



## **O TRABALHO HUMANO VOLTADO PARA A SUSTENTABILIDADE ATRAVÉS DA PRODUÇÃO DE ENERGIA LIMPA: UM ESTUDO DE FÍSICA DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS UTILIZANDO FERRAMENTAS DE INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL PARA O MAPEAMENTO E ANÁLISE DE DADOS**

Mailing Berwanger

*Linha temática – Informação e conhecimento: como transformar dados em vantagem competitiva?*

**Resumo:** O avanço tecnológico possibilita a realização de um trabalho em prol do planeta e da humanidade. O estudo de nanoestruturas foi possível a partir do desenvolvimento de instrumentos e microscópios de varredura para trabalhar nessas pequenas escalas e, também, no aperfeiçoamento de ferramentas de simulações computacionais. As nanoestruturas, especificamente, nanocristais ou nanopartículas do grupo II – VI, como por exemplo CdSe, CdTe e CdS, e os elementos do grupo III – V, como InP e InAs são bons candidatos para serem trabalhados em células solares, devido às suas propriedades. Essas estruturas serão trabalhadas com o código computacional VASP (Kresse; Marsman; Furthmüller, 2009). Esse pacote computacional executa cálculos de primeiros princípios, baseados na DFT (Teoria do Funcional da Densidade). No presente trabalho, o uso de ferramentas de IA (Semantic Scholar) foram utilizadas para a seleção da literatura complementar adequada e, ainda, serão exploradas no processo de organização (Papers) e entrega de dados (ações junto do Power BI). A ferramenta de IA utilizada facilitou o processo de levantamento bibliográfico complementar inicial, e continuará auxiliando nas próximas etapas da pesquisa, nas etapas de organização e apresentação de dados, trazendo agilidade ao trabalho. Dessa forma, a entrega dos resultados finais será entregue em um período menor. A criação e utilização de células fotovoltaicas seriam boas alternativas para as comunidades em relação a produção de energia limpa. A humanidade necessita de produção de energia limpa de baixo custo, acessível à população de forma geral, e para isso, se faz necessária a redução de custos dos sistemas fotovoltaicos. Essa redução de custo gera competitividade no que se refere ao mercado, o que é benéfico pois esse tipo de energia chegaria mais rapidamente aos grupos que não tem acesso a mesma. O homem precisa pensar o futuro, o seu futuro próximo e o de suas gerações. Para se viver no planeta Terra são necessárias condições mínimas, e infelizmente problemas relacionados à poluição prejudicam drasticamente o nosso planeta e seus habitantes. O presente trabalho trará um estudo completo de Física de primeiros princípios de novas estruturas para aplicação em células solares, visando a diminuição de custo na produção de energia limpa, pensando na sustentabilidade, competitividade e na ação humana positiva.

**Palavras-chave:** Energia Limpa; Inteligência Artificial; Física; Teoria do Funcional da Densidade; Ontopsicologia.

### **1. INTRODUÇÃO**

O avanço experimental das últimas décadas foi o grande responsável pelo surgimento do estudo de materiais na escala nanométrica,  $10^{-9}$  m (Kroto, 1985). A evolução experimental tornou possível o desenvolvimento de várias técnicas de manipulação e análise de nanoestruturas, ou seja, aplicações em tecnologias que anteriormente eram desconhecidas. O interesse e atividade em torno dos nanomateriais ocorre porque as propriedades dos materiais se alteram à medida que suas dimensões são reduzidas, sendo a Nanociência a ciência responsável pelo estudo de sistemas que apresentam ao menos uma de suas dimensões espaciais na escala nanométrica (Feynman, 1959), à medida que a Nanotecnologia faz o uso das propriedades particulares destas nanoestruturas em aplicações tecnológicas (Melo; Pimenta, 2004; Drexler, 1986). Os estudos de nanomateriais têm como base a Mecânica Quântica (Durán; Mattoso; Morais, 2006), que é a teoria capaz de descrever as propriedades físicas e químicas de nanomateriais. O grafeno e filmes finos, exemplos

de nanomateriais, apresentam somente uma de suas dimensões na escala nanométrica, enquanto que nanotubos e nanofios têm duas de suas dimensões reduzidas à essa escala.

