

Inteligência Computacional Aplicada à Síntese de Semicondutores Quaternários *InAlGaAs*

André Sousa Figueiredo Silva*, Artur M. Mota Costa*, Fernando Carvalho Coelho*, Omar Paranaíba Vilela Neto*, Rudy M. Sakamoto Kawabata†, Patrícia L. Souza† e Maurício Pamplona Pires‡

*Departamento de Ciência da Computação
UFMG - Belo Horizonte, MG, Brasil

Email: andresfs,artur.costa,fc Coelho,omar@dcc.ufmg.br

†LabSem - Centro de Telecomunicações - CETUC
PUC-Rio - Rio de Janeiro, RJ, Brasil

E-mail: rudykawa,plustoza@cetuc.puc-rio.br

‡Instituto de Física

UFRJ - Rio de Janeiro, RJ, Brazil

E-mail: pires@if.ufrj.br

Resumo—Nós aplicamos duas técnicas de Inteligência Computacional, neste caso, Rede Neural Artificial e Algoritmo Genético para o crescimento de semicondutores quaternários de *InAlGaAs*. O método consiste em utilizar uma base de dados existente da síntese de semicondutores quaternários, contendo os parâmetros de crescimento e suas respectivas concentrações, para obter os parâmetros de crescimento necessários para atingir o material desejado com as concentrações corretas. A Rede Neural Artificial foi usada para associar os parâmetros de entrada para o crescimento com as concentrações finais dos elementos formadores do semicondutor. As concentrações foram inferidas corretamente e, posteriormente, o Algoritmo Genético foi aplicado para obter o conjunto correto de parâmetros de entrada. O material desejado foi encontrado com sucesso, guiando os especialistas no crescimento da estrutura correta.

I. INTRODUÇÃO

O interesse em nanociência e nanotecnologia vem aumentando devido ao grande potencial que esta nova área tem em propiciar benefícios em diversos campos, possibilitando o desenvolvimento de novos materiais com propriedades aprimoradas e inovadoras. Segundo os cientistas, a nanotecnologia será capaz de mudar a natureza de quase tudo que já foi feito pelos seres humanos, gerando um impacto em áreas como medicina, engenharia, telecomunicações, energia, computação, dentre outros [1]. Como consequência, poderemos ter 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 nanociência e a nanotecnologia são áreas genuinamente interdisciplinares e têm possibilitado a colaboração entre pesquisadores de áreas distintas, permitindo a troca de informações, ferramentas e técnicas.

Lidar com elementos na escala nanométrica não é trivial e exige um investimento alto. Equipamentos com esta precisão não são comuns em quaisquer laboratórios de pesquisa e, por isto, pesquisadores podem ter dificuldades no acesso a tais facilidades. Além disto, existem outros custos, tais como a preparação de amostras e tempo de esforço do pesquisador.

O prévio conhecimento da estrutura pelo pesquisador é um fator muito importante. Analisar uma estrutura por completo pode ser impraticável e quando o pesquisador já possui um conhecimento da estrutura ele consegue direcionar o seu foco para regiões que ele entende ser o mais provável de encontrar o que procura.

Em um material sólido cristalino, os elétrons estão distribuídos em bandas de energia permitidas [2]. Os elétrons vão preenchendo estas bandas a partir dos níveis de menor energia. Os isolantes possuem a última banda ocupada completamente cheia de elétrons e, por esta razão, um campo elétrico externo não pode alterar o momentum total dos elétrons que é nulo. Já os condutores possuem a última banda semi-cheia e, neste caso, é possível mudar os estados dos elétrons com um campo elétrico, gerando corrente elétrica. Por fim, alguns materiais são isolantes a $T = 0K$, mas possuem uma energia de GAP (E_g) relativamente pequena, da ordem de $1eV$. E_g é a energia entre a última banda ocupada (também conhecida como banda de valência) e a primeira banda totalmente vazia de elétrons (banda de condução). À temperatura ambiente, elétrons podem passar de uma banda para outra e estes materiais têm uma condutividade significativa, sendo então conhecidos como semicondutores. Desenvolver materiais quaternários com concentrações específicas demanda bastante tempo de experimentação e cada material possui E_g diferente, podendo ser útil para diferentes aplicações. Os quaternários são materiais semicondutores compostos por quatro elementos.

Com o objetivo de auxiliar o pesquisador na descoberta de conhecimento e reduzir o tempo gasto em experimentação no processo de fabricação dos semicondutores quaternários, este trabalho visa desenvolver um algoritmo que determinará os parâmetros de síntese dos quaternários para diferentes concentrações dos elementos *Índio*, *Gálio* e *Alumínio*. Desta forma, uma Rede Neural Artificial (RNA) foi treinada para inferir as concentrações dos materiais, dados os parâmetros de entrada. Os dados usados para o treinamento da RNA foram fornecidos pelos pesquisadores do Laboratório de Semicondutores (LabSem) da PUC-Rio. Posteriormente, um Algoritmo

Genético (AG) foi utilizado para encontrar o conjunto de parâmetros de entrada ótimo que leva à síntese da estrutura desejada.

