



**Universidade:  
presente!**

**UFRGS**  
PROPEAQ



**XXXI SIC**

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2019
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Estudo do mecanismo de síntese de nanopartículas de sulfetos de cobre e antimônio
<b>Autor</b>	MATHEUS AVENCOURT SOARES
<b>Orientador</b>	MARCOS JOSE LEITE SANTOS

## **Estudo do mecanismo de síntese de nanopartículas de sulfetos de cobre e antimônio usando *Machine Learning***

Nanopartículas de semicondutores tem sido o foco de diversos estudos, a maioria deles buscando desenvolver materiais com propriedades ópticas, eletroquímicas e catalíticas específicas. Para obter as propriedades desejadas, a síntese deve ser realizada de maneira controlada, uma vez que o tamanho, a estequiometria, fase cristalina e formato afetam as propriedades. Ao planejar uma síntese normalmente se varia temperatura, tempo, solvente, ligante e tamanho para adequar o tamanho, bandgap e a solubilidade desejada para a respectiva aplicação. Com base em estudos recentes mostrando as grandes vantagens de *Machine Learning* para selecionar uma grande quantidade de dados e prever respostas, o presente trabalho utiliza inteligência artificial para extrair de artigos condições e características de sínteses de nanopartículas. Através do conjunto de dados pesquisado, desenvolver um algoritmo que filtre e categorize as diferentes nanopartículas. Utilizando técnicas de aprendizado supervisionado, não supervisionado e árvores de decisões. Inicialmente, é importante a classificação dos diferentes tipos de síntese, para isso utiliza-se classificadores que analisam os atributos e formam clusters desses dados. Nesta etapa do projeto, optamos por um sistema binário (ZnSe e CdSe), um sistema ternário como o  $\text{Cu}_3\text{SbS}_4$  será estudado na próxima etapa. Utilizando dados de temperatura, tempo e tamanho de 15 artigos totalizando 18 sínteses de CdSe e 23 de ZnSe analisou-se com os algoritmos classificadores K-Means, k-nearest neighbors e Naive Bayes. Sendo último algoritmo apresentando 86% de acerto na diferenciação das sínteses de CdSe e ZnSe. A fim de aperfeiçoar a classificação, além de aumentar a base de dados estuda-se levar em consideração a concentração, a proporção molar entre os precursores, a espécie ligante e o solvente.