Os pontos quânticos (*quantum dots*) têm suas três dimensões reduzidas a nanômetros, nanoestruturas que serão investigadas nesse projeto de pesquisa. Através da redução das dimensões dos materiais, fazendo com que atinjam a escala nanométrica, estes passam a apresentar efeitos de confinamento quântico e de superfície que tornam-se significativos e alteram as propriedades dos materiais.

É extremamente difícil trabalhar com um sistema na escala nanométrica. O avanço experimental, atrelado à teoria, possibilitou a investigação de nanoestruturas. Existe uma complexidade envolvida na predição das propriedades de sistemas nanométricos, a variedade de possibilidades estruturais desses nanomateriais e os inúmeros tamanhos que estes sistemas podem exibir torna o estudo dos mesmos uma fonte quase inesgotável para aplicações específicas.

Inúmeras técnicas experimentais permitem analisar e manipular materiais, em conformidade com Toma (apud Conselho em revista, 2008, p.14) é possível e eficiente trabalhar experimentalmente na escala atômica, através da microscopia eletrônica de varredura e de transmissão, pinças ópticas, microscopia Raman confocal e ressonância plasmônica de superfície.

Através desse estudo pretende-se realizar uma investigação teórica e um estudo sobre pontos quânticos (*bulk*) através de simulações computacionais, utilizando o código computacional *VASP*, visando a aplicabilidade no processo de desenvolvimento de dispositivos optoeletrônicos e fotovoltaicos.

Serão realizados cálculos de primeiros princípios, como implementados no código computacional *VASP* (Vienna Abinitio Simulation Package) (Kresse; Furthmüller, 1996), o qual resolve as equações de Kohn-Sham (Kohn; Sham, 1965), dentro da Teoria do Funcional da Densidade (*DFT*).

O objetivo deste trabalho é caracterizar eletronicamente o *bulk* de pontos quânticos – *quantum dots* –, através de cálculos de primeiros princípios, dentro da teoria do funcional da densidade (*DFT*), a fim de possibilitar a aplicabilidade desses pontos quânticos na produção de células solares, ou seja, energia limpa, apresentando uma possibilidade de geração de energia limpa, mais eficiente e de custo viável. E, também, uma possibilidade da humanidade trabalhar a sustentabilidade (Wazlawick, 2023) e pensar o futuro com criticidade, atenta a todos os problemas da nossa geração que irão prejudicar diretamente as gerações futuras. Segundo Meneghetti (2015), “A intencionalidade, enquanto se faz informação, torna-se vontade”. Se faz necessário trabalhar tipos de energia que não causem impacto ambiental.

## 2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

O presente trabalho aborda o estudo de Física, em específico Física Quântica. A Física Quântica traz o embasamento para o mundo que não enxergamos a olho nu. A escolha foi realizar um estudo sobre nanoestruturas, estruturas na escala nanométrica (10<sup>-9</sup>) (Berwanger *et al.*, 2020), através de simulação computacional, estudo de física teórica. Essas nanoestruturas apresentam aplicabilidade no estudo e criação de células solares, ou seja, na produção de energia limpa (energia sustentável).

Tratando-se de pontos quânticos, o interesse encontra-se em nanocristais ou nanopartículas do grupo II – VI, como por exemplo CdSe, CdTe e CdS, bem como sobre os elementos do grupo III – V, como InP e InAs. Esses materiais, no geral, apresentam características interessantes para a aplicação proposta porque apresentam elevada absorção, ou seja, uma propriedade tecnologicamente significativa para aplicações em áreas como a eletrônica e fotônica. O material InP (Berwanger *et al.*, 2016), por exemplo, enquanto nanofio, mostra-se promissor para aplicações em nanofotônica (Duan *et al.*, 2001; Takahashi *et al.*, 2010). Uma vez que apresenta *gap* de energia direto e sua fase cristalina macroscópica apresenta propriedades ópticas interessantes. Gradet (2009), analisou as propriedades ópticas de nanofios de InP através do método *VLS* (Vapor - Líquido - Sólido) no sistema *CBE* (Chemical Beam Epitaxy), que utiliza a técnica de micro-fotoluminescência.

