

- 1 SEMICONDUCTOR INDUSTRY ASSOCIATION. **The International Technology Roadmap for Semiconductors: Emerging Research Devices**, 2004 Update.
- 2 TOWGAW, P. D.; LENT, S. C. **Logical devices implemented using quantum cellular automata**. Journal of Applied Physics, v. 75, n. 3, p. 1818-1825 fev. 1994.
- 3 LENT, C. S.; TOWGAW, P. D. **A Device Architecture for Computing with Quantum Dots**. PROCEEDING OF THE IEEE, v. 85, n. 4, p. 541-557, abr. 1997.
- 4 AMLANI, I. et al. **Digital Logic Gate Using Quantum-Dot Cellular Automata**. SCIENCE, v. 284, p. 289-291, abr. 1999.
- 5 ZEBULUM, R. S.; PACHECO, M. A. C.; VELLASCO, M. M. B. R. **Evolutionary Electronics: Automatic Design of Electronic Circuits and Systems by Genetic Algorithm**. Boca Raton: CRC Press, 2002. ISBN: 0849308658.
- 6 MICHALEWICS, Z. **Genetic Algorithm + data structures = evolution programs**, Springer-Verlag, 1996.
- 7 GOLDBERG, D. E. **Genetic Algorithm in Search, Optimization, and Machine Learning**, Addison-Wesley Publishing Company, Inc. 1989.
- 8 MITCHELL, M. **An Introduction to Genetic Algorithm**, The MIT Press, USA, 1994.
- 9 DARWIN, C., **On The Origin of Species**, London, John Murray, 1859.A
- 10 DAVIS, L. **Handbook of Genetic Algorithm**, Van Nostrand Reinhold, USA, 1991.
- 11 LAZO, J. G. L. **Determinação do Valor de Opções Reais por Simulação Monte Carlo com Aproximação por Números Fuzzy e Algoritmos Genéticos**, Tese de Doutorado, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Brasil, Jul. 2004.
- 12 TANSCHKEIT, R. **Sistemas Fuzzy**, DEE, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Brasil.
- 13 ZADEH, L. A. **Fuzzy sets, Information and Control**, 8, 1965, p. 338-353.
- 14 PEDRYCZ, W., GOMIDE, F. **An Introduction to Fuzzy Sets: Analysis and Design**, MIT Press, Apr. 1998, ISBN: 0262161710.
- 15 ZIMMERMANN, H. J. **Fuzzy Set Theory and its Applications**, Kluwer Academic Publishers, 2nd ed. 1991.

- 16 BOJADZIEV, G., BOJADZIEV, M. **Fuzzy Logic for Business, Finance and Management**, ed. World Scientific Publishing Co. Ltd., Dec. 1997, ISBN: 9810228945.
- 17 HAYKING, S., **Neural Networks – A Comprehensive Foundation**, Macmillan Colege Publishing Company, Inc. p. 401-402, 1999.
- 18 OSÓRIO, F. S., VIEIRA, R., **Sistemas Híbridos Inteligentes**, XIX Congresso da SBC, ENIA'99 – Encontro Nacional de Inteligência Artificial, Tutorial, Rio de Janeiro, Julho 1999.
- 19 JANG, J.-S., **ANFIS: Adaptative-Neural-Based Fuzzy Inference Systems**. IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics, May 1993.
- 20 JANG, J.-S., SUN, C.-T., MIZUTANI, E., **Neuro-Fuzzy and Soft Computing**, Prentice Hall, 1997.
- 21 KLIMECK, G. et. al. **Genetically Engineered Nanoelectronics**, First NASA/DoD Workshop on Evolvable Hardware, Pasadena, July 1999.
- 22 STOICA, A. et. al. **Evolutionary Design of Electronics Devices and Circuits**, Congress on Evolutionary Computation, Washington DC, July 1999.
- 23 TOUR, J. M. et. al. **Nanocell Logic Gate for Molecular Computing**, IEEE Transaction on Nanotechnology, v. 1, n. 2, p. 100 – 109, June 2002.
- 24 ROERMUND, A. V. e HOEKSTRA, J, **From Nanotechnology to Nanoelectronics Systems, From SETs to Neural Nets**, ISCAS 2000 – IEEE International Symposium on Circuits and Systems, Geneva, May 2000.
- 25 SCHMID, A. e LEBLEBICI, Y., **Robust Circuit and System Design Methodologies for Nanometer-Scale Devices and Single-Electron Transistors**, IEEE Transactions on Very Large Scale Integration (VLSI) Systems, v. 12, n. 11, Nov. 2004.
- 26 OYA, T. et al., **Single-Electron Circuit for Inhibitory Spiking Neural Network with Fault-Tolerant Architecture**, ISCAS 2005 – IEEE International Symposium on Circuits and Systems, May 2005.
- 27 ROERMUND, A. V. e HOEKSTRA, J., **Spike Correlation Based Learning for Unsupervised Neural Lattice Structures**, ISCAS 2001 – IEEE International Symposium on Circuits and Systems, p. 425-428, Sydney, 2001.
- 28 GLOBUS, A., LAWTON, J. e WIPKE, T. **Automatic Molecular Design Using Evolutionary Techniques**, NAS Technical Report NAS-99-005, Feb 1999.
- 29 LAMEIJER, E-W. et. al. **The Molecule Evuator: an Interactive Evolutionary Algorithm for Designing Drug Molecules**, GECCO'05, p. 1969-1976, Washington DC, June 2005.
- 30 EXNER, T. E. e BRICKMANN, J. **The identification of complementarity of molecular surfaces using fuzzy set theory**, J. Mol Model, v. 7, p. 370-373, Sep. 2001.
- 31 SARKAR, S. K., BISWAS, A. K., CHOUDHURY, S. **Soft Computing Tools for the Simulation of Efficient Nanodevice Models**, IEEE 2003.

- 32 MASIERO, L. P. et. al. **Apoio a Síntese de Circuitos Moleculares**, VII SBAI, São Luis, Setembro 2005.
- 33 GIRO, R., CYRILLO, M., GALVÃO, D. S. **Using Artificial Intelligence Methods to Design New Conducting Polymers**, Materials Research, v. 6, n. 4, p. 523-528, 2003.
- 34 PACHECO, M. A. C. e MASIERO, L. P. **Projeto de Novos Polímeros Condutores**, Semana da Eletrônica 2004, UFRJ, Rio de Janeiro, 2004.
- 35 BROWN, J. Q. e McSHANE, M. J. **Optimal Design of Nanoengineered Implementable Optical Sensors Using a Genetic Algorithm**, 26th Annual International Conference of the IEEE EMBS, San Francisco, USA, Sep 2004.
- 36 LOHN, J. et. al. **Evolvable Systems for Space Applications**, International Conference on Space Mission Challenges, Pasadena, July 2003.
- 37 JOHNSON, M. A. et. al. **Nanosat Intelligent Power System Development**, Second international Conference on Integrated Micro/Nanotechnology for Space Applications, Pasadena, USA, 1999.
- 38 TOTH, G. et. al. **Quantum Cellular Neural Network**, Superlattices and Microstructure, v. 20, n. 4, 1996.
- 39 CAVALCANTI, A., FREITAS Jr, R. A. **Collective Robotic Coherence Behaviour for Nanosystems with Sensor-Based Neural Motion**, IEEE International Conference on Artificial Intelligent Systems, 2002.
- 40 DURAKBASA, M. N. et. al. **Artificial Intelligence Based Supervision and Confirmation of Complex Measurement Systems**, METROLOGIA 2003, Recife, Setembro 2003.
- 41 SHOR, P. W. **Algorithms for quantum computation: Discrete log and factoring**, 35th Annual Symposium on the Foundations of Computer Science, IEEE Computer Society Press, p. 124-134, 1994.
- 42 HAN, K.H., KIM, J.H. **Genetic quantum algorithm and its application to combinatorial optimization problem**, Congress on Evolutionary Computation, IEEE press, p. 1354-1360, 2000.
- 43 HAN, K.H., KIM, J.H. **Quantum-inspired evolutionary for a class of combinatorial optimization**, IEEE Transactions on Evolutionary Computation, v. 6, p. 580-593, 2002.
- 44 ABS DA CRUZ, A. V. et. al., **Quantum-inspired evolutionary algorithms and its application to numerical optimization problems**, ICONIP 2004, p. 212-217, 2004.
- 45 ABS DA CRUZ, A. V. et. al. **Cultural Operators for a Quantum-Inspired Evolutionary Algorithm Applied to Numerical Optimization Problems**, IWINAC (2), p. 1-10, 2005.
- 46 LENT, C. S., TOWGAW, P. D. **Bistable saturation due to single electron charging in rings of tunnel junctions**. Journal of Applied Physics, v. 75, p. 4077-4080, Apr. 1994.
- 47 WAUGH, F. R. et al. **Single-electron charging in double and triple quantum dots with tunable coupling**. Phys. Rev. Lett, v. 75, p. 705-708, Jul. 1995.

- 48 HOFMANN, F. et al. **Single electron switching in a parallel quantum dot.** Phys. Rev. B., v. 51, pp. 13872-13875, May 1995.
- 49 FIELD, M. et al. **Measurements of coulomb blockade with a noninvasive voltage probe.** Phys. Rev. Lett., v. 70, p. 1311-1314, Mar. 1993.
- 50 NIEMIER, M. **Design Digital Systems in Quantum Cellular Automata,** Master's thesis, University of Notre Dame, Apr. 2000.
- 51 NIEMIER, M. et al. **A potentially implementable fpga for quantum dot cellular automata,** First Workshop on Non-Silicon Computation (NSC-1), with 8th Intl. Symposium on High Performance Computer Architecture (HPCA-8), Feb. 2002.
- 52 NIEMIER, M. **The effects of a New Technology on the Design, Organization, and Architecture on Computing Systems.,** Ph.D. thesis, University of Notre Dame, Sep. 2003.
- 53 DYSART, T. and KOGGE, P. M. **Strategy and prototype tool for doing fault modeling in a nano-technology,** IEEE Nano Conference, Aug. 2003.
- 54 KIM, K. et al. **Towards Designing Robust QCA Architecture in the Presence of Sneak Noise Paths,** Design, Automation and Test, Europe Conference and Exhibition 2005.
- 55 FROST, S. E. **Memory Architecture for Quantum -dot Cellular Automata,** Master's thesis, University of Notre Dame, Mar. 2005.
- 56 AMLANI, I., et al. **Demonstration of a functional quantum-dot cellular automata cell,** J. Vac. Sci. Tech., p. 3795-3799, 1998.
- 57 AMLANI, I., et al. **Digital logic gate using quantum-dot cellular automata,** Science. p. 289-291, 1999.
- 58 AMLANI, I., et al. **Experimental demonstration of a leadless quantum-dot cellular automata cell,** Appl. Phys. Lett., v. 77(5), p.738-743, Jul. 2000.
- 59 SNIDER, G. L., et al. **Experimental demonstration of quantum-dot cellular automata,** Semicond. Sci. Technol., v. 13, p. A130-A134, UK, 1998.
- 60 POROD, W. **Quantum-dot devices and quantum-dot cellular automata.** Inter. J. Bifurcation and Chaos, v. 7, n. 10, p. 2199-2218, 1997.
- 61 TÓTH, G., LENT, S. **Quantum computing with quantum-dot cellular automata,** Phys. Rev. A, v. 63, p. 1-9. 2000.
- 62 COWBURN, R. P., WELLAND, M. E. **Room Temperature Magnetic Quantum Cellular Automata,** Science, v. 287, p. 1466-1468, 2000
- 63 PARISH, M. C. B. **Modelling of Physical Constraints on Bistable Magnetic Quantum Cellular Automata,** Ph.D. Thesis, University of London, UK, 2003.
- 64 LENT, C. S., ISAKSEN, B., LIEBERMAN, M. **Molecular Quantum-Dot Cellular Automata,** J. Am. Chem. Soc., v. 125, p. 1056-1063, 2003.
- 65 LENT, C. S. **Molecular Electronics: Bypassing the Transistor Paradigm,** Science, v. 288, p. 1597-1599, 2000

- 66 LENT, C. S., ISAKSEN, B. **Clocked Molecular Quantum-Dot Cellular Automata**, IEEE trans. Electron Devices, v. 50, n. 9, p. 1890-1895, 2003.
- 67 JIAO, J. et al. **Building blocks for the molecular expression of quantum cellular automata. Isolations and characterization of a covalence bonded square array of two ferrocenium and two ferrocene complex**, J. Am. Chem. Soc., v. 125, p. 7522-7523, 2003.
- 68 LI, Z., BEATTY, A. M., FEHLNER, T. P. **Molecular qca cells. 1. structure and functionalization of an unsymmetrical dinuclear mixed-valence complex for surface binding**, Inorganic Chemistry, v. 42, p.5707-5714, 2003.
- 69 LI, Z., FEHLNER, T. P. **Molecular qca cells. 2. characterization of an unsymmetrical dinuclear mixed-valence complex bound to a au surface by an organic linker**, Inorganic Chemistry, v. 42, p.5715-5721, 2003.
- 70 MANIMARAN, M. et al. **Scanning tunneling microscopy and spectroscopy investigation of qca molecules**, Ultramicroscopy, p. 55-63, 2003.
- 71 LENT, C. S. et. al. , **Aquinas, A quantum interconnected network array simulator**, Fifth International Workshop on Computational Electronics, May 1997.
- 72 BERZON, D., FOUNTAIN, T, **Computer Memory Structures Using QCA**, Report 98/1, University College London, 1998.
- 73 NIEMIER, M. T., KONTZ, M. J., KOGGE, P. M., **A design of and design tools for a novel quantum dot based microprocessor**, 27th Ann. Design Automation Conference, p. 227-232, Jun. 2000.
- 74 WALUS, K., et. al., **QCADesigner: A Rapid Design and Simulation Tool for Quantum-Dot Cellular Automata**, Second International Workshop on Quantum Dots for Quantum Computing and Classical Size Effect Circuits, university of Notre Dame, Aug. 2003.
- 75 WALUS, K., et. al., **QCADesigner: A CAD Tool for an Emerging Nano-Technology**, Micronet Annual Workshop, Oct. 2003.
- 76 DYSART, T. J., **Defect Properties and Design Tools for Quantum Dot Cellular Automata**, Master's thesis, University of Notre Dame, Jul. 2005.
- 77 HOPFIELD, J. J., **Neurons with graded response have collective computation properties like those of two-state neurons**, Proc. Natl. Acad. Sci., 81:3088-3092, USA 1984.
- 78 HOPFIELD, J. J., TANK, D. W., **Neuron computation of decisions in optimization problems**, Biological Cybernetics, 52:141-152, 1985.
- 79 HAYKIN, S., **Neural Networks: A Comprehensive Foundation**, Second Edition, Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, ISBN: 013273350-1.
- 80 TOUGAW, P. D., LENT, C. S., **Dynamic Behavior of Quantum Cellular Automata**, Journal of Applied Physics, vol. 80, n. 8, p. 4722-4736, October 15, 1996.

- 81 POTTER, M. A., DE JONG, K. A., **A Cooperative Co-Evolutionary Approach to Function Optimization**, The Third Parallel Problem Solving From Nature, Jerusalem, p. 249-257, Springer-Verlag, 1994.
- 82 DA CRUZ, A. V. A., **Otimização de Planejamento com Restrições de Precedência usando Algoritmos Genéticos e Co-Evolução Cooperativa**, Dissertação de Mestrado, Departamento de Engenharia Elétrica, PUC-Rio, 2003.
- 83 MOON, C. et. al., **An Efficient Genetic Algorithm for the Traveling Salesman Problem with Precedence Constraints**, European Journal of Operational Research, 140, p. 606-617, 2002.
- 84 GERGEL, N. et. al., **Modeling QCA for Area Minimization in Logic Synthesis**, GLSVLSI'03, Washington, April 28-29, 2003.
- 85 WALUS, K., JULLIEN, G. A., DIMITROV, V. S., **Computer Arithmetic Structures for Quantum Cellular Automata**, IEEE Asilomar Conference on Signals, Systems and Computer, November 9-12, 2003, Pacific Grove, CA.