Algoritmos computacionais podem ser uma boa alternativa para auxiliar o pesquisador na descoberta de conhecimento. A utilização de algoritmos de inferência já vem sendo aplicada à síntese de nanoestruturas. Existem atualmente diversos trabalhos disponíveis na literatura com algoritmos capazes de resolver problema específicos, tais como [3], [4], [5], [6] e [7].

Através do auxílio do algoritmo computacional é esperado que a obtenção de quaternários com concentrações específicas seja realizada de forma rápida e automática. Atualmente elas são obtidas através de estudos anteriores (quaternários conhecidos) ou através de tentativa e erro (quaternários desconhecidos).

Este trabalho está organizado da seguinte forma: a seção II descreve os semicondutores quaternários; a seção III apresenta a descrição do problema; a modelagem da RNA e seus resultados são apresentados na seção IV; a otimização é discutida e os resultados são apresentado na seção V; e, finalmente, a seção VI apresenta as conclusões.

II. SEMICONDUTOR QUATERNÁRIO

Para aplicações em optoeletrônica é desejável a utilização de semicondutores que possuam energia de *gap* direto [2]. Em um semiconductor com *gap* direto, o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução estão no mesmo vetor de onda. Já existem diversos materiais amplamente estudados na literatura que atendem este requisito. Em específico, para o emprego em detecção de infravermelho utilizam-se principalmente os denominados semicondutores tipo III-V e tipo II-VI.

A obtenção destes semicondutores em dimensões macro-métricas e em larga escala só é possível para uma gama pequena de composições entre átomos da coluna III (ou coluna II) e átomos da coluna V (ou coluna VI) da tabela periódica. Na Figura 1, estão representados alguns destes materiais III-V binários (eg. *GaAs*, *InP*, *InSb*, etc) que hoje em dia são fabricados em dimensões da ordem de centímetros ou maiores. No entanto, nesta figura também estão representadas ligas mais complexas (ternárias ou quaternárias, correspondente a 3 ou 4 tipos de átomos diferentes, respectivamente) que necessitam de um processo de produção, denominado crescimento, que não gera um material com medidas superiores a micrometros em pelo menos uma das dimensões.

O processo de crescimento exige o uso de uma base (substrato) sobre o qual são depositados os átomos formadores do material ternário ou quaternário. Esta base impõe que o material depositado sobre ela adquira inicialmente sua estrutura cristalina. Caso o semiconductor crescido e a base não possuam parâmetros de rede compatíveis, a qualidade do semiconductor crescido é comprometida. Por este motivo, usualmente busca-se crescer materiais cujos parâmetros de rede sejam iguais ao do substrato. Os parâmetros de rede determinam as distâncias entre os átomos de um cristal.

A necessidade de utilização de semicondutores ternários ou quaternários embasa-se em obter uma maior flexibilidade de materiais abrangendo uma faixa larga de energias de *gap*

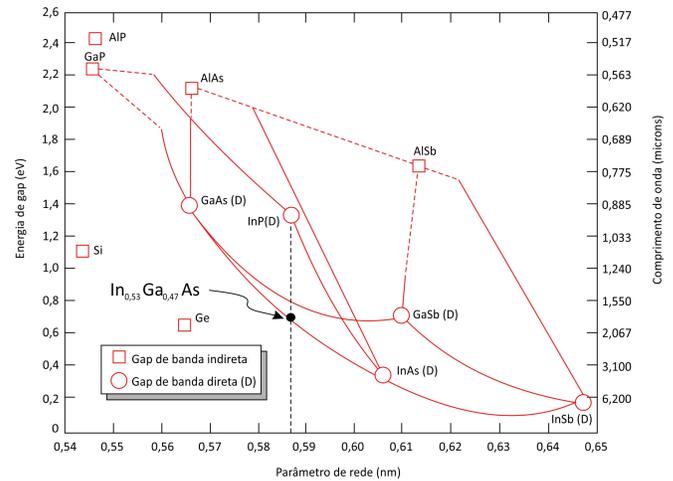


Figura 1. [8] Energia de *gap* em função do parâmetro de rede de semicondutores da família III-V. Destaque para as linhas que representam a liga formada pela mistura dos binários das extremidades de cada linha (eg. *InGaAs* entre os binários *GaAs* e *InAs*).