A humanidade está em constante busca por uma produção eficiente de energia limpa a partir de uma fonte renovável de origem abundante devido ao fato de que a vida na sociedade moderna

em países desenvolvidos requer um aporte grande de energia. A ampliação deste padrão de vida para países em desenvolvimento ou mesmo o suporte energético de países desenvolvidos frente às novas tecnologias demanda um acréscimo considerável na oferta de energia. Será necessário que a sociedade moderna altere o seu modo de vida, a melhoria da qualidade de vida da população mundial terá necessariamente que passar pela solução do problema de fornecimento de energia numa quantidade suficiente para o desenvolvimento das diferentes populações do globo terrestre. O enfrentamento do problema de fornecimento de energia global, juntamente com a necessidade de redução de emissão de CO<sub>2</sub> na atmosfera traz, naturalmente, a demanda por fontes de energia renováveis e não poluentes. Dentre as fontes de energia renováveis não poluentes, a energia solar ganha destaque pela abundância de oferta e pela quase ausência de efeitos poluentes subsidiários. A energia solar incidente sobre a Terra é suficiente para suprir toda a demanda energética da população global. Um aproveitamento da energia proveniente da irradiação solar sobre a superfície terrestre de forma eficiente é, portanto, um desafio dos mais importantes para a ciência e tecnologias atuais.

A captação e transformação direta da energia solar em energia elétrica, chamada de energia fotovoltaica, é um dos processos mais promissores e já encontra aplicação prática bastante ampla via painéis solares à base de silício e outros materiais. Algumas dificuldades associadas aos painéis solares são que seu processo de fabricação gera resíduos que, se não tratados, podem causar efeitos nocivos ao ambiente e à população. Além disso, estes painéis solares (Portal: Energy Informative, 2020) perdem cerca de 0,5% por ano da sua capacidade de gerar energia. Para esse processo são necessários materiais que absorvam a energia de radiação solar e que promovam os processos subsequentes. No caso da geração fotovoltaica de eletricidade é necessário ter um material semicondutor que absorva a energia solar incidente com grande eficiência e na extensa faixa de frequências (ou comprimentos de onda) emitida pelo sol.

Através desse projeto serão explorados novos sistemas de catálise (Berwanger *et al.*, 2020), a partir da investigação das propriedades eletrônicas dos nanocristais, pontos quânticos, dos elementos/materiais mencionados anteriormente, com a finalidade de utilizá-los na produção de energia solar, ou seja, produzir energia limpa, trabalhar com o mercado competitivo, mas visando a sustentabilidade e mostrando a evolução do olhar humano sobre o planeta no qual vive.

### 3. MÉTODO CIENTÍFICO

No que tange à prática sobre a física do projeto em questão, trabalhar com um sistema de elétrons interagentes, ou seja, um problema de muitos corpos é algo complexo. Isto torna-se possível devido a técnicas que utilizam várias formas de aproximação. Para a realização dos cálculos *ab initio* do presente projeto de pesquisa será utilizado o código computacional VASP (Kresse, Marsman, Furthmüller, 2009). Esse pacote computacional executa cálculos de primeiros princípios, baseados na *DFT* (Teoria do Funcional da Densidade).

Inicialmente foi realizada uma pesquisa bibliográfica objetivando o aprofundamento do conhecimento sobre nanopartículas ou nanocristais que são os objetos de estudo dessa pesquisa: pontos quânticos, incluindo os elementos que são mais interessantes para esse tipo de investigação, elementos com fotoestabilidade, que já foram objetos de muitos estudos em outras formas nanoestruturadas. Para a realização dos testes será necessário a criação das estruturas, que serão feitas utilizando a Linguagem de Programação Fortran 95, linguagem comumente utilizada pela comunidade da Física teórica que estuda estrutura eletrônica de materiais. O próximo passo serão os testes, utilizando o código computacional VASP, para a realização de análise do *bulk* dessas estruturas. Tratando-se de pontos quânticos, o interesse encontra-se em nanocristais ou nanopartículas do grupo II – VI, como por exemplo CdSe, CdTe e CdS, bem como sobre os elementos do grupo III – V, como InP e InAs. Após encontrada a estabilidade e realizada a análise da estrutura eletrônica o objetivo será fazer uma parceria com laboratórios experimentais, com a finalidade de comparar e enriquecer resultados, sempre visando uma aplicação tecnológica, que nesse caso, à priori, será na