Apêndice 1

Este apêndice é utilizado para mostrar os cálculos da “*kink energy*” de todos os possíveis pares de células, mostrados na tabela 1, que estão dentro do raio de vizinhança utilizado neste simulador.

A “*kink energy*” é calculada tal como foi explicada no capítulo 3. A interação entre duas células com as polarizações diferentes e com polarizações iguais é igual em módulo, porém com o sinal invertido. É fácil observar que uma é atrativa e a outra repulsiva.

Células Rotacionadas Lado a Lado

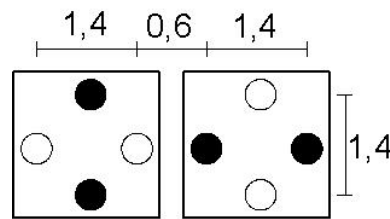


Figura 45– Células rotacionadas lado a lado.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{2} + \frac{+1}{1,47} + \frac{+1}{2,79} + \frac{-1}{2,44} + \frac{+1}{2,79} + \frac{-1}{2} + \frac{-1}{3,4} + \frac{+1}{2,79} + \frac{+1}{1,47} + \frac{-1}{0,6} + \frac{-1}{2} + \frac{+1}{1,47} + \frac{-1}{2,44} + \frac{+1}{1,47} + \frac{+1}{2,79} + \frac{-1}{2} \right]$$

$$E_1 = -0,625k .$$

A “*kink energy*” é igual a: $E_k = -0,625 - 0,625 = -1,25k$.

Uma Célula Convencional e uma Célula Rotacionada Lado a Lado

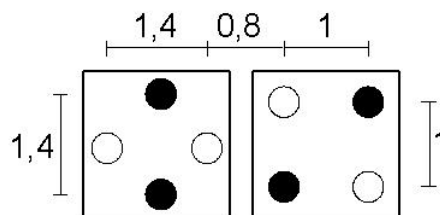


Figura 46– Uma célula convencionada e uma célula rotacionada lado a lado.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{1,5} + \frac{+1}{2,5} + \frac{+1}{1,92} + \frac{-1}{2,77} + \frac{+1}{2,25} + \frac{-1}{3,23} + \frac{-1}{2,25} + \frac{+1}{3,23} + \frac{+1}{0,94} + \frac{-1}{1,86} + \frac{-1}{0,94} + \frac{+1}{1,86} + \frac{-1}{1,92} + \frac{+1}{2,77} + \frac{+1}{1,5} + \frac{-1}{2,5} \right]$$

$$E_1 = 0k .$$

A “*kink energy*” é igual a: $E_k = 0k$.

Células Convencionais Distanciadas de Meia Célula

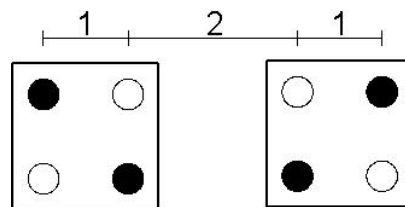


Figura 47– Células convencionais distanciadas de meia célula.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{3} + \frac{+1}{4} + \frac{+1}{3,16} + \frac{-1}{4,12} + \frac{+1}{2} + \frac{-1}{3} + \frac{-1}{2,23} + \frac{+1}{3,16} + \frac{-1}{3} + \frac{+1}{4} + \frac{+1}{3,16} + \frac{-1}{4,12} + \frac{+1}{2} + \frac{-1}{3} + \frac{-1}{2,23} + \frac{+1}{3,16} \right]$$

$$E_1 = 0,05k .$$

A “*kink energy*” é igual a: $E_k = 0,05 - (-0,05) = 0,1k$.

Células Rotacionadas Distanciadas de Meia Célula

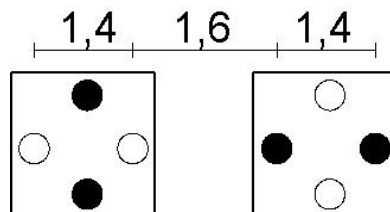


Figura 48– Células rotacionadas distanciadas de meia célula.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{3} + \frac{+1}{2,40} + \frac{+1}{3,76} + \frac{-1}{3,31} + \frac{+1}{3,76} + \frac{-1}{3} + \frac{-1}{4,4} + \frac{+1}{3,76} + \frac{+1}{2,4} + \frac{-1}{1,6} + \frac{-1}{3} + \frac{+1}{2,4} + \frac{-1}{3,31} + \frac{+1}{2,4} + \frac{+1}{3,76} + \frac{-1}{3} \right]$$

$$E_1 = -0,06k .$$

A “kink energy” é igual a: $E_k = -0,06 - 0,06 = -0,12k$.

Uma Célula Convencional e uma Célula Rotacionada Distanciadas de Meia Célula

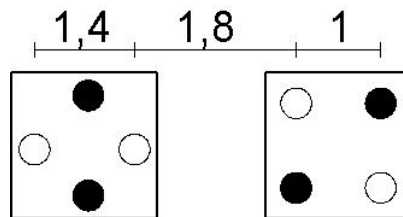


Figura 49– Uma célula convencionana e uma célula rotacionada distanciadas de meia célula.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{2,5} + \frac{+1}{3,5} + \frac{+1}{2,77} + \frac{-1}{3,7} + \frac{+1}{3,23} + \frac{-1}{4,22} + \frac{-1}{3,23} + \frac{+1}{4,22} + \frac{+1}{1,86} + \frac{-1}{2,84} + \frac{-1}{1,86} + \frac{+1}{2,84} + \frac{-1}{2,77} + \frac{+1}{3,7} + \frac{+1}{2,5} + \frac{-1}{3,5} \right]$$

$$E_1 = 0k .$$

A “kink energy” é igual a: $E_k = 0k$.

Células Convencionais Distanciadas de Uma Célula

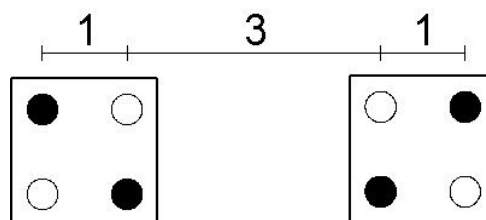


Figura 50– Células convencionais distanciadas de uma célula.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{4} + \frac{+1}{5} + \frac{+1}{4,12} + \frac{-1}{5,1} + \frac{+1}{3} + \frac{-1}{4} + \frac{-1}{3,16} + \frac{+1}{4,12} + \frac{-1}{4} + \frac{+1}{5} + \frac{+1}{4,12} + \frac{-1}{5,1} + \frac{+1}{3} + \frac{-1}{4} + \frac{-1}{3,16} + \frac{+1}{4,12} \right]$$

$$E_1 = 0,0125k .$$

A “kink energy” é igual a: $E_k = 0,0125 - (-0,0125) = 0,025k$.

Células Rotacionadas Distanciadas de Uma Célula

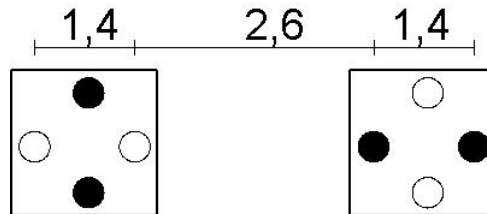


Figura 51– Células rotacionadas distanciadas de uma célula.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{4} + \frac{+1}{3,37} + \frac{+1}{4,75} + \frac{-1}{4,23} + \frac{+1}{4,75} + \frac{-1}{4} + \frac{-1}{5,4} + \frac{+1}{4,75} + \frac{+1}{3,37} + \frac{-1}{2,6} + \frac{-1}{4} + \frac{+1}{3,37} + \frac{-1}{4,23} + \frac{+1}{3,37} + \frac{+1}{4,75} + \frac{-1}{4} \right]$$

$$E_1 = -0,013k .$$

A “kink energy” é igual a: $E_k = -0,013 - 0,013 = -0,026k$.

Uma Célula Convencional e uma Célula Rotacionada Distanciadas de Uma Célula

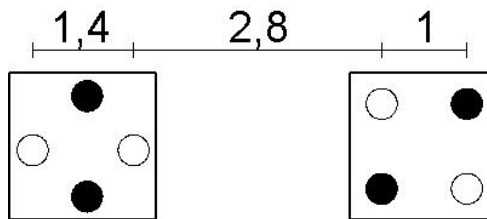


Figura 52– Uma célula convencionana e uma célula rotacionada distanciadas de uma célula.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{3,5} + \frac{+1}{4,5} + \frac{+1}{3,7} + \frac{-1}{4,65} + \frac{+1}{4,22} + \frac{-1}{5,22} + \frac{-1}{4,22} + \frac{+1}{5,22} + \frac{+1}{2,84} + \frac{-1}{3,83} + \frac{-1}{2,84} + \frac{+1}{3,83} + \frac{-1}{3,7} + \frac{+1}{4,65} + \frac{+1}{3,5} + \frac{-1}{4,5} \right]$$

$$E_1 = 0k .$$

A “kink energy” é igual a: $E_k = 0k$.

Células Convencionais em Diagonal

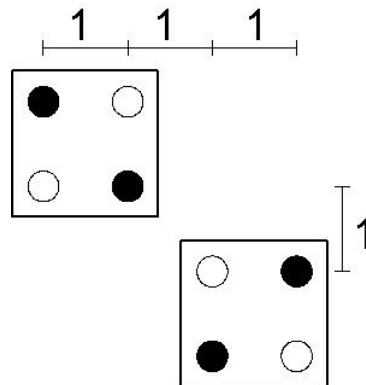


Figura 53– Células convencionais em diagonal.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{282} + \frac{+1}{36} + \frac{+1}{36} + \frac{-1}{424} + \frac{+1}{223} + \frac{-1}{282} + \frac{-1}{316} + \frac{+1}{36} + \frac{+1}{223} + \frac{-1}{316} + \frac{-1}{282} + \frac{+1}{36} + \frac{-1}{141} + \frac{+1}{223} + \frac{+1}{223} + \frac{-1}{282} \right]$$

$$E_1 = -0,091k .$$

A “kink energy” é igual a: $E_k = -0,091 - 0,091 = -0,18k$.

Células Rotacionadas em Diagonal

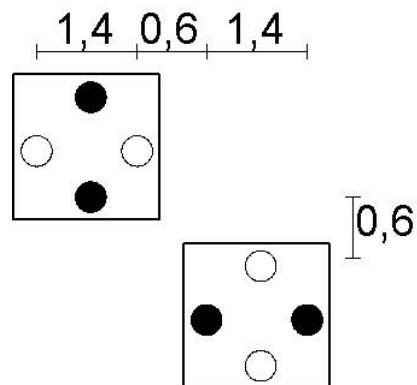


Figura 54– Células rotacionadas em diagonal.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{283} + \frac{+1}{299} + \frac{+1}{382} + \frac{-1}{394} + \frac{+1}{299} + \frac{-1}{283} + \frac{-1}{394} + \frac{+1}{382} + \frac{+1}{184} + \frac{-1}{209} + \frac{-1}{283} + \frac{+1}{299} + \frac{-1}{209} + \frac{+1}{184} + \frac{+1}{299} + \frac{-1}{283} \right]$$

$$E_1 = 0,07k .$$

A “kink energy” é igual a: $E_k = 0,07 - (-0,07) = 0,14k$.

Uma Célula Convencional e uma Célula Rotacionada em Diagonal

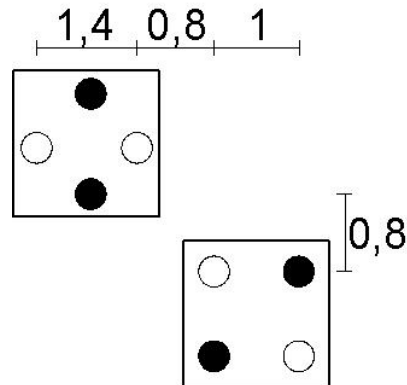


Figura 55— Uma célula convencionana e uma célula rotacionada em diagonal.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{2,66} + \frac{+1}{3,33} + \frac{+1}{3,53} + \frac{-1}{4,06} + \frac{+1}{2,66} + \frac{-1}{3,53} + \frac{-1}{3,33} + \frac{+1}{4,06} + \frac{+1}{1,7} + \frac{-1}{2,34} + \frac{-1}{2,62} + \frac{+1}{3,08} + \frac{-1}{1,7} + \frac{+1}{2,62} + \frac{+1}{2,34} + \frac{-1}{3,08} \right]$$

$$E_1 = 0k .$$

A “kink energy” é igual a: $E_k = 0k$.

Células Convencionais em Diagonal Distanciadas

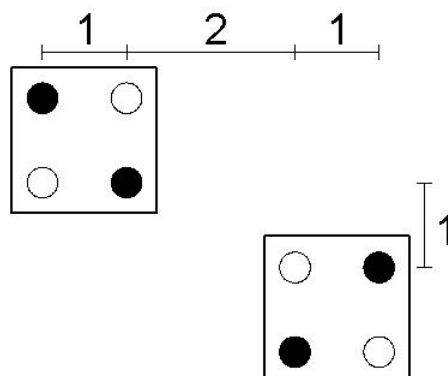


Figura 56— Células convencionais em diagonal.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{36} + \frac{+1}{4,47} + \frac{+1}{4,24} + \frac{-1}{5} + \frac{+1}{2,82} + \frac{-1}{3,6} + \frac{-1}{3,6} + \frac{+1}{4,24} + \frac{+1}{3,16} + \frac{-1}{4,12} + \frac{-1}{3,6} + \frac{+1}{4,47} + \frac{-1}{2,23} + \frac{+1}{3,16} + \frac{+1}{2,82} + \frac{-1}{3,6} \right]$$

$$E_1 = -0,02k .$$

A “kink energy” é igual a: $E_k = -0,02 - 0,02 = -0,04k$.

Células Rotacionadas em Diagonal Distanciadas

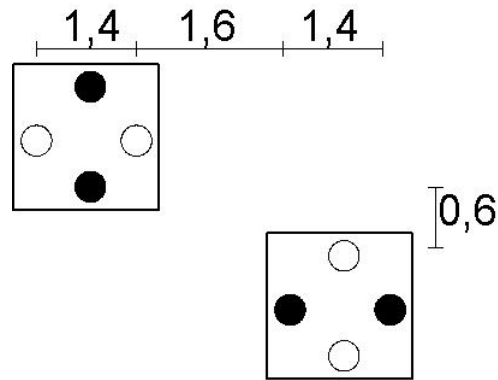


Figura 57– Células rotacionadas em diagonal distanciadas.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{36} + \frac{+1}{2,64} + \frac{+1}{3,92} + \frac{-1}{3,05} + \frac{+1}{4,58} + \frac{-1}{3,6} + \frac{-1}{4,83} + \frac{+1}{3,92} + \frac{+1}{3,54} + \frac{-1}{2,56} + \frac{-1}{3,6} + \frac{+1}{2,64} + \frac{-1}{4,53} + \frac{+1}{3,54} + \frac{+1}{4,58} + \frac{-1}{3,6} \right]$$

$$E_1 = 0,012k .$$

A “kink energy” é igual a: $E_k = 0,012 - (-0,012) = 0,024k$.