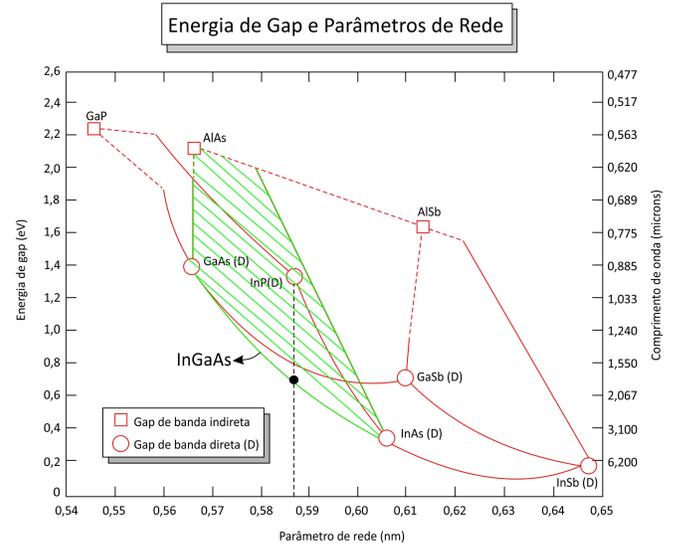


Figura 2. [8] adaptado - Energia de *gap* em função do parâmetro de rede de semicondutores da família III-V. Destaque para a área hachurada que representa a liga quaternária *InGaAlAs* da mistura dos binários *InAs*, *GaAs* e *AlAs*.

para aplicações em optoeletrônica. Na Figura 1 e Figura 2 apresentam-se exemplos de materiais semicondutores ternários (eg. *InGaAs*, ver Figura 1) e quaternários (eg. *InAlGaAs*, ver região hachurada Figura 2).

A limitação dada pelo parâmetro de rede do substrato (eg. substrato de *InP*) restringe em apenas uma possibilidade as composições disponíveis para materiais ternários crescidos sobre este (eg. $In_{0,53}Ga_{0,47}As$ para ternário de *InGaAs* sobre *InP*, ver Figura 1). Contudo, materiais quaternários desfrutam de toda uma gama de composições possíveis e, consequentemente, energias de *gap* possíveis, conservando o mesmo parâmetro de rede do substrato (eg. $In_{(1-x-y)}Al_xGa_yAs$, ver Figura 2).

No caso específico de quaternários crescidos sobre substrato de *InP*, os mais comumente utilizados são os de *InGaAsP*

e o $InAlGaAs$. Por muitos anos o estudo sobre $InGaAsP$ esteve muito a frente de estudos sobre $InAlGaAs$ devido a dificuldade de se produzir este último por LPE (*liquid phase epitaxy*), uma vez que o Al possui um elevado coeficiente de partição [9]. Contudo, o quaternário $InAlGaAs$ tem a vantagem de abarcar uma faixa de energias de *gap* maior do que o $InGaAsP$. De acordo com [10], a relação da energia de *gap* do quaternário de $InAlGaAs$ em função da composição à temperatura de 300K é dada por: $Eg(z)[eV] = 0,76 + 0,49z + 0,2z^2$ ($0 \leq z \leq 1$); onde a concentração de $Al := x = 0,48z$; e a concentração de $Ga := y = 0,468 - 0,983x$. Com esta relação verifica-se que ao variar a composição x e y deste quaternário, atingem-se energias de *gap* desde 0,76eV até 1,45eV, contra limites de 0,76eV e 1,344eV para o $InGaAsP$ [10].

Por estas circunstâncias, é de grande relevância o estudo do crescimento dos semicondutores quaternários $InAlGaAs$. Dentre os principais equipamentos para crescimento encontra-se o reator de MOVPE (*MetalOrganic Vapor Phase Epitaxy*). Esta técnica tem o poder de produzir materiais com avançado controle tanto na composição quanto nas dimensões da liga semicondutora pretendida. Contudo, para atingir este controle, deve-se calibrar com precisão todos os parâmetros de entrada do equipamento, o que envolve: temperatura e pressão ao qual o substrato é submetido, fluxos dos precursores de cada elemento da liga semicondutora, quanto tempo o substrato é exposto aos precursores, etc. Devido ao extenso número de parâmetros, a sensibilidade de alguns destes e a larga área de possibilidades de resultados para quaternários, esta calibração requer estudos cuidadosos para obter-se precisão e acurácia no produto final.

III. DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

Obter quaternários $InAlGaAs$, com diferentes concentrações, é um desafio experimental onde o pesquisador tem que configurar o seu reator com os diversos parâmetros de síntese e verificar se a combinação testada obteve as concentrações desejadas. A motivação para o desenvolvimento deste trabalho veio do desafio encontrado pelos pesquisadores do LabSem que desejavam sintetizar os semicondutores com as concentrações conhecidas. Contudo, não há um modelo que relaciona os parâmetros usados como entrada pelo reator com as concentrações finais. Além disso, caso um modelo venha a ser desenvolvido, este é específico para um determinado reator, já que cada equipamento tem comportamento e calibragem distintos.

