza de Souza **207**

7.1 Introdução 208

7.2 Pontos Quânticos – PQ 209

7.2.1 Inferência 212

7.2.2 Otimização 219

7.3 Nanocompósitos 221

7.3.1 Inferência 223

7.3.2 Otimização 231

8 PARAMETRIZAÇÃO DE MODELAGEM MOLECULAR

Omar Paranaíba Vilela Neto • Iury Steiner Bezerra

André Silva Pimentel • Marco Aurélio C. Pacheco **233**

8.1 Introdução 233

8.2 Criando uma Função de Base 236

8.3 Método da Coordenada Geradora Hartree-Fock
– GCHF 237

8.4 Expansão Polinomial 239

8.5 Detalhes Computacionais 240

8.6 Resultados e Discussões 240

9 OTIMIZAÇÃO DE AGREGADOS ATÔMICOS E MOLECULARES

Omar Paranaíba Vilela Neto • André Silva Pimentel

Ênio Frota da Silveira • Francisco Alberto Fernandez Lima

Marco Aurélio C. Pacheco • Cássia R. Ponciano

Marco Antônio Chaer Nascimento **251**

9.1 Introdução 251

9.2 Histórico 252

| | | |
|-------|--|-----|
| 9.3 | Descrição do Problema | 254 |
| 9.3.1 | Representação dos Indivíduos e Geração da População Inicial | 255 |
| 9.3.2 | Avaliação e Seleção dos Genitores | 257 |
| 9.3.3 | Operadores | 258 |
| 9.4 | Agregados de Li e F | 260 |
| 9.4.1 | Agregados de $(\text{LiF})_n \text{Li}^+$ | 260 |
| 9.4.2 | Agregados de $(\text{LiF})_n$ | 263 |
| 9.4.3 | Agregados de $(\text{LiF})_n \text{F}^-$ | 264 |
| 9.5 | Agregados de H_2O | 266 |
| 9.5.1 | Agregados de $(\text{H}_2\text{O})_n$ | 267 |
| 9.5.2 | Agregados de $(\text{H}_2\text{O})_n^+$ | 269 |
| 9.5.3 | Agregados de $(\text{H}_2\text{O})_n \text{I}$ | 271 |

10 LOCALIZAÇÃO DE ESTRUTURAS DE TRANSIÇÃO DE REAÇÕES QUÍMICAS

Bruno Mattos Souza de Souza Melo • Omar Paranaíba Vilela Neto

André Silva Pimentel • Marco Aurélio C. Pacheco **281**

| | | |
|--------|--|-----|
| 10.1 | Estruturas de Transição | 281 |
| 10.1.1 | Introdução | 281 |
| 10.2 | Localizando Estruturas de Transição | 283 |
| 10.2.1 | Métodos Baseados em Interpolação | 283 |
| 10.2.2 | Métodos Locais | 288 |
| 10.2.3 | Proposta de Algoritmo Coevolucionário para a Busca de Estruturas de Transição | 289 |
| 10.2.4 | Nível de Teoria | 295 |

11 OTIMIZAÇÃO DE NANODISPOSITIVOS

Omar Paranaíba Vilela Neto • Bruno Messer • Cristiano Legnani

Kelly de Carvalho Teixeira • Marco Aurélio C. Pacheco

Marco Cremona • Vanessa Luz E. Calil

Welber Gianini Quirino **297**

| | | |
|------|---|-----|
| 11.1 | Otimização de Parâmetros de Dispositivos Moleculares | 297 |
| 11.2 | O Modelo de OLED Multicamada | 299 |

| | | |
|-----------|---|------------|
| 11.3 | A Otimização Evolucionária | 300 |
| 11.4 | Resultados e Discussões | 303 |
| 12 | SIMULAÇÃO DE CIRCUITOS DE QCA | |
| | <i>Omar Paranaíba Vilela Neto • Carlos Roberto Hall Barbosa</i> | 307 |
| 12.1 | Autômatos Celulares com Pontos Quânticos (QCA) | 307 |
| 12.1.1 | Princípio dos Dispositivos | 307 |
| 12.1.2 | Dispositivos Lógicos Básicos | 311 |
| 12.1.3 | Células Rotacionadas e Circuitos em um Plano ... | 314 |
| 12.1.4 | Zonas de <i>Clock</i> | 316 |
| 12.1.5 | Circuitos Lógicos já Desenvolvidos | 320 |
| 12.1.6 | Alternativas de Fabricação | 320 |
| 12.2 | Simuladores de QCA | 322 |
| 12.2.1 | Simuladores de QCA Existentes | 323 |
| 12.2.2 | Rede Neural do Tipo Hopfield | 324 |
| 12.2.3 | Considerações sobre os Dispositivos Simulados ... | 326 |
| 12.2.4 | A Simulação | 335 |
| 12.2.5 | Resultados | 337 |
| 13 | SÍNTESE EVOLUTIVA EM NANOTECNOLOGIA | |
| | <i>Omar Paranaíba Vilela Neto • Leone Pereira Masiero</i> | |
| | <i>Carlos Roberto Hall Barbosa • Marco Aurélio C. Pacheco</i> | 343 |
| 13.1 | Síntese Automática de Circuitos de QCA por | |
| | Algoritmo Genético | 343 |
| 13.1.1 | Representação dos Indivíduos | 345 |
| 13.1.2 | Avaliação dos Indivíduos | 349 |
| 13.1.3 | Porta Lógica OU com Quatro Entradas | 351 |
| 13.1.4 | Multiplexador | 356 |
| 13.1.5 | Somador Completo | 361 |
| 13.2 | Síntese de Circuitos Moleculares | 366 |
| 13.2.1 | Dispositivos Moleculares | 367 |
| 13.2.2 | <i>Hardware</i> Evolucionário | 372 |
| 13.2.3 | Síntese de Circuitos Moleculares Robustos | 373 |
| 13.2.4 | Experimentos | 375 |

14 FÁRMACOS

Bartira Rossi Bergmann • Camila Alves Bandeira Falcão

Reinaldo Bellini Gonçalves **413**

14.1 Nanobiotecnologia 414

14.2 Acoplamento Molecular Proteína-Ligante 433

APÊNDICES **447**

REFERÊNCIAS **453**