Uma Célula Convencional e uma Célula Rotacionada em Diagonal Distanciadas

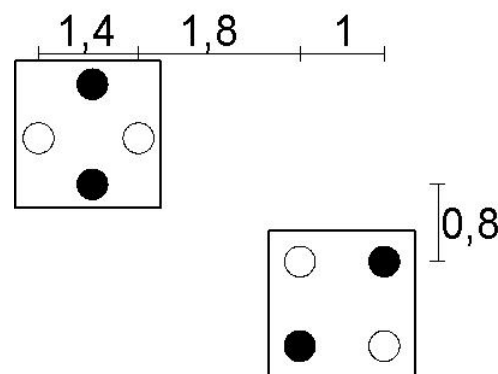


Figura 58– Uma célula convencional e uma célula rotacionada em diagonal distanciadas.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{1}{3,08} + \frac{-1}{3,93} + \frac{-1}{2,62} + \frac{+1}{3,59} + \frac{-1}{4,06} + \frac{+1}{4,88} + \frac{+1}{3,56} + \frac{-1}{4,45} + \frac{-1}{3,08} + \frac{+1}{3,75} + \frac{+1}{2,34} + \frac{-1}{3,17} + \frac{+1}{4,06} + \frac{-1}{4,74} + \frac{-1}{3,33} + \frac{+1}{4,13} \right]$$

$$E_1 = 0,013k.$$

A “*kink energy*” é igual a: $E_k = 0,013 - (-0,013) = 0,026k$.

O cálculo da “*kink energy*” para esta posição possui uma particularidade. São oito pares possíveis respeitando esta posição. Quatro deste pares possuem a “*kink energy*” conforme calculado acima. As quatro posições restantes possuem a “*kink energy*” igual em módulo, mas com sinal invertido com relação ao calculado acima. A figura abaixo mostra as quatro posições que possuem a “*kink energy*” como calculado acima e os quadrados pontilhados mostram as posições das células onde o sinal da “*kink energy*” é invertido em relação ao calculado.

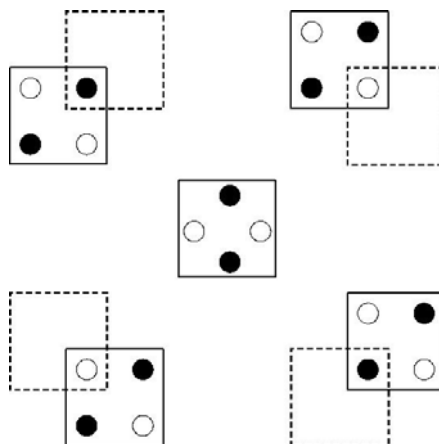


Figura 59— As posições das células com a “*kink energy*” positiva. Os quadrados pontilhados indicam as posições onde a “*kink energy*” é negativa devido a inversão de polarização.

Células Convencionais em Meia Diagonal

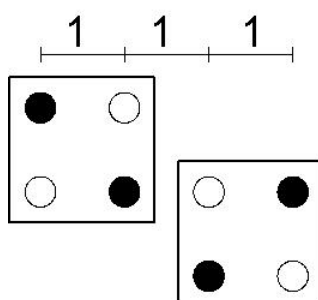


Figura 60– Células convencionais em meia diagonal.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{2,23} + \frac{+1}{3,16} + \frac{+1}{2,82} + \frac{-1}{3,6} + \frac{+1}{1,41} + \frac{-1}{2,23} + \frac{-1}{2,23} + \frac{+1}{2,82} + \frac{+1}{2} + \frac{-1}{3} + \frac{-1}{2,23} + \frac{+1}{3,16} - 1 + \frac{+1}{2} + \frac{+1}{1,41} + \frac{-1}{2,23} \right]$$

$$E_1 = -0,09k .$$

A “kink energy” é igual a: $E_k = -0,09 - 0,09 = -0,18k$.

Células Rotacionadas em Meia Diagonal

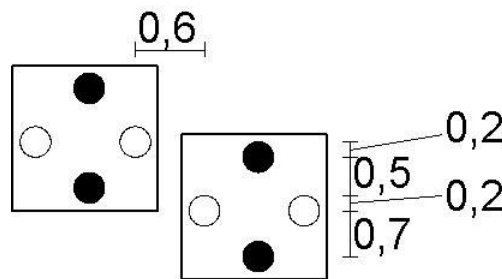


Figura 61– Células rotacionadas em meia diagonal.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{2,19} + \frac{+1}{2,06} + \frac{+1}{3,14} + \frac{-1}{3,05} + \frac{+1}{2,71} + \frac{-1}{2,19} + \frac{-1}{3,52} + \frac{+1}{3,14} + \frac{+1}{1,31} + \frac{-1}{1,08} + \frac{-1}{2,19} + \frac{+1}{2,06} + \frac{-1}{2,06} + \frac{+1}{1,31} + \frac{+1}{2,71} + \frac{-1}{2,19} \right]$$

$$E_1 = 0,023k .$$

A “kink energy” é igual a: $E_k = 0,023 - (-0,023) = 0,046k$.

Uma Célula Convencional e uma Célula Rotacionada em Meia Diagonal

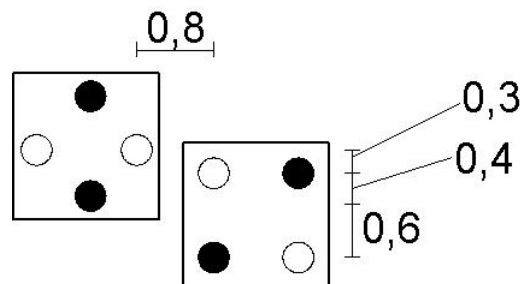


Figura 62– Uma célula convencionona e uma célula rotacionada em meia diagonal distanciadas.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{1,8} + \frac{+1}{2,69} + \frac{+1}{2,5} + \frac{-1}{3,2} + \frac{+1}{2,22} + \frac{-1}{3,21} + \frac{-1}{2,55} + \frac{+1}{3,45} + \frac{+1}{0,85} + \frac{-1}{1,82} + \frac{-1}{1,52} + \frac{+1}{2,22} + \frac{-1}{1,55} + \frac{+1}{2,53} + \frac{+1}{1,61} + \frac{-1}{2,57} \right]$$

$$E_1 = 0,342k .$$

A “*kink energy*” é igual a: $E_k = 0,342 - (-0,342) = 0,684k$.

Semelhante ao caso das células em diagonal distanciadas, o valor da “*kink energy*” varia de acordo com a posição da célula. A figura abaixo ilustra a posição das células com o valor da “*kink energy*” positivo. Os quadrados pontilhados representam as posição das células com o valor da “*kink energy*” negativo.

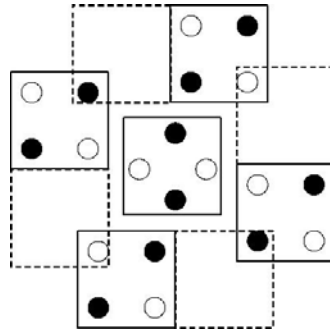


Figura 63– As posições das células com a “*kink energy*” positiva. Os quadrados pontilhados indicam as posições onde a “*kink energy*” é negativa devido a inversão de polarização.

Células Convencionais em Meia Diagonal Distanciadas

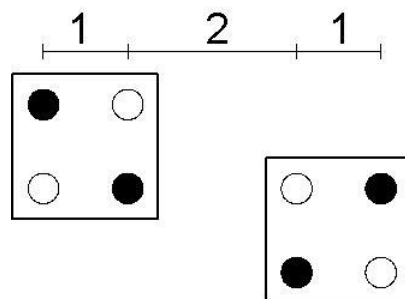


Figura 64– Células convencionais em meia diagonal distanciadas.

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{316} + \frac{+1}{412} + \frac{+1}{36} + \frac{-1}{447} + \frac{+1}{223} + \frac{-1}{316} + \frac{-1}{282} + \frac{+1}{36} + \frac{+1}{3} + \frac{-1}{4} + \frac{-1}{316} + \frac{+1}{412} + \frac{-1}{2} + \frac{+1}{3} + \frac{+1}{223} + \frac{-1}{316} \right]$$

$$E_1 = 0,01k .$$

A “kink energy” é igual a: $E_k = 0,01 - (-0,01) = 0,02k$.

Células Rotacionadas em Meia Diagonal Distanciada

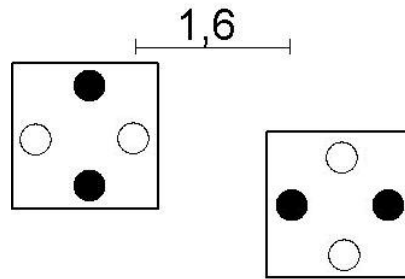


Figura 65— **Células rotacionadas em meia diagonal.**

Energia para polarizações diferentes:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{313} + \frac{+1}{28} + \frac{+1}{403} + \frac{-1}{378} + \frac{+1}{37} + \frac{-1}{313} + \frac{-1}{449} + \frac{+1}{403} + \frac{+1}{231} + \frac{-1}{183} + \frac{-1}{313} + \frac{+1}{28} + \frac{-1}{304} + \frac{+1}{231} + \frac{+1}{37} + \frac{-1}{313} \right]$$

$$E_1 = -0,023k .$$

A “kink energy” é igual a: $E_k = -0,023 - 0,023 = -0,046k$.

Uma Célula Convencional e uma Célula Rotacionada em Meia Diagonal Distanciadas

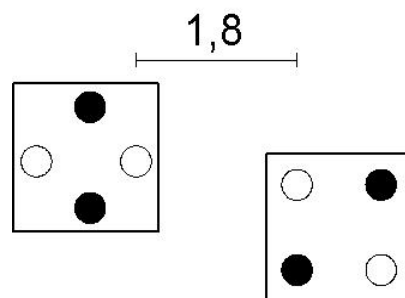


Figura 66— **Uma célula convencionana e uma célula rotacionada em meia diagonal distanciadas.**

Energia para polarizações iguais:

$$E_1 = k \left[\frac{-1}{2,69} + \frac{+1}{3,64} + \frac{+1}{3,2} + \frac{-1}{4,03} + \frac{+1}{3,21} + \frac{-1}{4,21} + \frac{-1}{3,45} + \frac{+1}{4,39} + \frac{+1}{1,82} + \frac{-1}{2,81} + \frac{-1}{2,22} + \frac{+1}{3,08} + \frac{-1}{2,53} + \frac{+1}{3,52} + \frac{+1}{2,57} + \frac{-1}{3,55} \right]$$

$$E_1 = 0,043k.$$

A “*kink energy*” é igual a: $E_k = -0,043 - 0,043 = -0,086k$.

Semelhante ao caso das células em diagonal distanciadas, o valor da “*kink energy*” varia de acordo com a posição da célula. A figura ilustra a posição das células com o valor da “*kink energy*” negativo. Os quadrados pontilhados representam as posições das células com o valor da “*kink energy*” é positivo.

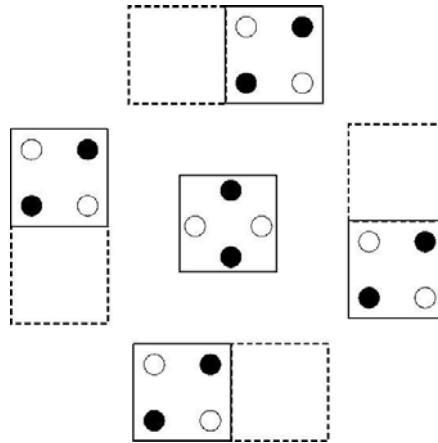


Figura 67– As posições das células com a “*kink energy*” negativa. Os quadrados pontilhados indicam as posições onde a “*kink energy*” é positiva devido a inversão de polarização.

Apêndice 2

Este apêndice apresenta o resultado da simulação de alguns circuitos de QCA utilizando o simulador de QCA baseado em uma rede neural.

Inversor

A cor vermelha representa células convencionais com polarização igual a -1 (binário 0) e as azuis representam as células convencionais com polarização igual a 1 (binário 1).

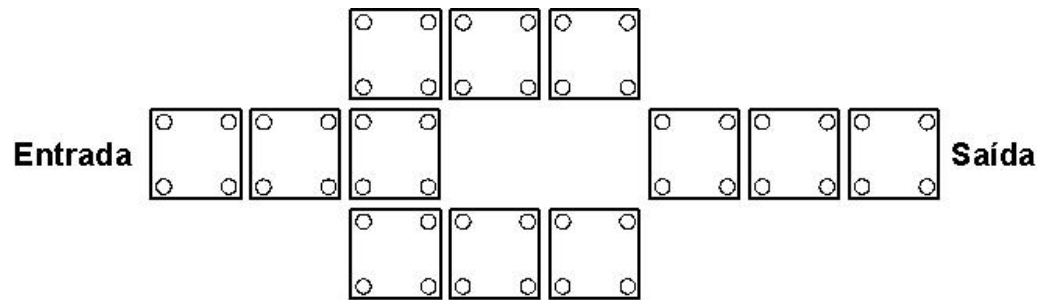


Figura 68— Representação do inversor.

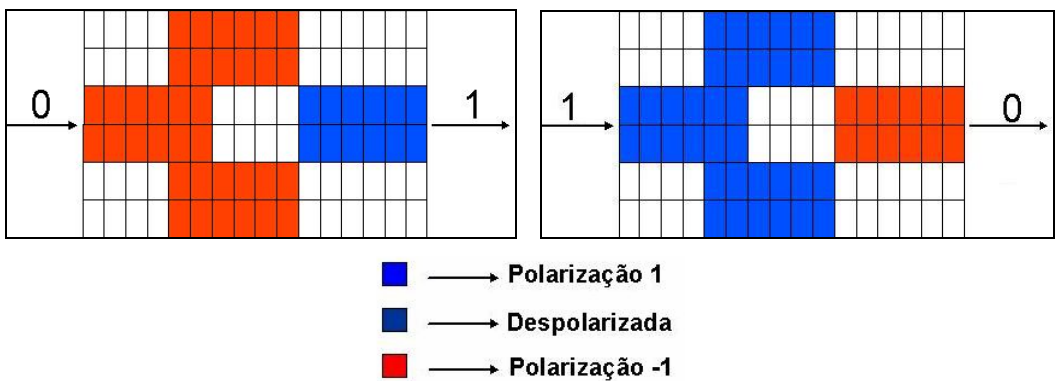


Figura 69— As simulações do inversor para os dois valores de entrada possíveis.

Dois Fios Cruzando em um Plano

A cor marrom representa células rotacionadas com polarização igual a -1 (binário 0) e a amarela representa células rotacionadas com polarização igual a 1 (binário 1).

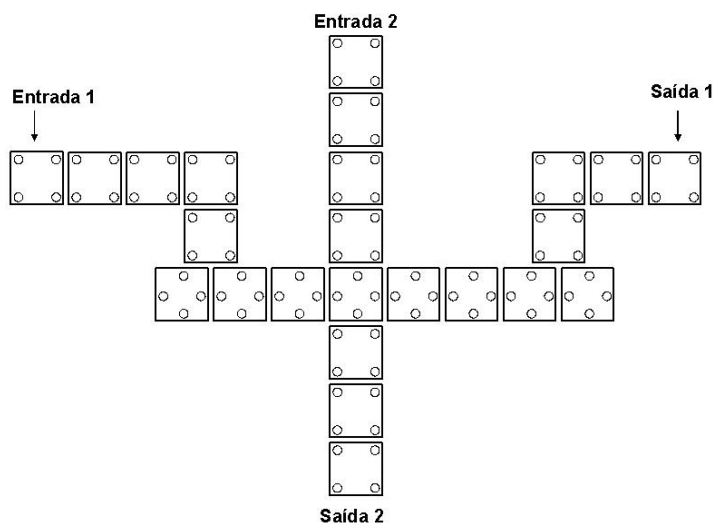


Figura 70– Representação de um circuito com dois fios cruzando em um plano.