A solução encontrada para resolver o problema foi utilizar a base de dados de diversas sínteses já realizadas no LabSem e criar um modelo. Dada à natureza não-linear dos dados, uma RNA foi usada para realizar a inferência das concentrações a partir dos parâmetros de entrada do reator. Ao todo, os dados de 107 experimentos de síntese de $InAlGaAs$ foram utilizados para o treinamento da RNA.

Por fim, como o objetivo final era encontrar quais parâmetros de entrada do reator levam à síntese do material com as concentrações desejadas, o problema inverso foi tratado. Neste caso, um Algoritmo Genético foi usado para variar os parâmetros de entrada e estes dados eram então apresentados à RNA para inferir quais concentrações seriam obtidas. De posse dos valores de concentração desejados, estes

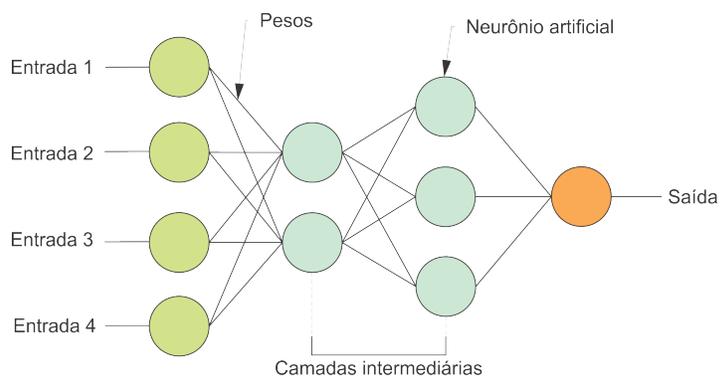


Figura 3. Esquema de uma rede neural com duas camadas intermediárias.

são então comparados com os valores obtidos pela RNA e um valor de erro era então calculado. Desta forma, o objetivo final é minimizar o erro, descobrindo quais parâmetros permitem a síntese do material com as concentrações desejadas

Este trabalho faz parte de uma ferramenta mais ampla desenvolvida em nosso grupo, conhecida como NanoTrack [11], que tem como principal objetivo o gerenciamento de dados de laboratórios de nanotecnologia. O usuário da ferramenta pode utilizar o sistema aqui proposto sempre que achar necessário.

IV. RNA PARA A INFERÊNCIA DE QUATERNÁRIOS

Neste trabalho, a RNA escolhida foi a Perceptron de Múltiplas Camadas (MLP). O primeiro passo para treinar a RNA foi identificar os parâmetros que iriam ser utilizados como entrada e saída. Uma RNA, como pode ser visto na ilustração da Figura 3, recebe os dados de entrada e, durante o seu processo de aprendizado, compara a saída obtida com os valores de saída esperada. Com base no erro obtido, que é calculado através da diferença das saídas, a RNA irá ajustar os pesos que conectam os neurônios artificiais a fim de minimizar este erro.

Os parâmetros de entrada e saída necessários para o treinamento da RNA para inferência dos quaternários foram identificados pelos pesquisadores do LabSem. Durante a etapa de síntese do quaternário, o reator é ajustado e, de acordo com esta regulagem, os nanomateriais são criados com concentrações diferentes de Índio, Gálio e Alumínio. A rede neural desenvolvida neste trabalho visa inferir, com base nos parâmetros de ajuste do reator, as concentrações destes elementos nos quaternários. Veja na tabela I os parâmetros de entrada (configuração do reator) e saída (concentrações dos elementos) identificados pelos pesquisadores do LabSem. Os quatro primeiros parâmetros são os fluxos dos respectivos gases. Em todos os experimentos a Temperatura e Pressão variavam em conjunto e, por isto, foram considerados como um único valor. As concentrações são obtidas por difração de Raio-x realizada após a síntese.

Baseado na planilha eletrônica disponibilizada pelos pesquisadores, um arquivo texto é gerado com todos os experimentos. O arquivo gerado é então carregado para o Matlab [12] e as colunas referentes as entradas e saídas são mapeadas. Esta rede neural foi configurada para encontrar resultados de concentração de Gálio e Alumínio num mesmo processamento, ou seja, ela tentará durante sua execução, ajustar os pesos de

Atributo	Classificação	Atividade
AsH3 (mol/min)	Entrada	Síntese
TMIn (mol/min)		
TMGa (mol/min)		
TMAI (mol/min)		
Temperatura - Pressão (°C - mbar)		
% Índio	Saída	Raio-X
% Gálio		
% Alumínio		