criação de dispositivos optoeletrônicos e fotovoltaicos. Esse projeto de pesquisa visa uma aplicabilidade na produção de energia limpa, energia com poucos subsídios, em grande escala e de preço acessível à população, o que é mais difícil quando trata-se de células solares.

Através da evolução tecnológica e do surgimento da Inteligência Artificial (IA) (McCarthy, 1950; Era do renascimento da IA (1990), e de ferramentas de IA que oportunizam a aceleração e processos de pesquisa e análise de dados, estudos e entregas de resultados ficaram mais rápidos no que se refere a estruturas complexas em escalas pequenas, ou seja, trabalhar com estruturas do mundo quântico (Meneghetti, 2015) leva menos tempo do que há alguns anos atrás. Para o levantamento bibliográfico complementar, um passo que foi retratado anteriormente, foi utilizada a ferramenta *Semantic Scholar*, criada no *Allen Institute for Artificial Intelligence* em 2015.

A tecnologia proporcionou o avanço experimental, bem como a criação de ferramentas de Inteligência Artificial (IA) trouxe rapidez para a análise de dados e para a entrega de resultados de trabalhos acadêmicos. A IA não auxilia somente na área de *business intelligence* de empresas, área na qual a mesma se mostra relevante e as contribuições são consideradas extremamente importantes. As ferramentas de IA auxiliam pesquisadores de todas as áreas da academia (Figueiredo, 2023), seja no momento do levantamento da literatura, seja no método, na análise de dados ou no formato da entrega de resultados de um determinado trabalho acadêmico. Várias ferramentas de IA foram desenvolvidas nos últimos meses, essas trazem agilidade no processo de selecionar dados adequados, reduzindo o tempo de pesquisa. É necessário que as ferramentas sejam utilizadas de forma adequada, sensata e inteligente. A capacidade humana não é substituída, mesmo porque os dados que serão consultados e as ferramentas de IA foram criados pelo homem.

A ferramenta denominada *Papers* será utilizada na continuidade do projeto para a centralização de materiais sobre o tema, possibilitando a comparação da pesquisa com trabalhos relacionados que possam surgir no decorrer do processo. A plataforma *Papers* permite aos usuários organizar e compartilhar materiais acadêmicos.

Após a coleta total de dados, obtidos através de simulações computacionais, cálculos e primeiros princípios, os dados serão trabalhados e apresentados utilizando a ferramenta Power BI, criada pela Microsoft em 2015. A configuração, tabelas e gráficos confeccionados nessa ferramenta, utilizada pela comunidade de Ciência de Dados, são de alto nível, por isso a escolha da ferramenta. A autora do projeto já possui certificação para utilizá-la.

No presente trabalho, o uso de ferramentas de IA foram utilizadas para a seleção da literatura complementar adequada e, ainda, serão trabalhadas no processo de organização e entrega de dados.

#### 4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Foram realizadas algumas etapas para a realização do trabalho.

A primeira etapa foi contemplada e realizada com sucesso.

A revisão bibliográfica sobre as estruturas escolhidas foi feita com cuidado, dessa forma essa etapa está encerrada. Essas serão definitivamente as estruturas estudadas: nanocristais ou nanopartículas do grupo II – VI, como por exemplo CdSe, CdTe e CdS, bem como sobre os elementos do grupo III – V, como InP e InAs.

A segunda etapa foi contemplada e, da mesma forma, realizada com sucesso.

A criação das estruturas utilizando a Linguagem de Programação Fortran 95. Essa etapa exigiu tempo para que as condições fossem perfeitas.

A terceira etapa encontra-se em andamento.