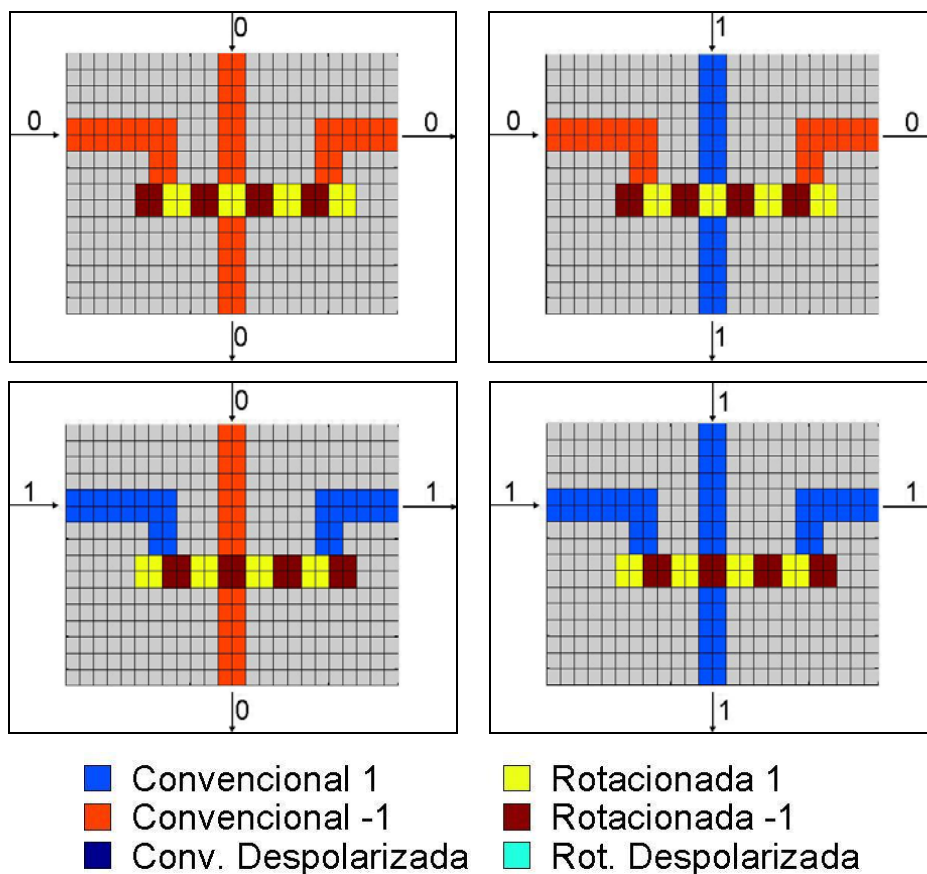


Figura 71– **Simulação de dois fios cruzando em um plano. Todos os conjuntos de entradas.**

Majority Gate Tradicional

Todo o circuito está em uma zona de clock.

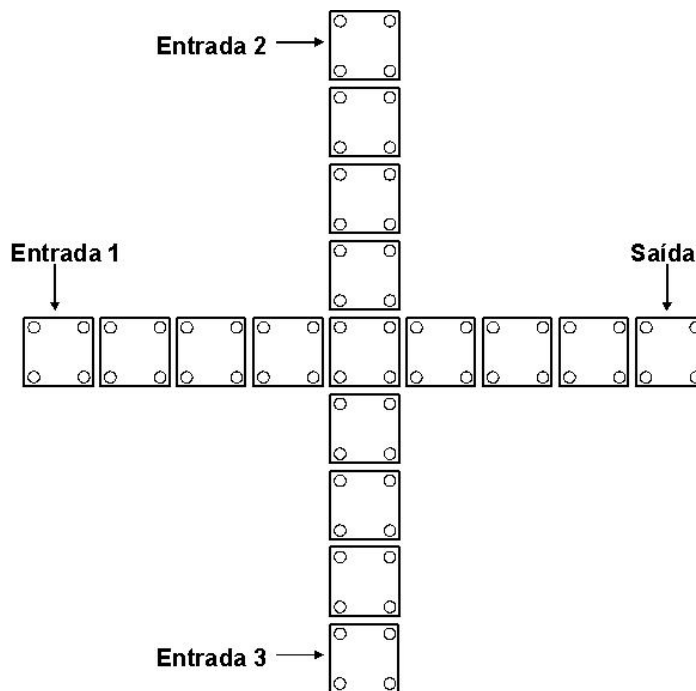
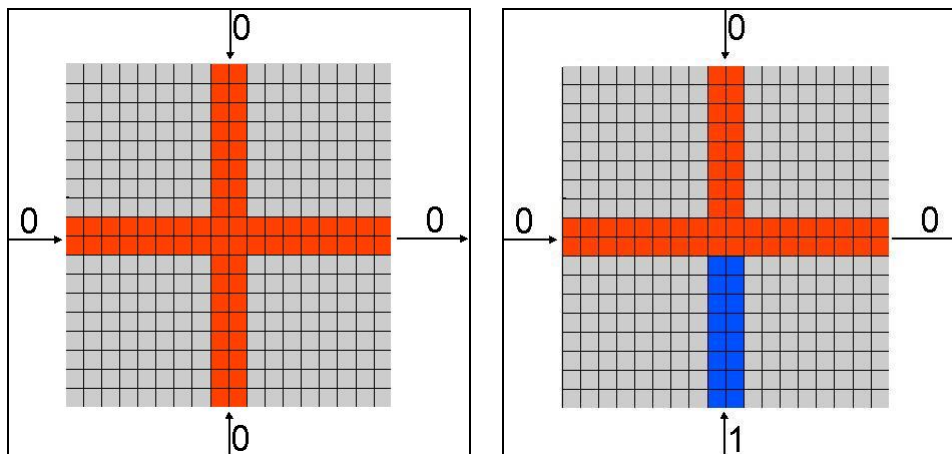


Figura 72- **Representação de um majority gate.**



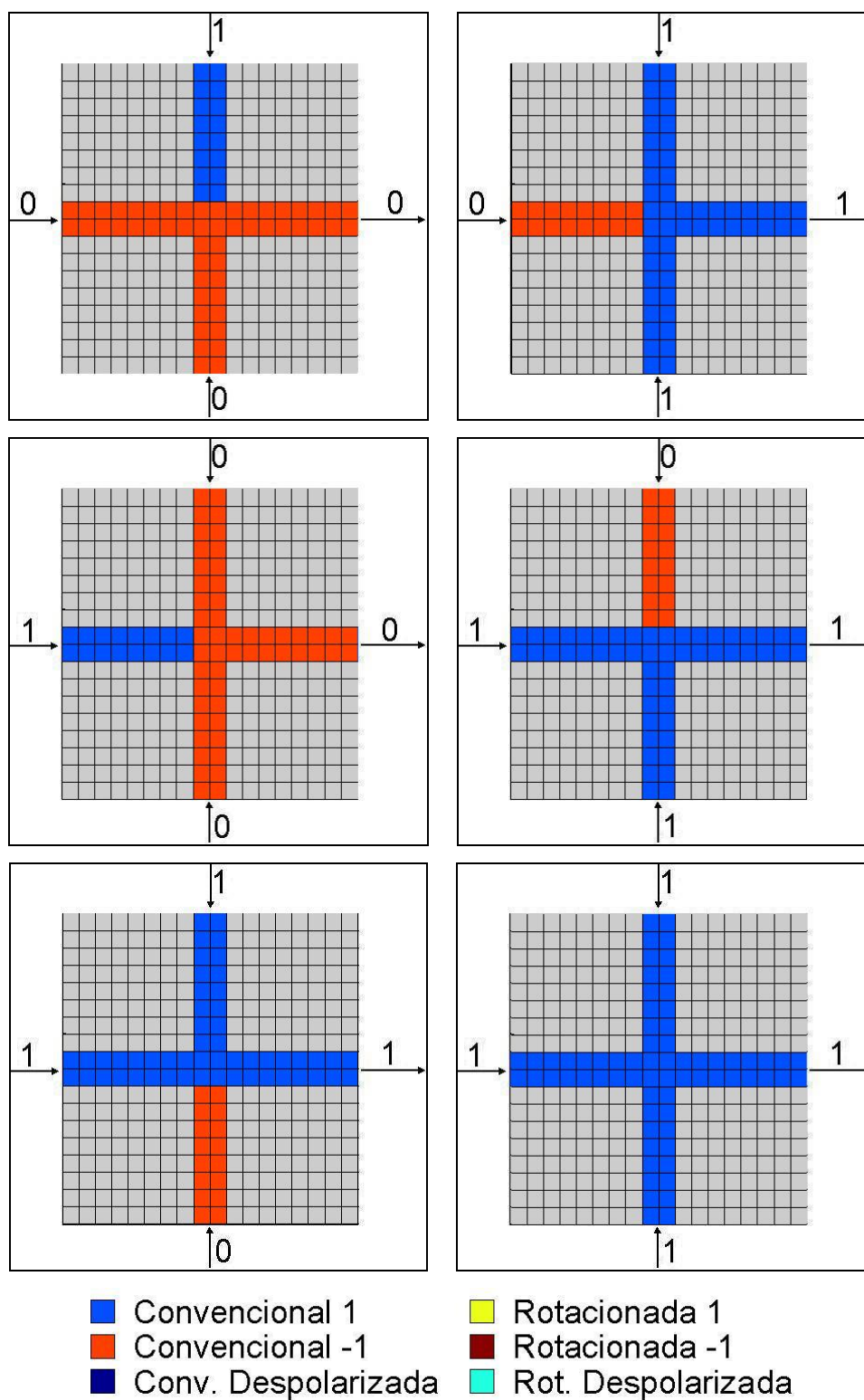


Figura 73— **Simulação de um majority gate. Todos os conjuntos de entradas.**

Porta Lógica E

A porta lógica *E* tem um esquema igual ao esquema do majority gate apresentado acima, porém com a entrada 3 fixada sempre com o valor binário 0.

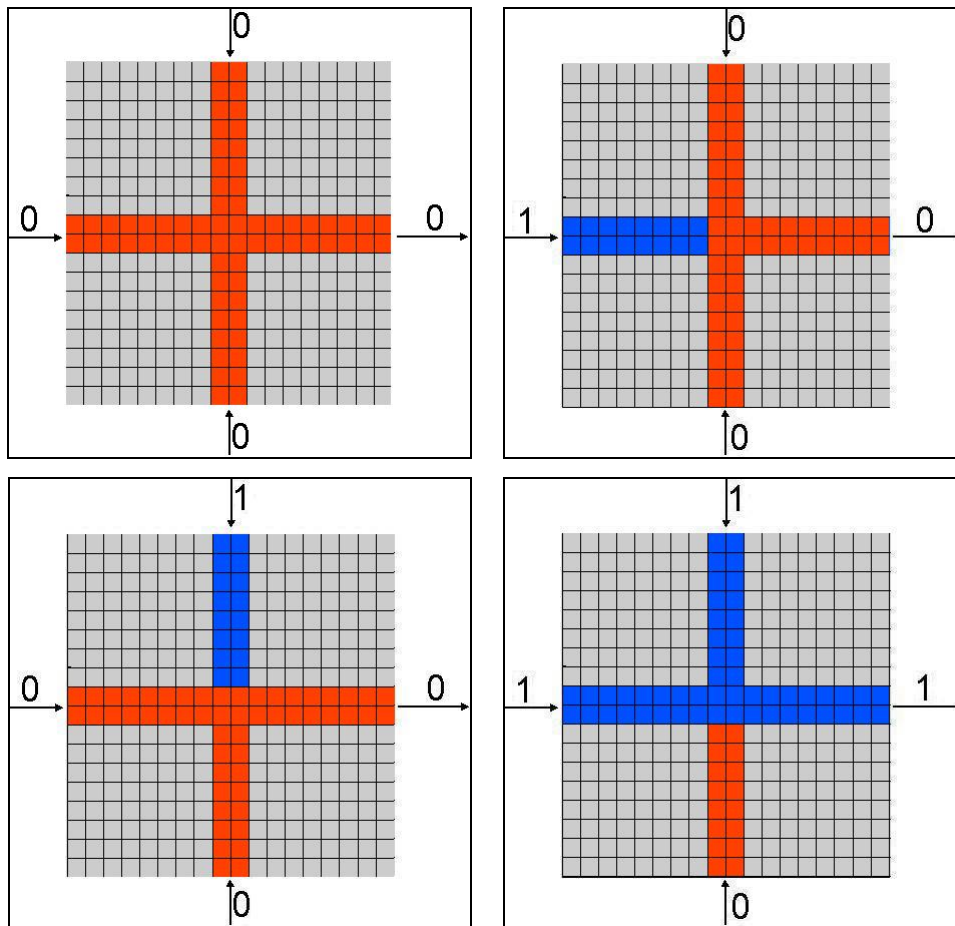


Figura 74– Simulação de um majority gate. Todos os conjuntos de entradas.

A porta lógica *OU* funciona da mesma maneira, porém com a entrada 3 fixada no binário 1.

Majority Gate Alterado

A simulação deste majority gate é importante pois os sinais quase nunca chegam a porta lógica exatamente como nas simulações anteriores. A figura abaixo ilustra o esquemático do novo majority gate.

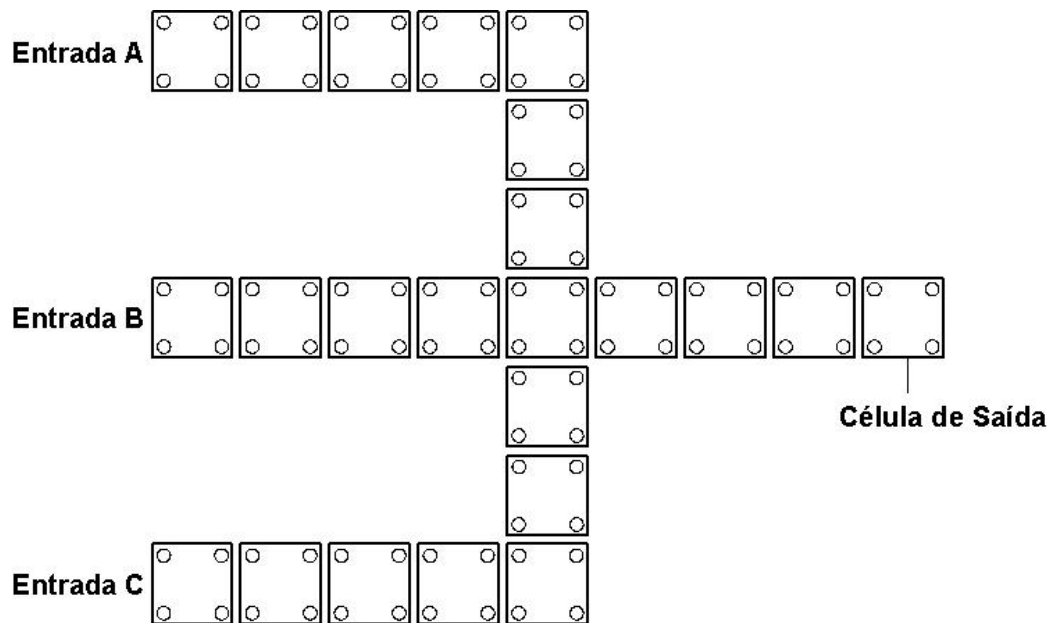
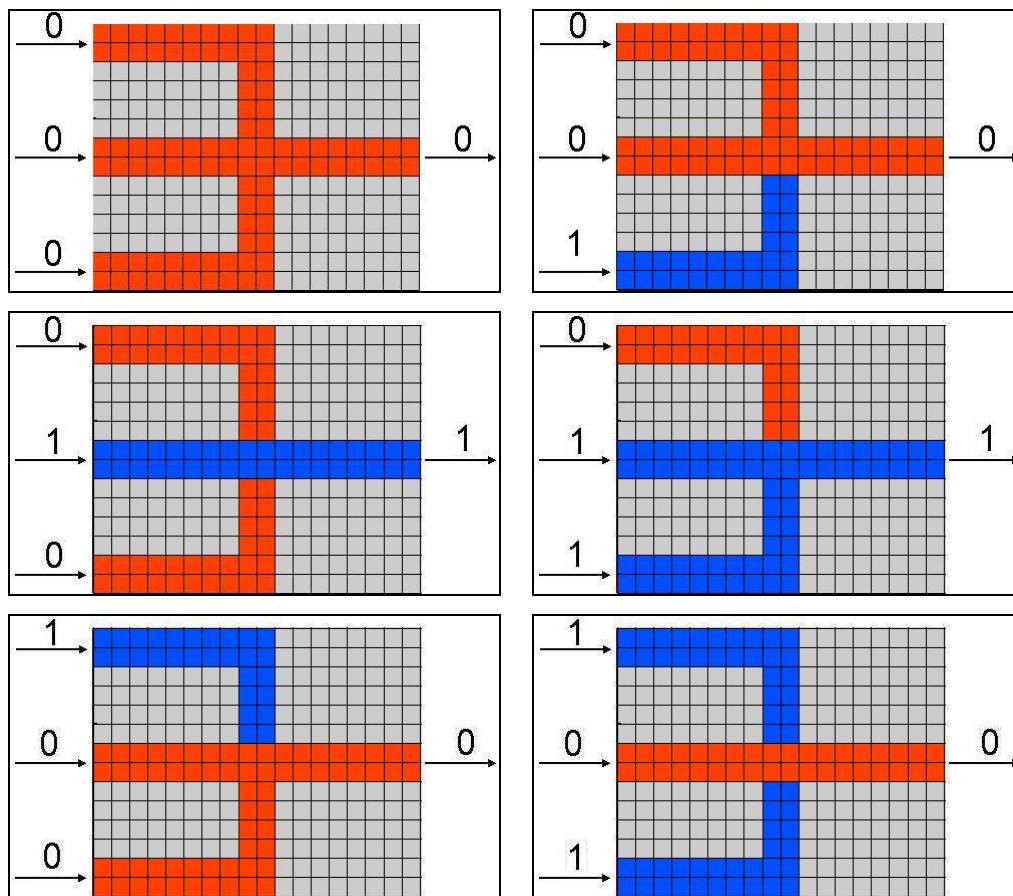


Figura 75- Representação de um majority gate com as entradas partindo da esquerda.