Tabela I. LISTA DE ATRIBUTOS DE ENTRADA E SAÍDA UTILIZADOS NA REDE NEURAL.

sua estrutura interna para encontrar duas saídas simultaneamente. Para descobrir a concentração de *Índio*, basta fazer a subtração da soma das concentrações de *Gálio* e *Alumínio*. O total deve ser 100%

Em seguida, é realizado a normalização dos dados para evitar que grandes variações de valores dos experimentos causem problemas nos resultados da rede neural. Os valores dos fluxos de gases foram normalizados entre 0,1 e 0,9. As saídas, ou seja, as concentrações de 0 a 0,9. Já o par temperatura e pressão só apresenta duas configurações e recebeu os valores 1 ou 2. Com os dados normalizados, eles são separados em grupos para as etapas de treinamento e teste da rede neural. O agrupamento de treinamento possui 80% dos experimentos, sendo que destes, 20% são utilizados na validação. Os demais 20% são utilizados para testar a rede neural.

Uma vez que o agrupamento dos dados é realizado, a rede neural está pronta para iniciar a etapa de aprendizado. Durante esta etapa, são verificadas várias configurações da rede neural onde são alteradas a quantidade de camadas internas e a quantidade neurônios por camada. O número de neurônios variou de 2 a 15 na primeira camada e entre 0 e 5 na segunda. Cada rede neural treinada é comparada com a melhor rede neural obtida até aquele momento e se a nova rede neural for melhor que todas as demais redes neurais ela é armazenada. Ao final da etapa de aprendizado a melhor rede neural treinada estará disponível e é guardada em um arquivo para que seja possível utilizá-la em um momento futuro.

Para utilizar a rede neural que foi treinada anteriormente é necessário carregar o arquivo gerado durante o treinamento. Uma vez que o arquivo é carregado, todo o ambiente que existia no momento que ele foi gerado fica disponível para ser utilizado.

Dado um conjunto de dados informado pelo pesquisador, composto pelos parâmetros de entrada apresentados na tabela I, a rede neural irá inferir a concentração de *Gálio* e *Alumínio* que será resultante deste experimento. Para isto, é necessário que os dados informados sejam normalizados seguindo o mesmo padrão adotado durante a etapa de treinamento da RNA, a fim de que eles não sejam distorcidos. Após a normalização dos dados, estes são passados para a rede neural que irá processá-los e ao final retornar os resultados obtidos para a concentração de *Gálio* e *Alumínio*. Em seguida, aplica-se a estes resultados uma função para reverter a normalização feita anteriormente e obter os valores reais.

A. Resultados da Rede Neural Artificial

A melhor RNA encontrada possui uma única camada escondida contendo seis neurônios. Embora seja uma única rede

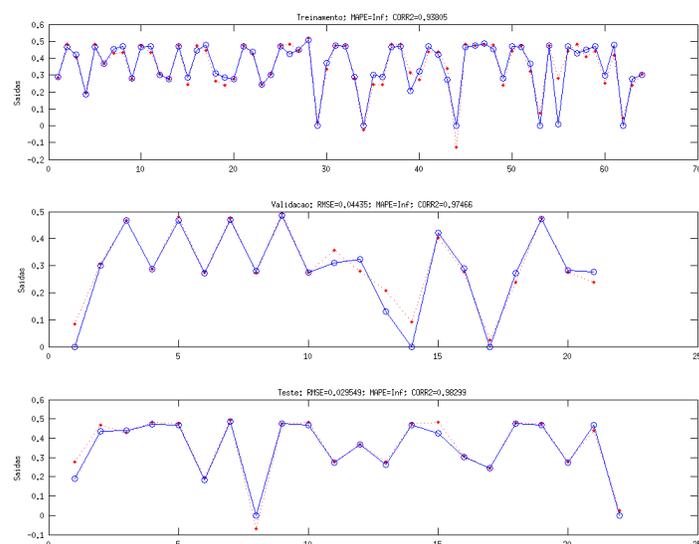


Figura 4. Resultado da rede neural nas etapas de treinamento, validação e teste para a concentração de Gálio.

para duas saídas, foram gerados gráficos com os resultados obtidos separadamente, a fim de demonstrar com maior clareza e precisão os resultados tanto para a inferência de concentração de *Gálio*, quanto para a concentração de *Alumínio*.

Nas figuras a seguir serão mostrados três gráficos em cada uma delas. Estes gráficos referem-se as etapas de treinamento, validação e teste, respectivamente. A linha de cor vermelha (tracejada - ponto) representa o valor obtido pela rede neural e a linha de cor azul (contínua - círculo) representa o valor que era esperado.