A realização dos testes de estabilidade de cada estrutura criada. Os testes iniciais são de extrema importância para que os resultados do trabalho sejam os esperados. Para isso, serão realizadas parcerias com outras instituições de pós-graduação, para a utilização de máquinas adequadas para a realização dos mesmos.

#### 4.1. Próximos passos

Após a verificação sobre a estabilidade das estruturas criadas, serão realizados os cálculos *ab initio*. As simulações computacionais utilizando o *VASP* serão executadas. Esse processo leva um período maior, em torno de seis meses, exige máquina, filas de utilização, critérios e ajustes.

Através do levantamento bibliográfico são esperados resultados positivos para a aplicação final. Como perspectiva futura, pretende-se realizar parcerias com físicos experimentais de outras instituições de pós-graduação para a realização dos testes experimentais físicos e, com a consolidação dos resultados, parcerias com empresas de energia fotovoltaicas para a aplicação da pesquisa. Esse processo vem sendo comum entre universidades e empresas.

Antigamente, o pesquisador se estabelecia unicamente na área acadêmica, mas atualmente sabe-se que existem diversas possibilidades. Um pesquisador pode trabalhar em conjunto com uma empresa, pensando na entrega de um produto, trabalhando além dos atributos da pesquisa, como por exemplo a visão de competitividade de mercado, pensando em valores e precificação. Também, é necessário oportunizar energia limpa ao maior número de pessoas possíveis, lembrando que o sol é uma fonte de energia gratuita, logo, a precificação em cima da produção desse tipo de energia precisa ser menor. Encontrar estruturas que diminuam o custo, e que funcionem como bons catalisadores no processo do sistema das placas fotovoltaicas é uma ótima alternativa. Este trabalho apresenta esse viés, uma integração num futuro próximo entre academia e empresa(s) de células solares.

Também, a preocupação com a humanidade é uma questão a ser trabalhada de forma universal, e necessária. O homem precisa realizar uma leitura do seu presente e caminhar para o seu futuro, entendendo o cenário e criando novas estratégias objetivando um futuro em um *green planet*. O homem poluiu o meio no qual vive, logo é o homem que precisa realizar ações pertinentes que viabilizem oportunidades de melhorias, precisa existir um compromisso com o planeta o qual se habita e com as próximas gerações.

### 5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Através do estudo teórico de pontos quânticos, dentro dos grupos dos elementos II – VI e III-V, utilizando cálculos de primeiros princípios (uma metodologia que já compreendida e que apresenta resultados eficientes e que condizem com os resultados experimentais encontrados na literatura), que poderá ser trabalhado com a utilização dos *clusters* em parceria com outra instituição (Uppsala University), pretende-se desenvolver novos dispositivos optoeletrônicos e/ou sistemas de fotocatalise que possam serem utilizados na produção de células solares, contribuindo de forma significativa na geração de energia limpa.

Esse trabalho apresenta uma solução no que se refere à eficiência de células fotovoltaicas, bem como, a busca por uma menor precificação deste produto (competitividade de mercado), para que mais famílias possam utilizar energia limpa, objetivando a sustentabilidade e a ação positiva do homem. Esse estudo foi possível devido à evolução tecnológica, e a entrega será mais rápida por causa da utilização de ferramentas de Inteligência Artificial, para a organização e apresentação dos dados.

A partir desse projeto é esperado um trabalho futuro entre academia e empresas, mas primeiramente, parcerias entre a pesquisadora e físicos experimentais, de outras instituições de pós-graduação, interessados em testar as estruturas utilizando seus instrumentos de pesquisa para validar os resultados encontrados através das simulações computacionais.

O projeto de tornar essa pesquisa uma perspectiva para a concepção de um novo produto mais econômico e sustentável é ambiciosa, mas é real. Atualmente, inúmeros projetos acadêmicos auxiliam a indústria ou empresas, principalmente no que se refere ao desenvolvimento nanotecnológico. O avanço nanotecnológico tem acontecido através de estudos de físicos, químicos e engenheiros e essas comunidades têm trabalhado juntas para o desenvolvimento de novos produtos e, também, criação de plano de negócios e novos CNPJs.