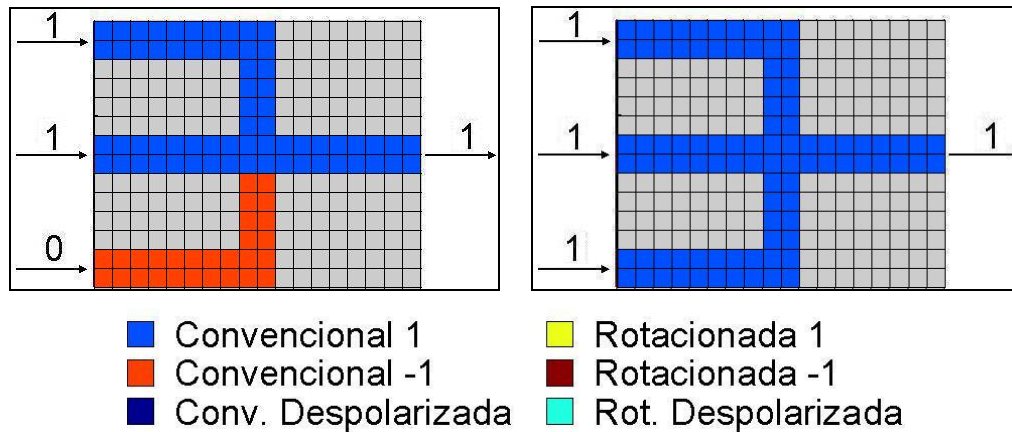


Figura 76– Simulação de um outro majority gate. Todos os conjuntos de entradas.

É fácil perceber que este *majority gate* não funciona corretamente. O resultado da saída é o valor da entrada B, já que este sinal está mais perto da saída do circuito e se propaga sem interferência das demais entradas. Para que o *majority gate* funcione de maneira propícia, zonas de *clock* devem ser utilizadas para sincronizar o fluxo do circuito.

A figura abaixo ilustra o esquemático do *majority gate* utilizando zonas de *clock* (representadas pelos tons de cinza).

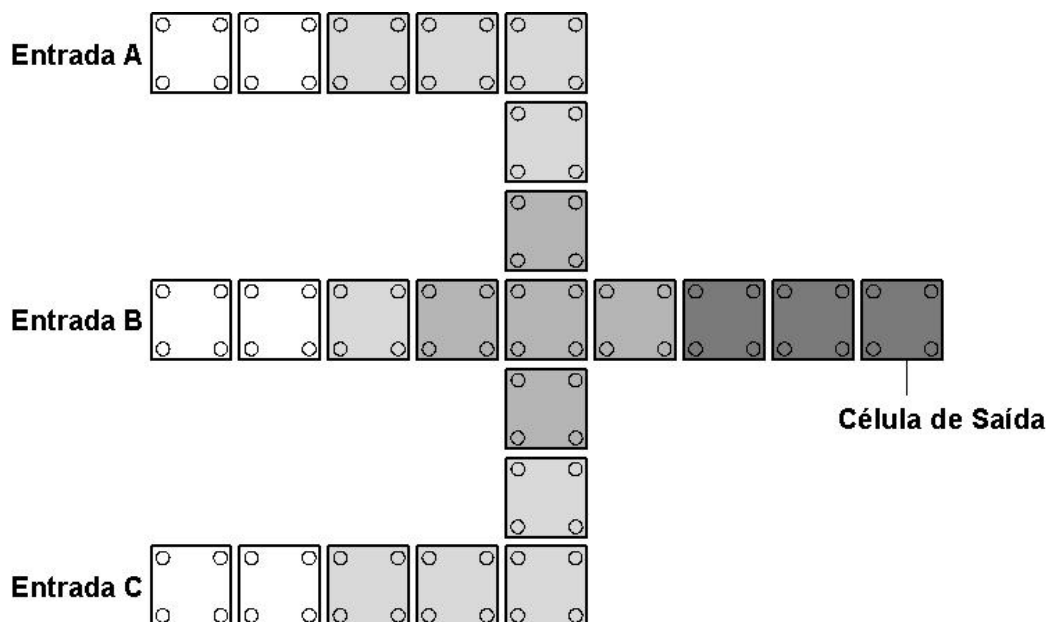
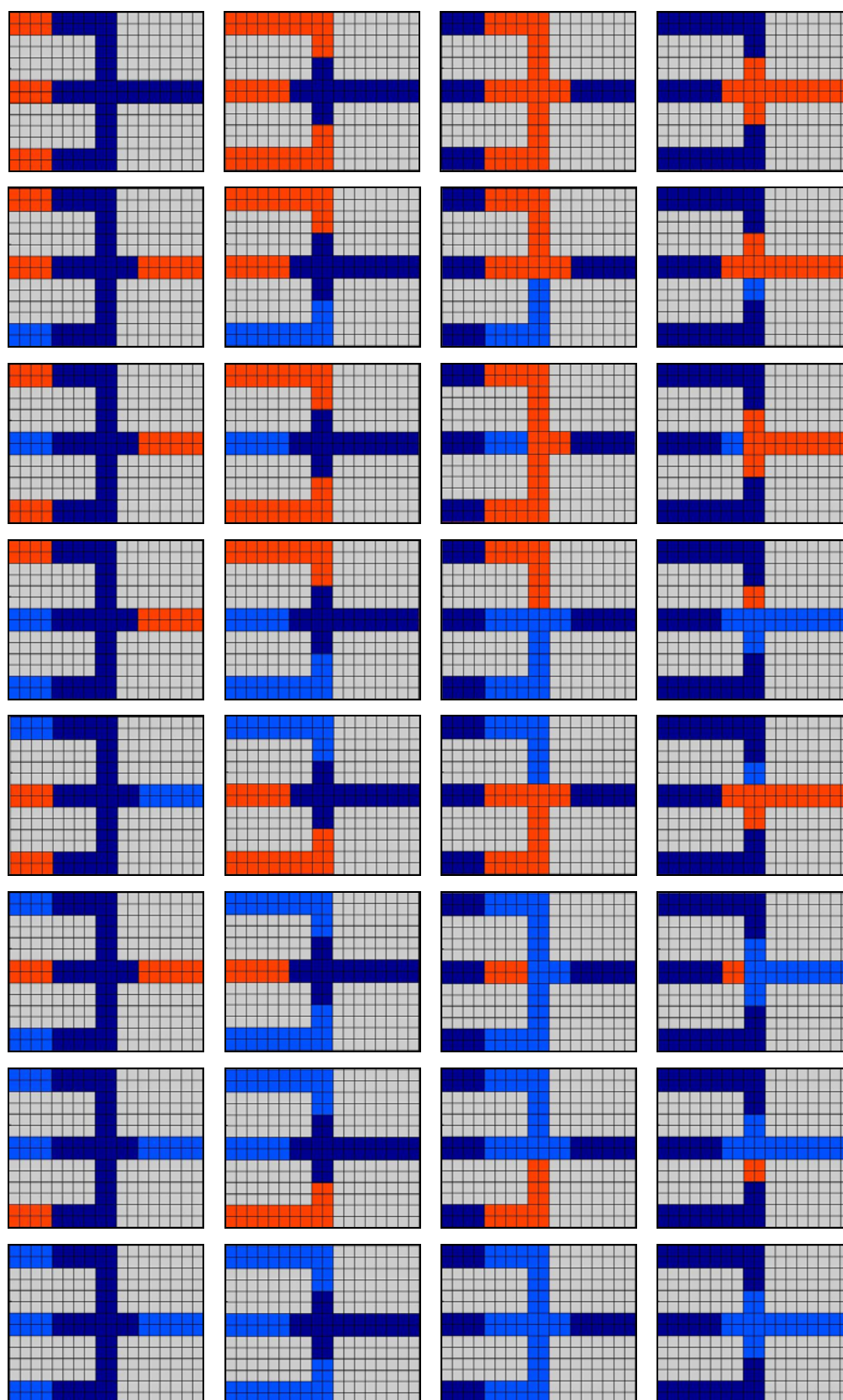


Figura 77- Representação de um *majority gate*, com zonas de *clock*. Os sinais fluem da esquerda para a direita.



■ Convencional 1
■ Convencional -1
■ Conv. Despolarizada

Figura 78– Simulação passo a passo do majority gate com zonas de clock.

Somador Completo

Aqui é apresentado a simulação do somador completo proposto em [85].

A cor azul claro (ciano) representa células rotacionadas despolarizadas e a azul escuro representa as células convencionais despolarizadas.

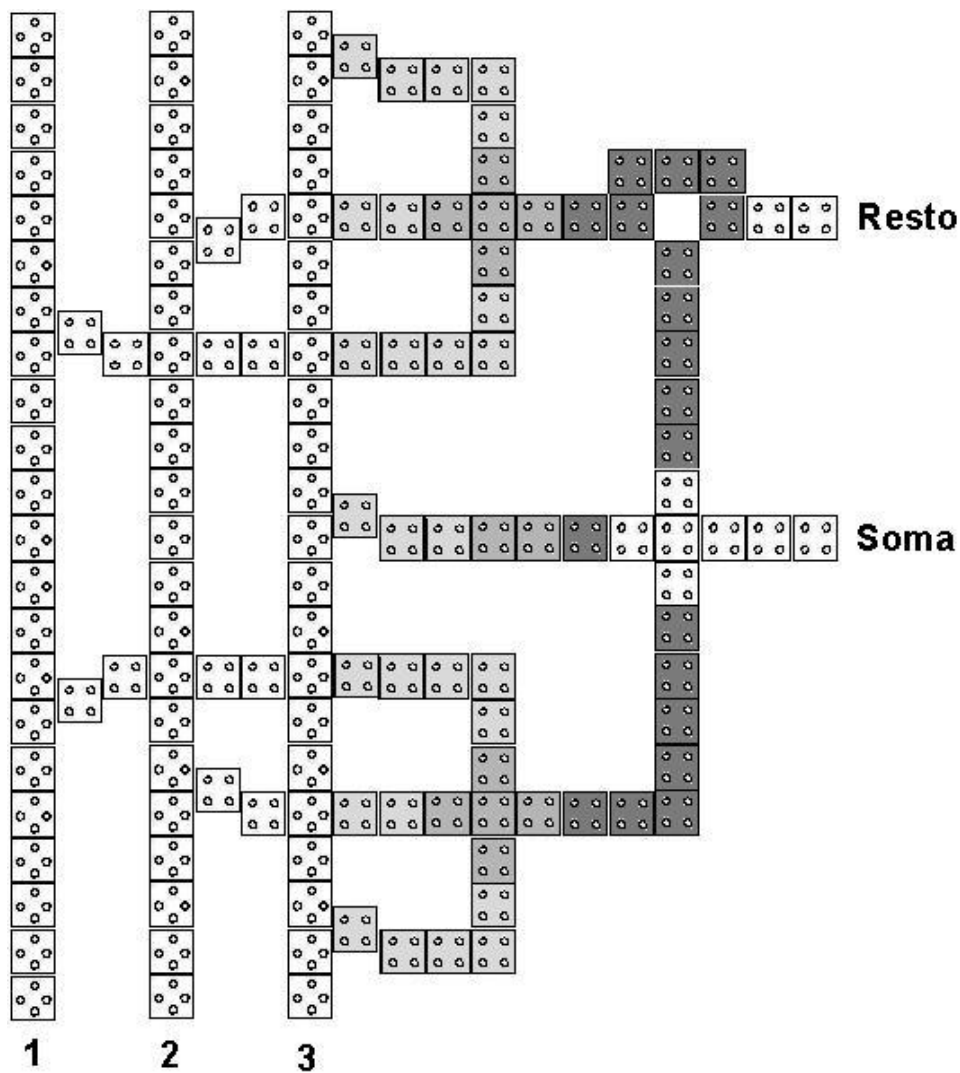
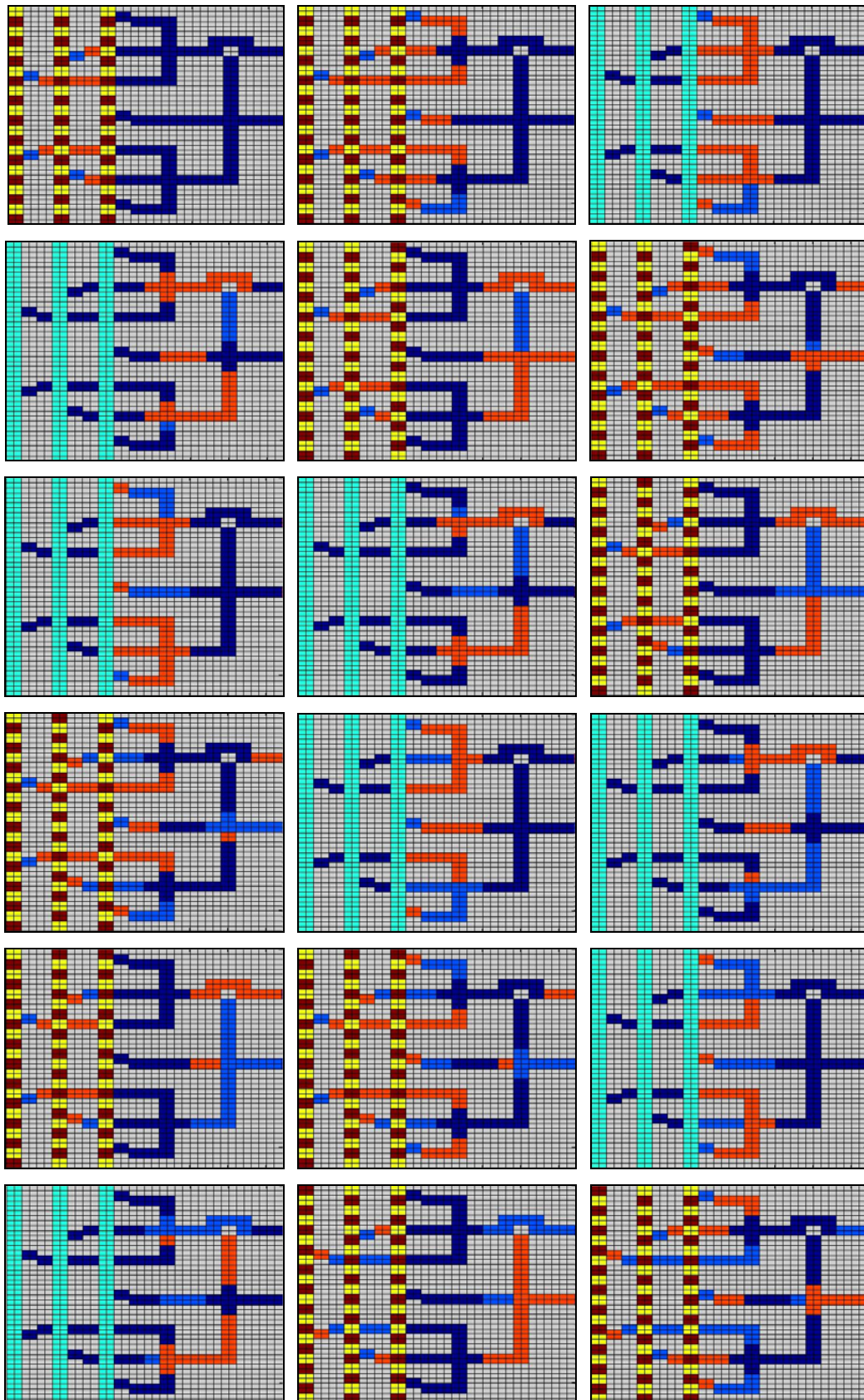


Figura 79- Representação de um somador completo com três entradas.