Os resultados obtidos com a rede neural para inferência de concentração de *Gálio* foram excelentes. Durante a etapa de testes da RNA, o erro médio calculado por RMSE foi abaixo de 0,03 que é um resultado bastante satisfatório. Além disso, o coeficiente de correlação foi de 0,983, que é muito próximo de 1 e indica que a rede neural está aproximando todos os seus resultados aos resultados esperados. Veja na Figura 4 os três gráficos das etapas de treinamento, validação e teste.

A mesma rede neural infere valores para a concentração de *Alumínio* e os resultados foram muito bons. Embora os resultados com a obtenção da concentração de *Gálio* tenha sido melhores, a diferença do erro médio é praticamente irrisória. Para a inferência de concentração de *Alumínio*, o erro médio da rede neural calculado por RMSE foi de aproximadamente 0,035 e o coeficiente de correlação foi de 0,972, que também é muito próximo de 1 e demonstra que os resultados da rede neural são satisfatórios. Os resultados obtidos nas etapas de treinamento, validação e teste podem ser vistos na Figura 5.

V. OTIMIZAÇÃO DOS SEMICONDUTORES QUATERNÁRIO

A utilização da rede neural consiste no usuário informar os dados de entrada e, com base nestes dados, a rede gerar os dados de saída. O *Quaternário Reverso* é um algoritmo criado para fazer o processo inverso, ou seja, o usuário irá informar as concentrações de *Índio*, *Gálio* e *Alumínio* que ele deseja e o algoritmo irá gerar os parâmetros que deverão ser utilizados

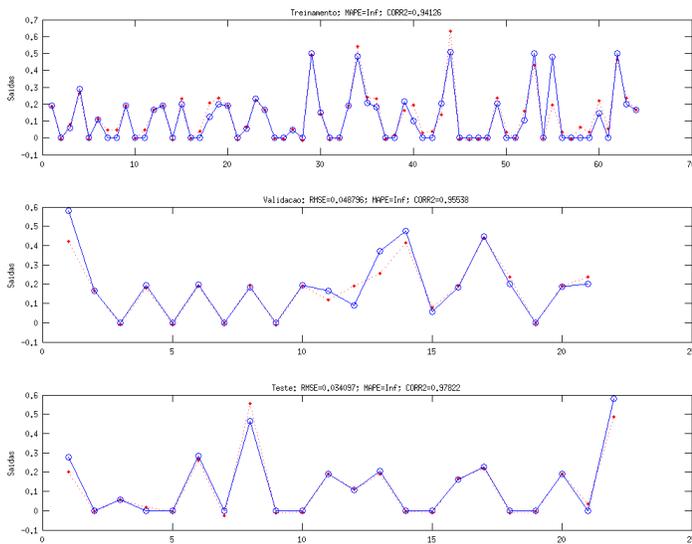


Figura 5. Resultado da rede neural nas etapas de treinamento, validação e teste para a concentração de Alumínio.

como entrada no reator para que estas concentrações sejam alcançadas.

Para o desenvolvimento desta funcionalidade foi utilizado um Algoritmo Genético (AG) com o objetivo de otimizar os parâmetros de síntese do quaternário. Estes parâmetros serão utilizados como conjunto de dados de entrada para que o pesquisador obtenha quaternários com as concentrações que ele deseja. O AG irá trabalhar em conjunto com a RNA gerada anteriormente a fim de obter resultados que possam auxiliar o pesquisador na criação de nanomateriais inovadores.

Para o seu funcionamento, o AG precisa que alguns parâmetros de configuração sejam ajustados. Primeiro é necessário definir os valores máximos e mínimos assumidos por cada um dos parâmetros de entrada, estes valores irão definir um intervalo de busca e dará suporte ao AG durante sua execução. Em seguida, é preciso definir o tamanho da população que será gerada, bem como o número de gerações. Além disso, é necessário definir a função de *fitness* que será utilizada para avaliar os indivíduos gerados. A função de *fitness* é de fundamental importância para que o algoritmo obtenha resultados satisfatórios e é neste momento que é realizada a integração com a RNA desenvolvida.

Um indivíduo, em AG, é uma possível solução para o problema. Neste caso, o indivíduo é composto por cinco atributos que são exatamente os atributos classificados como “Entrada” e estão mostrados na tabela I. Para que ele sempre crie indivíduos válidos, o algoritmo genético utiliza a informação dos intervalos de valores que foram informados em sua configuração. Desta forma, mesmo que o indivíduo gere um resultado que não atende ao problema, ele será válido.

A RNA, utilizada através da função de *fitness*, é que irá determinar se o indivíduo é bom ou ruim. O seu funcionamento é similar ao de uma função, onde cada um dos atributos que compõem o indivíduo é uma variável e estas são aplicadas à RNA que retornará um valor. Então este valor é comparado com o resultado esperado. Quanto mais próximo o valor obtido estiver do desejado, melhor é o indivíduo. Com base na

qualidade do indivíduo e das propriedades evolutivas do AG, ele consegue gerar indivíduos melhores. Além disso, o algoritmo consegue explorar uma grande parte do espaço de busca. Assim, ao final de sua execução ele seleciona os indivíduos com os melhores resultados como possíveis soluções para o problema.