## REFERÊNCIAS

- BERWANGER, M. et al. Oxidation of InP nanowires: a first principles molecular dynamics study. **Phys. Chem. Chem. Phys.** v.18, p. 31101 – 31106, 2016.
- BERWANGER, M. et al. HfS<sub>2</sub> and TiS<sub>2</sub> Monolayers with adsorbed C, N, P Atoms: A First Principles Study. **Catalysts**.v. 10, 2020.
- CONSELHO REGIONAL DE ENGENHARIA, ARQUITETURA E AGRONOMIA DO RIO GRANDE DO SUL. Provedor CREA-RS. **CONSELHO em revista**. V. 1, n. 48, 2008. Disponível em: <http://www.crea.rs.org.br/site/index.php?p=revistas>>. Acesso em: 20 dez, 2012.
- DUAN, X. Indium phosphide nanowires as building blocks for nanoscale electronic and optoelectronic devices. *Nature*, v. 409, p. 66 – 69, 2001.
- DURAN, N.; MATTOSO, L. H. C.; MORAIS, P. C de. **Nanotecnologia: introdução, preparação e caracterização de nanomateriais e exemplos de aplicação**. São Paulo: Artliber Editora, 2006. 208 p.
- DREXLER, K. E. Engines of Creation: **The Coming Era of Nanotechnology**. USA: Anchor Books Editions, p. 298, 1986.
- FEYNAMAN, R. Há mais espaços lá embaixo. Artigo publicado no Jornal Comciência, edição Especial Nanociência e Nanotecnologia, **Revista Eletrônica de Jornalismo Científico**, da Unicamp. Texto traduzido por Roberto Belisário e Elizabeth Gigliotti de Sousa. 2012. Disponível em: [admseer,+636-2483-1-CE.pdf](http://admseer,+636-2483-1-CE.pdf). Acesso em: 3 ago., 2024.
- FIGUEIREDO, L. et al. Desafios e impactos do uso da inteligência artificial na educação. **Revista Educação On-line PUC - RIO**. Rio de Janeiro. v. 18 n. 44, 2023.
- GRADET, E. G. **Dissertação de Mestrado: Propriedades ópticas de nanofios de InP**. UNICAMP, 2009.
- KOHN, W.; SHAM, L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. **Physical Review A**, v.140, p. A1133-A1138, 1965.
- KRESSE, G.; JOUBERT, D. From Ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. **Physical Review B**, v. 59, p. 1758, 1999.
- KROTO, H. W. et al. C<sub>60</sub>: Buckminsterfullerene. **Nature**, 318, p. 162-163, 1985.
- MELO, C. P.; PIMENTA, M. Nanociências e Nanotecnologia. **Parcerias Estratégicas**, n. 18, p. 1- 248, 2004.
- MENEGHETTI, A. **Fisicidade e Ontologia: a relação crítica entre física nuclear e Ontopsicologia**. Traduzido por Ontopsicológica Editora Universitária. Recanto Maestro, São João do Polêsine, RS. Ontopsicológica Editora Universitária, 2015.
- MICROSOFT. Power BI. 2015. Disponível em: **Power BI - Visualização de Dados | Microsoft Power Platform**. Acesso em: 3 ago., 2024.

PAPERS. s/a. Disponível em: Reference Management Solutions for Students, Academic & Corporate - Papers (papersapp.com). Acesso em: 3 ago., 2024.

SEMANTIC SCHOLAR. 2015. Disponível em: Semantic Scholar | AI-Powered Research Tool. Acesso em: 2 ago., 2024.

TAKAHASHI, T. et al. Parallel Array InAs Nanowire Transistors for Mechanically Bendable, Ultrahigh Frequency Electronics. **ACS Nano**, v. 4, p.5855 – 5860, 2010.

TOTAL ENERGY CONSUMPTION – 2015. Disponível em: <https://yearbook.enerdata.net>. Acesso em: 22 de dez., 2023.

WAZLAWICK, P. **Symposium Internacional Ontopsicologia 50 anos. Uma ciência que restitui a humanidade ao ser humano.** Fundação Antonio Meneghetti (Org). Recanto Maestro, São João do Polêsine, RS: Fundação Antonio Meneghetti, 2023.