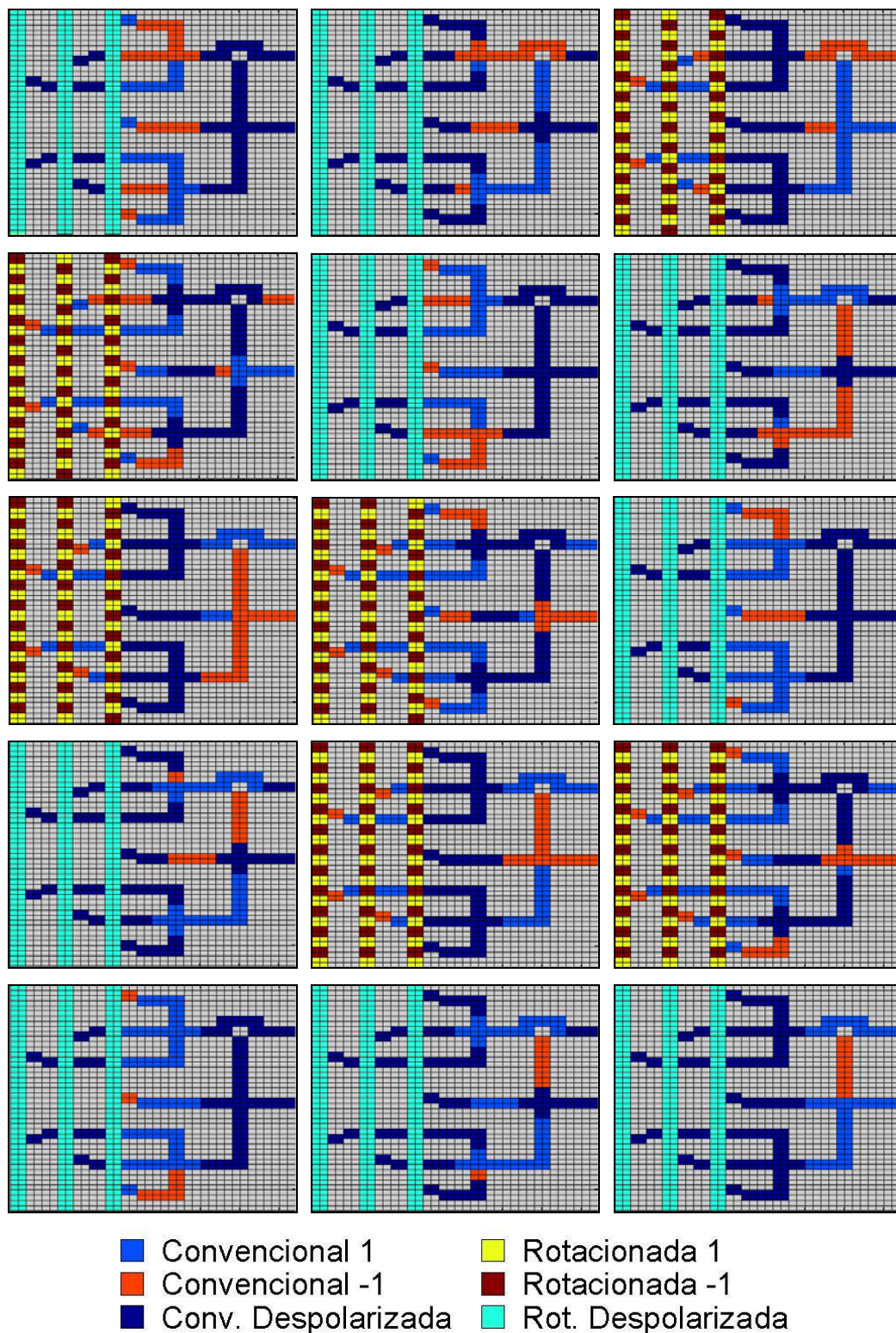


Figura 80– Simulação passo a passo de um somador completo.

Da mesma maneira, um somador completo serial também é simulado aqui. Este circuito permite que outras operações, tal como multiplicação, conforme mostrado em [85].

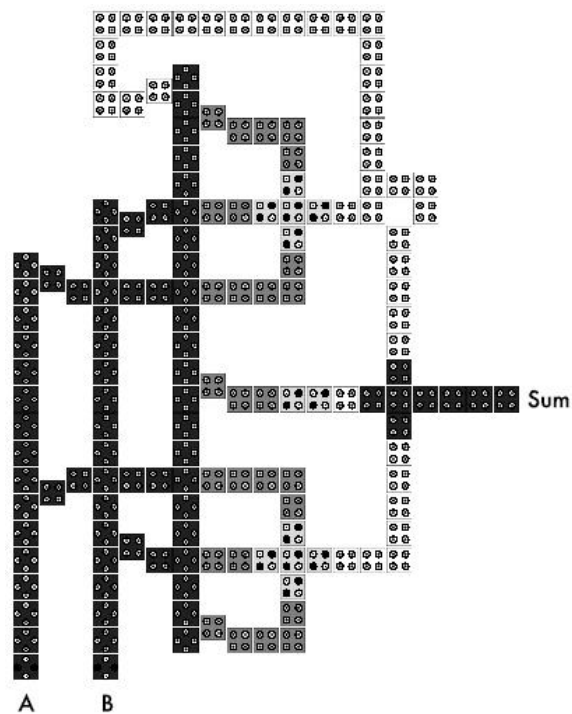
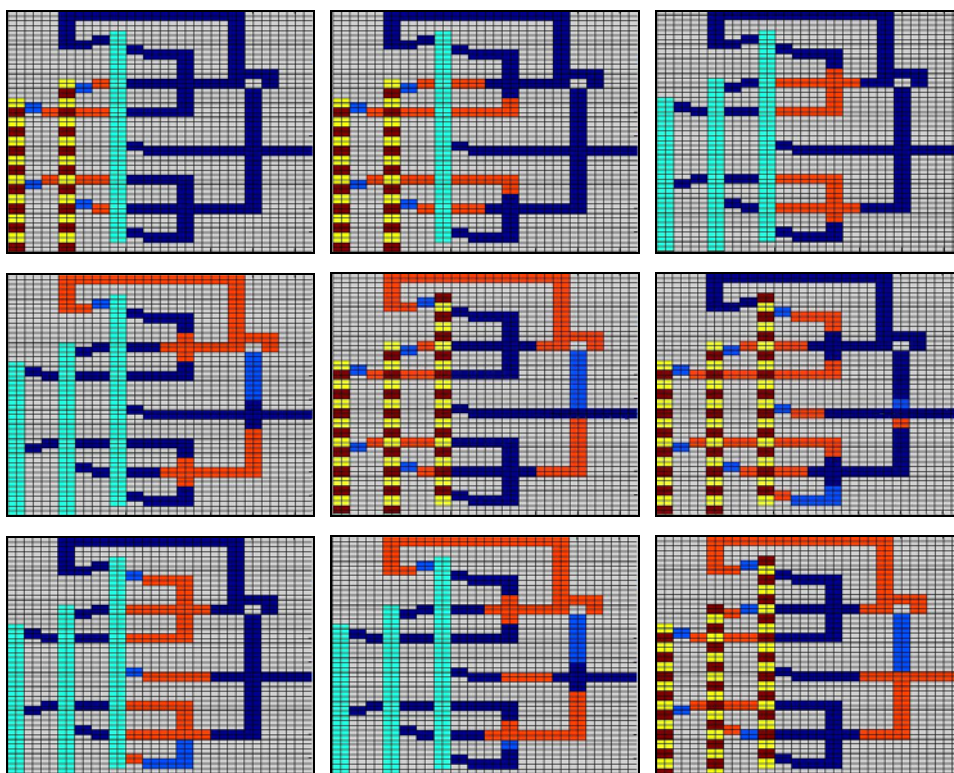
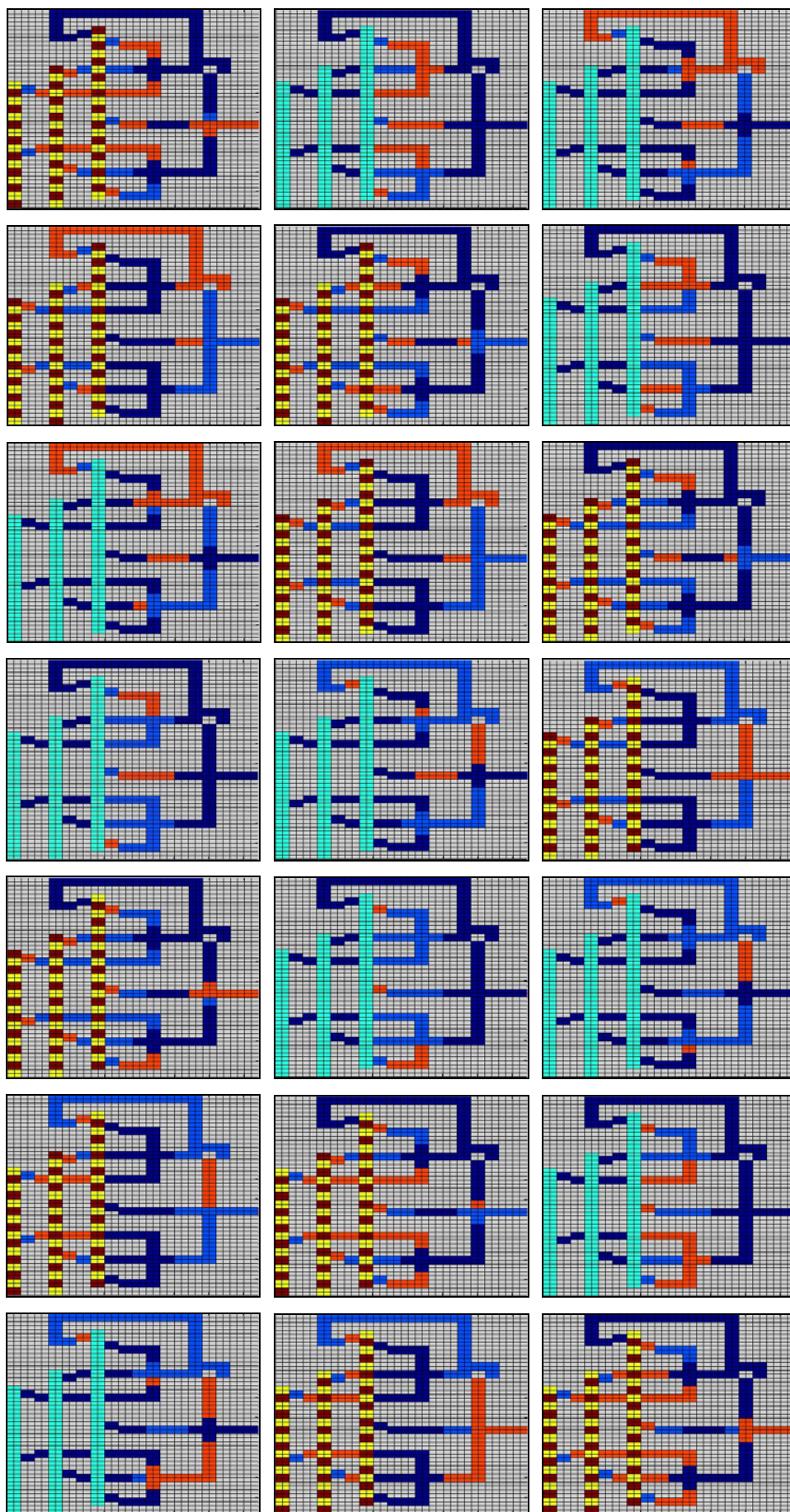


Figura 81- **Representação de um somador completo serial com duas entradas.**

O primeiro conjunto de entradas, binários 0 e 0, é utilizado para inicializar o circuito.





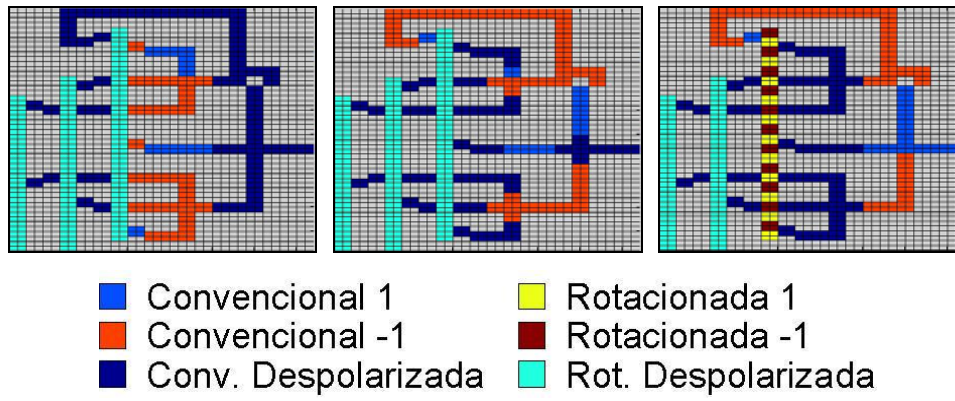


Figura 82– **Simulação passo a passo de um somador completo serial.**

Apêndice 3

Aqui serão apresentadas as simulações dos circuitos evoluídos.