Os parâmetros do AG utilizados neste trabalho foram:

- População: 100
- Gerações: 50

Além destes parâmetros foram utilizados dois vetores auxiliares, responsáveis por determinar os limites inferiores e superiores de busca para cada parâmetro de entrada, vide tabela II. Estes limites são utilizados para auxiliar o AG durante a criação de indivíduos e evitar que gere indivíduos muito ruins ou inválidos para a solução. A identificação destes valores foi realizada através da observação dos limites de cada parâmetros contido na planilha eletrônica acrescentados de uma pequena margem. Para as operações de *crossover* e *mutação* foram utilizadas as funções padrão do *Matlab*: *crossoverscattered* e *mutationgaussian*, respectivamente.

Atributo	Limite inferior	Limite superior
AsH3	0,000446	0,00335
TMIn	0,0000062	0,0000367
TMGa	0,0	0,000034
TMAI	0,0	0,0000173
Temperatura - Pressão	1	2

Tabela II. INTERVALO DE VALORES QUE PODE SER ASSUMIDO PELO INDIVÍDUO DURANTE A EXECUÇÃO DO AG.

A. Resultados

Com o objetivo de atender a uma solicitação dos pesquisadores do *LabSem* e também de validar a capacidade do algoritmo em obter resultados, alguns testes foram realizados. Segundo os pesquisadores do *LabSem*, existe uma carência de documentos na literatura que mostram o processo de síntese de quaternários para algumas composições, como por exemplo, as listadas na tabela III. Segundo eles, os parâmetros de entrada que resultarão nestas composições não estão documentados, o que dificulta a criação destes nanomateriais com estas composições.

	Índio	Gálio	Alumínio
Problema 1	50,0	30,0	20,0
Problema 2	50,0	32,0	18,0

Tabela III. COMPOSIÇÕES DE QUATERNÁRIOS CARENTES DE DOCUMENTAÇÃO.

Para verificar a capacidade de obtenção de resultados, o algoritmo foi testado buscando encontrar os parâmetros de entrada que iriam resultar nas composições desejadas. Veja na Figura 6 como foi o processo de convergência de uma das rodadas do AG até a obtenção do resultado final. Para cada configuração de concentrações, 15 rodadas do AG foram executadas, todas levando a ótimos resultados. Por simplificação, neste trabalho apresentamos apenas a melhor para cada configuração.

A Figura 6 foi obtida durante a execução para a obtenção dos resultados para a composição: Índio - 50%, Gálio - 32%

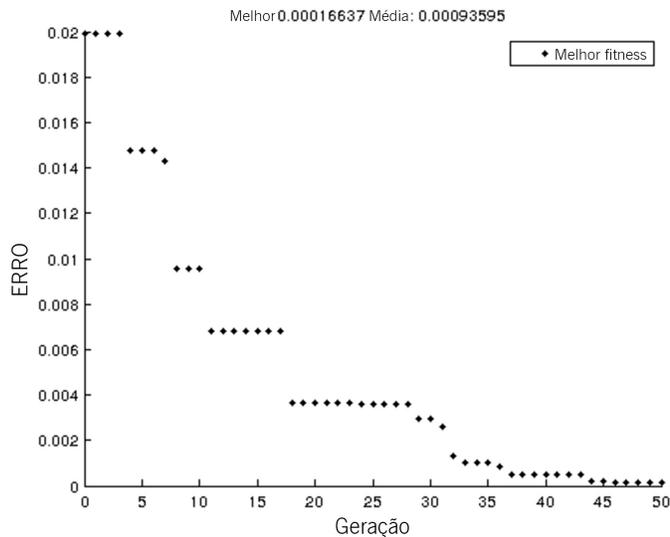


Figura 6. Indivíduo evoluiu durante a execução do algoritmo genético.

e Alumínio - 18%. Os parâmetros de entrada obtidos, bem como as composições estão disponíveis na coluna “Solução 2” mostrada na tabela IV. Na coluna “Solução 1” estão os resultados dos parâmetros obtidos para a composição: Índio - 50%, Gálio - 30% e Alumínio - 20%. A coluna “Solução 1” representa a solução para o “Problema 1” da tabela III, assim como a “Solução 2” representa a solução para o “Problema 2”.

Atributos	Solução 1	Solução 2
AsH3	0,00106967405496527000	0,00103590058224384000
TmIn	0,00003358172678221790	0,00002833019879423890
TmGa	0,00001605618502373020	0,00001616705082262070
TMAI	0,00000822217555734401	0,00001109526104758810
Temperatura	600	650
Pressão	50	100
% Índio	49,9791	50,0152
% Gálio	30,0163	31,9834
% Alumínio	20,0046	18,0014

Tabela IV. RESULTADOS OBTIDOS COM ALGORITMO GENÉTICO.