Porta OU de 4 entradas

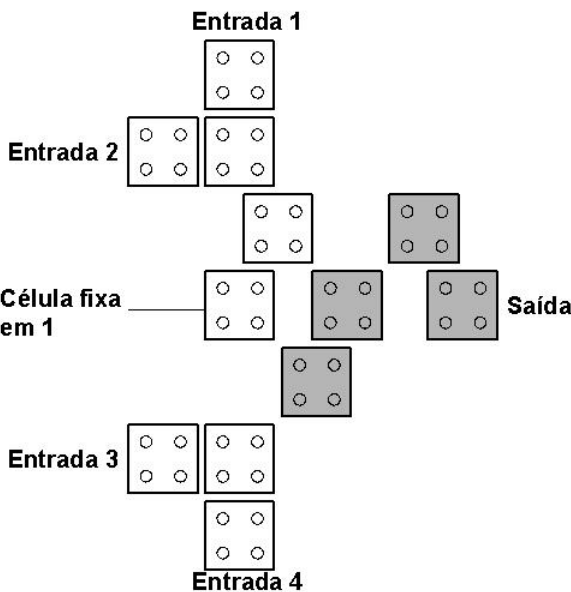
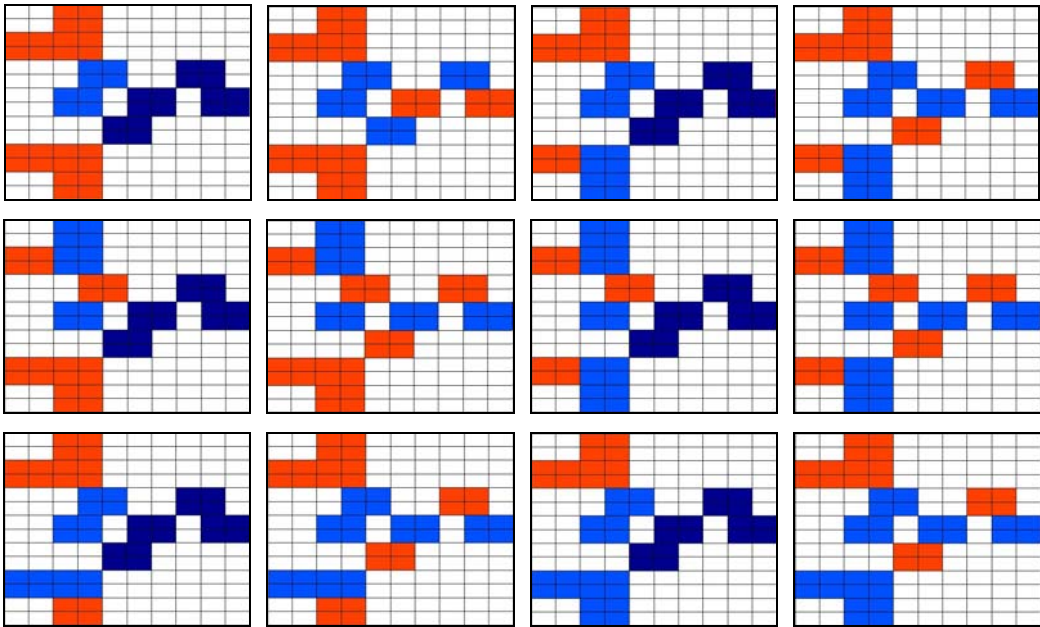


Figura 83– Melhor circuito OU de quarto entradas evoluído pelo AG.



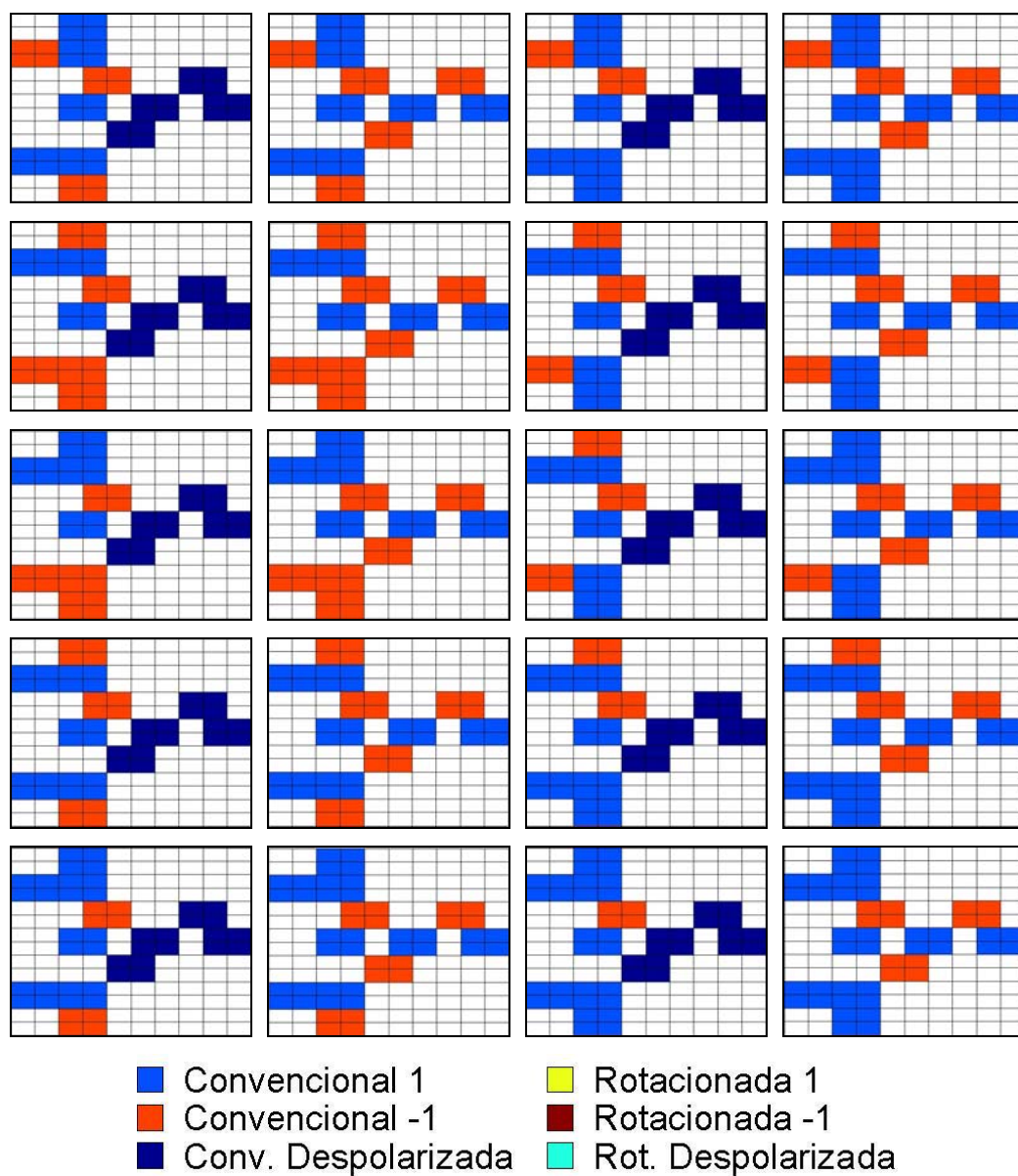


Figura 84— Simulações da porta OU sintetizada.

Multiplexador

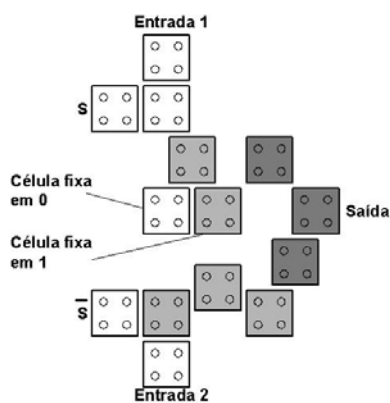


Figura 85— Melhor Multiplexador sintetizado.

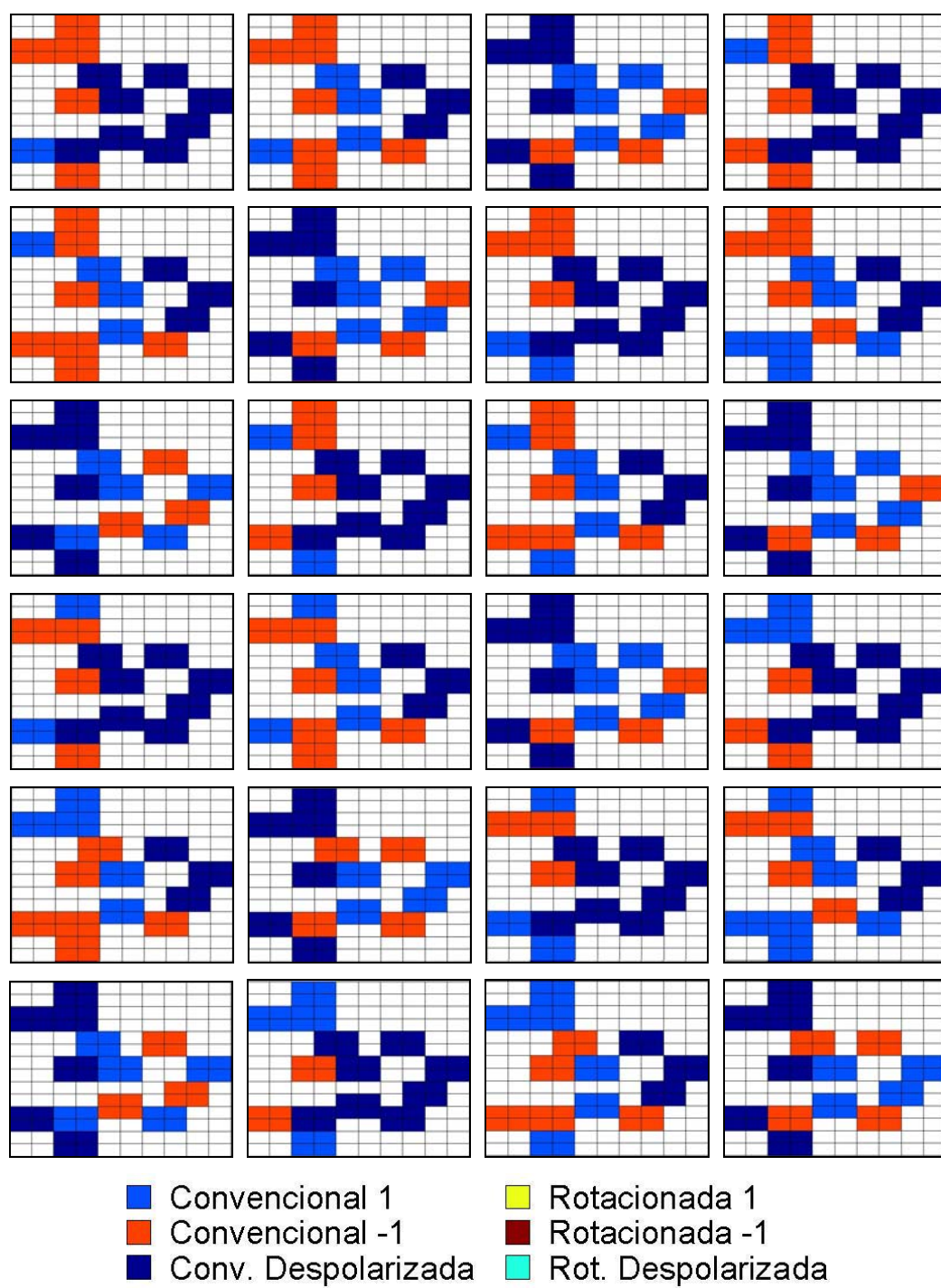


Figura 86— Simulações do Multiplexador sintetizado.

OU Exclusivo

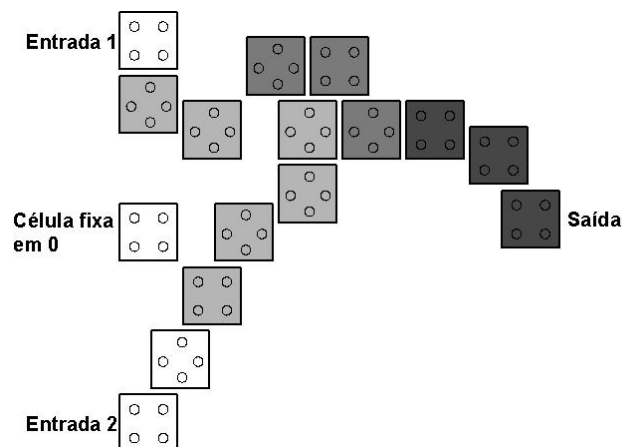


Figura 87– Topologia do melhor Ou-exclusivo encontrado pelo AG. Os tons de cinza representam as zonas de *clock*.

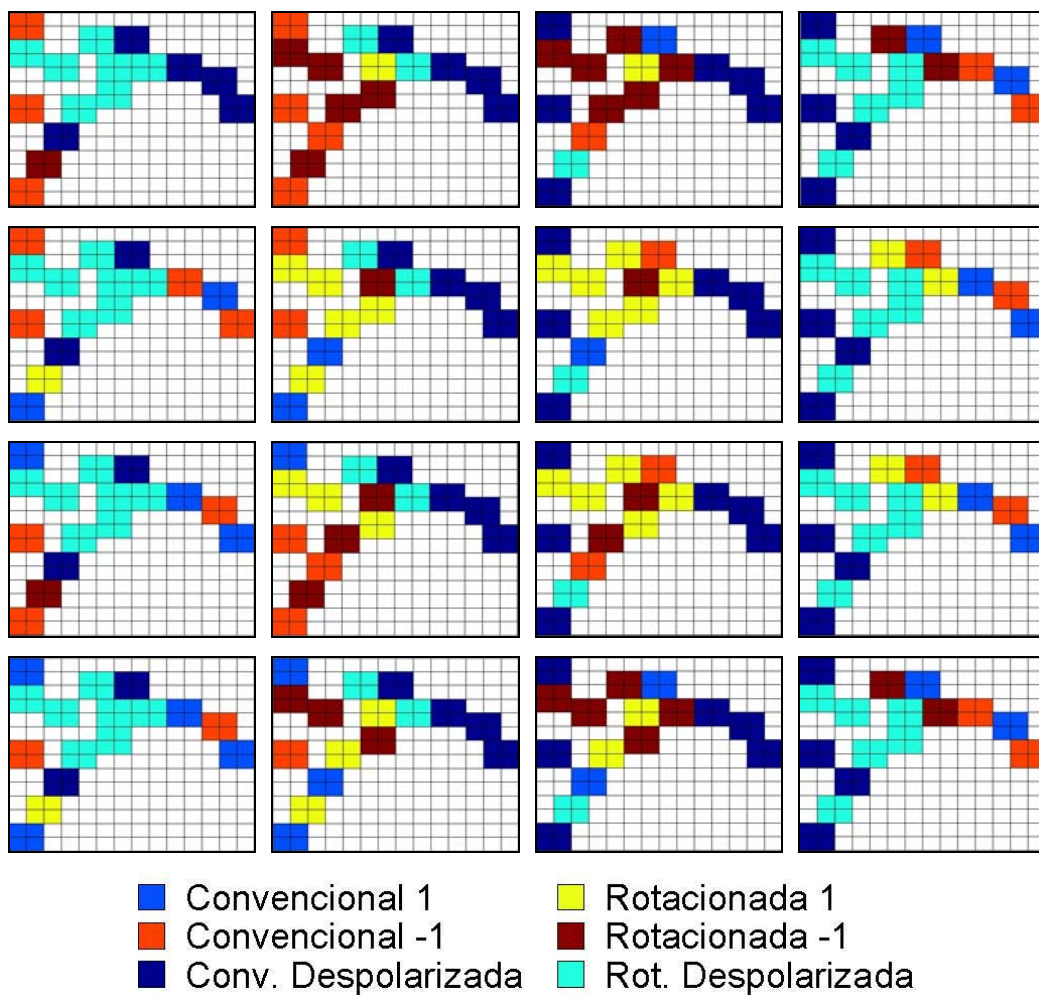


Figura 88– Simulações da porta OU-Exclusivo sintetizada.

Somador Completo – Alternativa 1

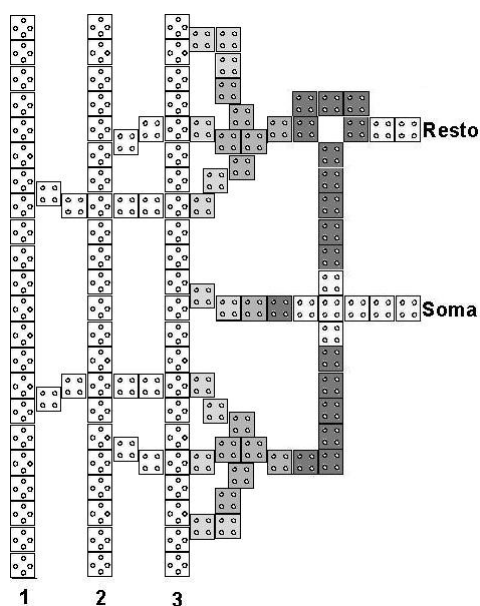
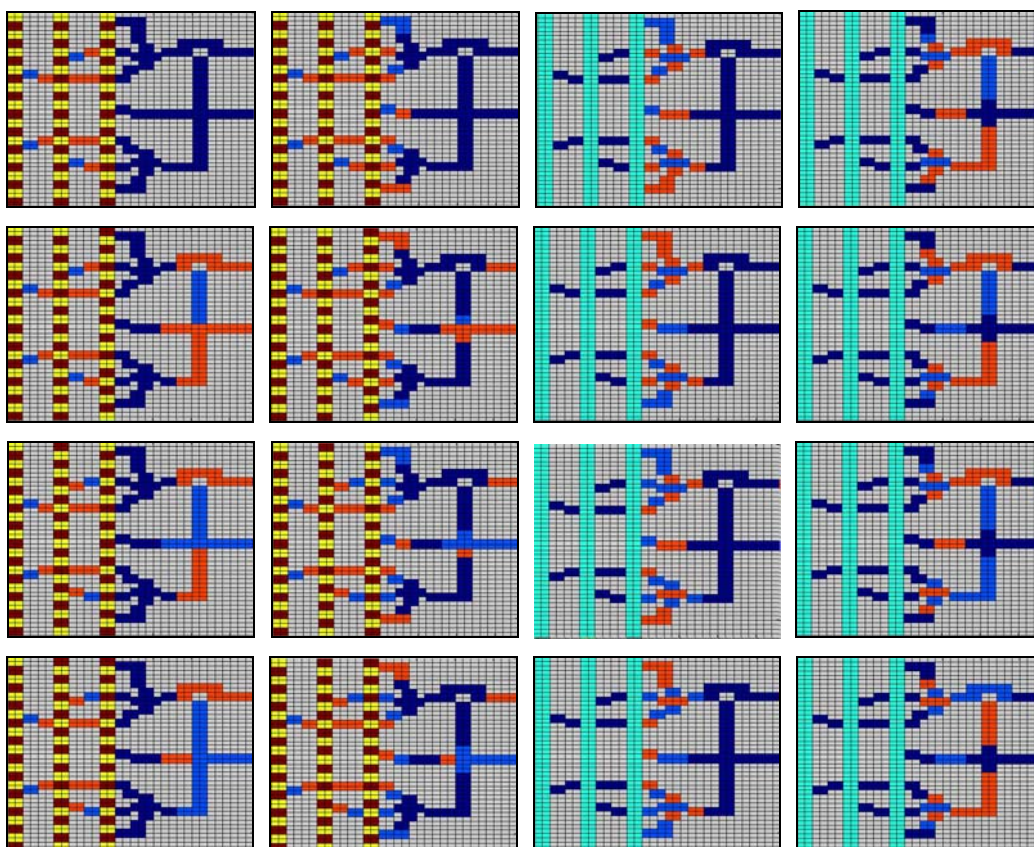


Figura 89– Topologia do novo circuito do somador completo.



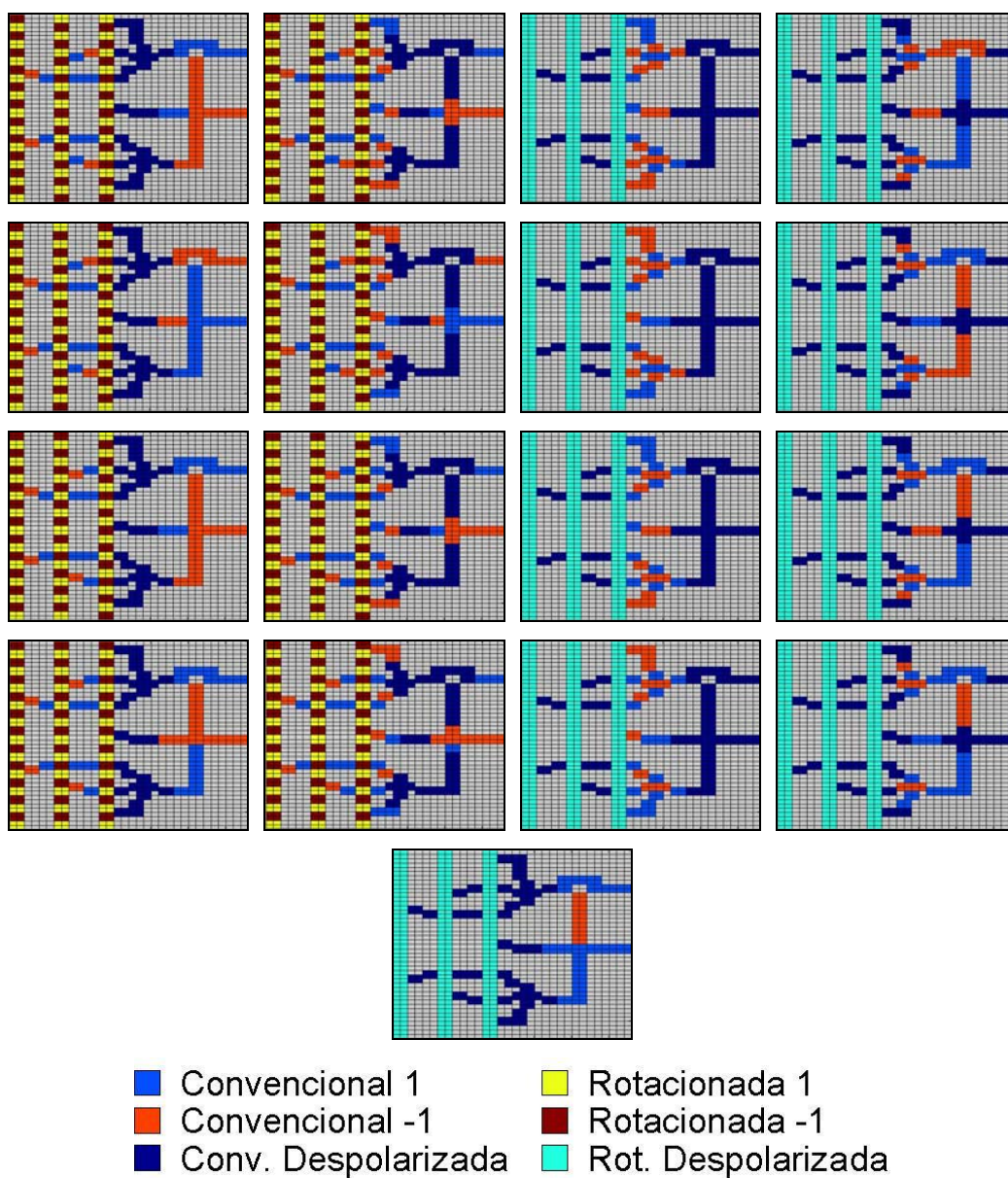


Figura 90– Simulações do Somador completo 1 sintetizado.

Somador Completo – Alternativa 2

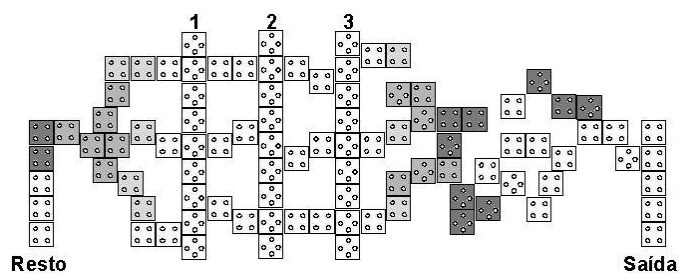
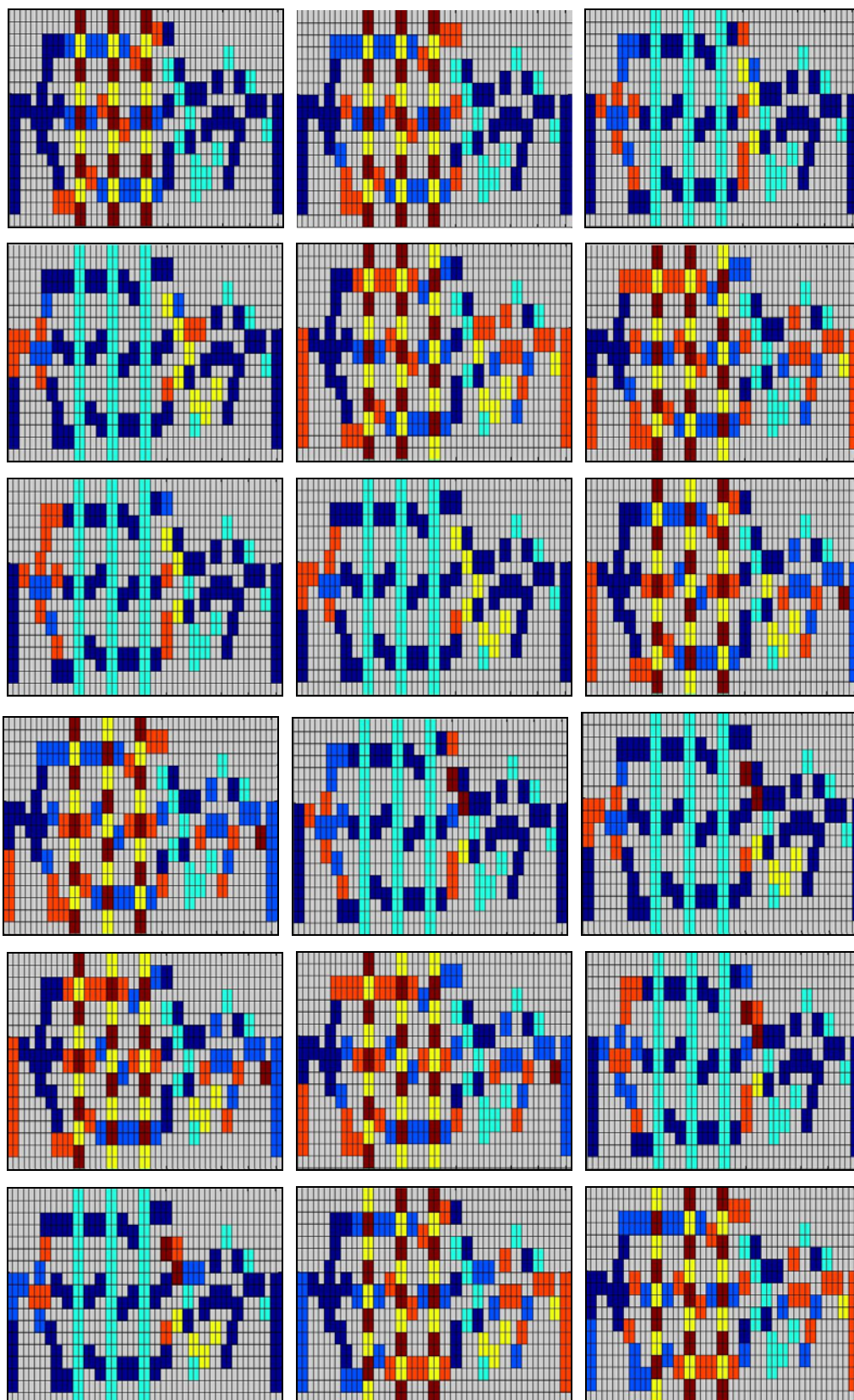


Figura 91– Topologia do novo circuito do somador completo – alternativa 2.



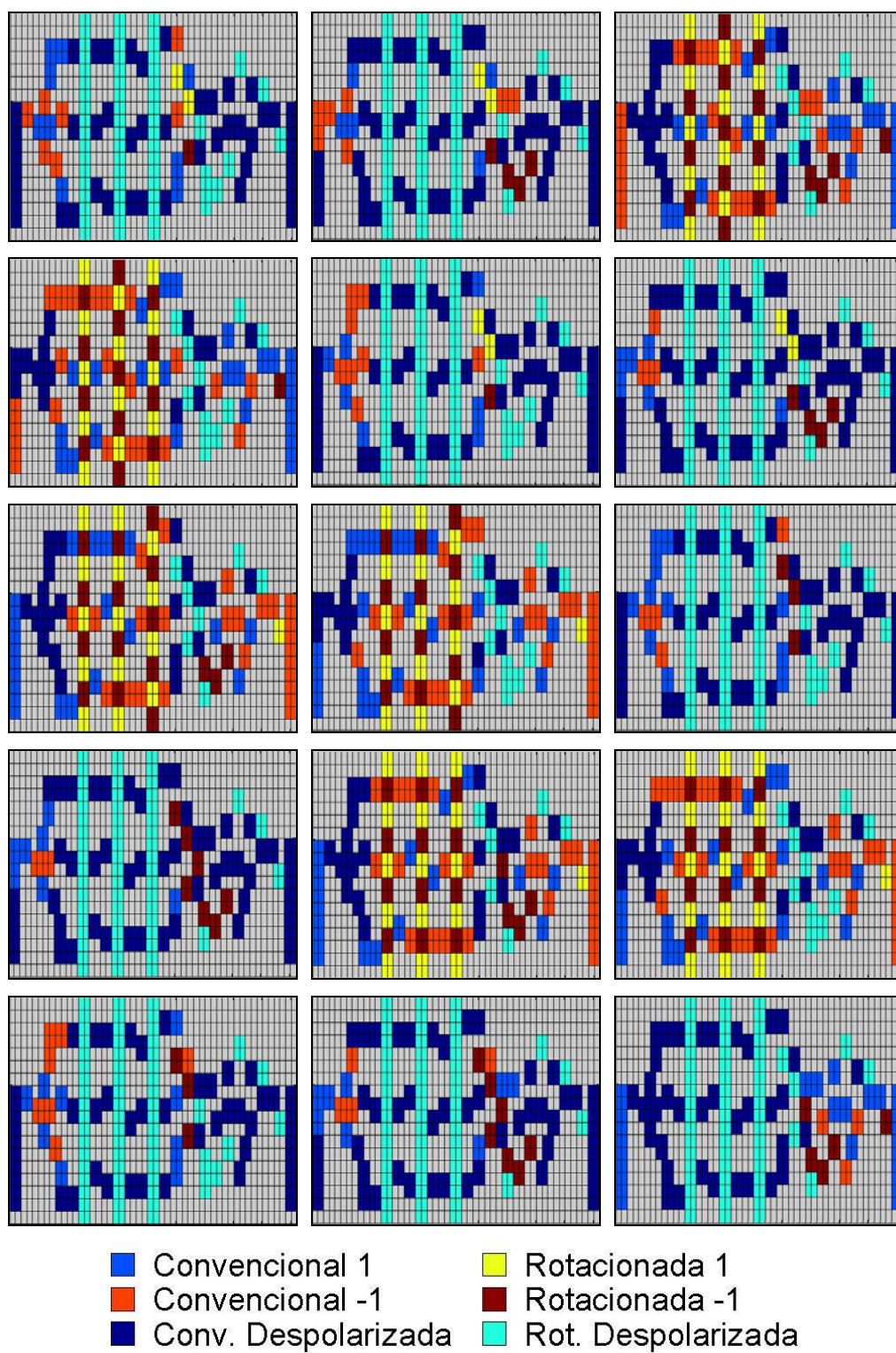


Figura 92– Simulações do Somador completo 1 sintetizado.