Se observarmos as composições obtidas através do algoritmo genético podemos perceber que o erro das composições estão na segunda e terceira casas decimais, o que demonstra uma precisão muito boa. Estes valores foram passados para a equipe do *LabSem* para que estas amostras sejam sintetizadas e possibilitar uma avaliação completa sobre a precisão do algoritmo. Apesar das estruturas não terem sido sintetizadas ainda, já é possível afirmar que, computacionalmente, os resultados estão satisfatórios.

VI. CONCLUSÃO

Neste trabalho, nós demonstramos o grande potencial das técnicas de Inteligência Computacional em guiar a síntese de semicondutores quaternários. É interessante observar que mesmo com uma base de dados não muito grande nós obtivemos resultados com boa acurácia, mostrando que a RNA pode ser uma eficiente aproximação das funções que governam o crescimento de quaternários. A otimização realizada levou aos resultados desejados, preenchendo a carências de métodos eficientes na literatura.

Apesar dos resultados aqui apresentados serem específicos para um particular tipo de material semiconductor (*InAlGaAs*), está claro que as técnicas computacionais reportadas aqui podem ser usadas para prever qualquer outro tipo de material ou nanodispositivo semiconductor.

Técnicas de Inteligência Computacional, tais como as empregadas nesta investigação, diminuem significativamente o número de experimentos necessários em laboratório, servindo de guia para a busca dos parâmetros de crescimento e reduzindo os custos. Os resultados aqui obtidos são promissores, em particular para aplicações industriais e mostram como o desenvolvimento da nanociência e nanotecnologia pode ser altamente beneficiado pelo uso eficiente de técnicas computacionais.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia em Nanodispositivos Semicondutores INCT-DISSE, à Fapemig e à PRPq-UFMG.

REFERÊNCIAS

- [1] D. de la Iglesia, S. Harper, M. Hoover, F. Klaessig, P. Lippell, B. Maddux, J. Morse, A. Nel, K. Rajan, R. Reznik-Zellen *et al.*, “Nanoinformatics 2020 roadmap,” 2011.
- [2] S. M. Rezende, *Materiais e dispositivos eletrônicos*. Editora Livraria da Física, 2004.
- [3] A. Singulani, O. Vilela Neto, M. Aurélio Pacheco, M. Vellasco, M. Pires, and P. Souza, “Computational intelligence applied to the growth of quantum dots,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 310, no. 23, pp. 5063–5065, 2008.
- [4] A. Nateri, S. Dadvar, A. Oroumei, and E. Ekrami, “Prediction of silver nanoparticles diameter synthesized through the tollens process by using artificial neural networks,” *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, vol. 8, no. 4, pp. 713–716, 2011.
- [5] L. Cupertino, O. Vilela Neto, M. Pacheco, M. Vellasco, and J. d’Almeida, “Modeling the young modulus of nanocomposites: A neural network approach,” in *Neural Networks (IJCNN), The 2011 International Joint Conference on*. IEEE, 2011, pp. 1599–1605.
- [6] D. M. Dias, A. P. Singulani, M. A. C. PACHECO, P. L. SOUZA, M. Pires, and O. P. Vilela Neto, “Self-assembly quantum dots growth prediction by quantum-inspired linear genetic programming,” in *Evolutionary Computation (CEC), 2011 IEEE Congress on*. IEEE, 2011, pp. 2075–2082.
- [7] J. Zhang, C. Xu, M. Yi, and B. Fang, “Design of nano-micro-composite ceramic tool and die material with back propagation neural network and genetic algorithm,” *Journal of materials engineering and performance*, vol. 21, no. 4, pp. 463–470, 2012.
- [8] C. Ross, *3.15 Electrical, Optical, Fall*. (Massachusetts Institute of Technology: MIT OpenCourseWare), <http://ocw.mit.edu> (Accessed 10 Mai, 2013) - License: Creative Commons BY-NC-SA, 2006.
- [9] E. H. Li, “Material parameters of ingasp and inalgaas systems for use in quantum well structures at low and room temperatures,” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 5, no. 4, pp. 215–273, 2000.
- [10] S. Chuang, “Physics of optoelectronic devices, 1995,” *Pp-270-273*.
- [11] A. S. F. Silva, *NanoTrack - Sistema Inteligente de Gerenciamento de Dados de Síntese de Nanoestruturas*. Dissertação de Mestrado - PPGCC, 2013.
- [12] M. Guide, “The mathworks,” *Inc., Natick, MA*, vol. 5, 1998.