

## Chapter 5

# Dos Átomos aos Computadores

Uma multidão lotava o Grande Auditório para assistir a inicialização do novo computador ‘Ultrônico’. Presidente Pollo terminara seu discurso. Estava bastante satisfeito: não se importava muito com essas ocasiões, e sequer entendia de computadores, mas sabia que este em particular iria lhe economizar um bocado de tempo. Os fabricantes asseguraram-lhe que dentre as tarefas que Ultrônico seria capaz de realizar, ele poderia tomar aquelas difíceis decisões de Estado que o deixavam tão aborrecido.

Adam sentia-se privilegiado por estar na cerimônia. Sentou-se na terceira fila. Duas filas à sua frente estavam sua mãe e o tecnocrata-chefe responsável pelo projeto de Ultrônico. Seu pai, como sempre, também estava lá - sem convite, atrás no salão, e cercado de guardas. No último minuto tentara explodir o computador. Esta tarefa havia lhe sido atribuída como iniciação em uma facção de um pequeno grupo de ativistas que se auto-intitulava: O Grande Conselho da Consciência

Psíquica. Ao tentar entrar na sala com explosivos, foi detectado por inúmeros sensores eletrônicos e químicos. Agora, como parte de sua punição era obrigado a assistir à cerimônia de inicialização de Ultrônico.

Adam não sentia muita afeição pelos pais. Sentimentos assim não lhe diziam respeito. Durante os treze anos de sua vida havia sido educado em meio a grande luxo material, quase que exclusivamente por computadores. Podia ter qualquer coisa que desejasse simplesmente apertando uma tecla: comida, bebida, companhia, diversão, e também educação, sempre que julgasse necessário.

Agora o Projetista Chefe estava terminando o seu discurso: "...possui mais de  $10^{17}$  unidades lógicas. É mais do que o número de neurônios em todos os cérebros do país! Sua inteligência será inimaginável. Mas, felizmente, não precisamos tentar imaginá-la. Todos teremos o privilégio de agora assistí-la ao vivo: eu convido a Primeira Dama, senhora Isabella Pollo, para ligar o nosso fantástico Computador Ultrônico!"

A esposa do Presidente aproximou-se. Um pouco nervosa e desajeitada, apertou a tecla 'on'. Fez-se um grande silêncio. Algumas luzes piscaram quase que imperceptivelmente quando as  $10^{17}$  unidades lógicas foram ativadas. Todos olhavam sem saber direito o que viria a seguir. "Alguém na platéia gostaria de iniciar o nosso Sistema Ultrônico fazendo a primeira pergunta?" perguntou o Projetista Chefe. Todos sentiam-se acanhados, e com medo de parecer estúpidos diante da platéia - e diante da Nova Onipresença. Havia silêncio. "Certamente haverá alguém", ele insistiu. Todos estavam amedrontados, como que diante de uma nova consciência toda poderosa. Com exceção de Adam. Ele havia crescido entre computadores, e sabia quase como um deveria

se sentir. Adam levantou a mão. “Ah, sim”, disse o Projetista Chefe. “O rapaz na terceira fila. Você tem uma pergunta para o nosso - ah - novo amigo?” (**The Emperor’s New Mind** - A Nova Mente do Imperador - R. Penrose, Vintage 1990)<sup>1</sup>

## 5.1 Objetos Macroscópicos

O leitor achará curioso olhar à sua volta e observar a diversidade de materiais que o cerca. No momento em que escrevo este texto reconheço as várias partes de plástico que formam o teclado do meu computador, o metal que forma a cabine, o vidro do monitor, e imagino os materiais que formam os fios, as resistências, capacitores, indutores, chips, e outros componentes dentro da cabine. Além disso, a mesa de madeira, a parede de tijolos, a cortina de tecido, etc. Nossa vida é absolutamente dependente da nossa capacidade de criar e manusear materiais, para adaptá-los às nossas necessidades. O plástico do teclado do meu computador, deve ter propriedades diferentes do plástico de um saco de lixo. Materiais possuem propriedades físicas distintas: alguns são condutores elétricos (como o cobre dos fios), outros são isolantes (como o plástico do teclado), alguns são magnéticos (como a agulha de uma bússola), uns são duros (como o diamante), outros maleáveis (como o chumbo), etc. Como esses materiais se formam e como eles adquirem essas propriedades? Este é um vasto campo de pesquisa, mas fundamentalmente as propriedades físicas de objetos macroscópicos refletem as *espécies atômicas* que formam o material, os *tipos de ligações*

---

<sup>1</sup>A surpreendente pergunta de Adam para o computador você ficará sabendo ao final do Capítulo.

*químicas* entre os átomos, e as *estruturas espaciais* nas quais os átomos e moléculas se arranjam para formar o material.

A parte da física que se ocupa do estudo dos materiais é chamada *Física da Matéria Condensada*. É preciso distinguir a abordagem dada pelos físicos de outras abordagens, como por exemplo, a do engenheiro. Este último está essencialmente interessado nos aspectos práticos e utilitários dos materiais. Se, por exemplo, um engenheiro mecânico precisa de uma peça de metal que seja boa condutora de eletricidade, e ao mesmo tempo má condutora de calor, para ser utilizada como parte de um motor, ele simplesmente pode ir a sua oficina e fazer alguns testes com vários metais, até encontrar o que precisa. O físico da matéria condensada está interessado em saber *como e porque* um determinado metal consegue conduzir mais calor ou eletricidade do que outro. Para isso ele procura descrever as propriedades de conduzir calor e eletricidade a partir da compreensão que possui das interações entre os átomos e os elétrons que formam o material. Ou seja, tenta explicar propriedades *macroscópicas* dos materiais a partir dos *modelos teóricos* criados para o mundo *microscópico*. Mas, como vimos nos últimos dois capítulos, o mundo microscópico é governado pelas leis da mecânica quântica. Portanto, para o físico da matéria condensada, a mecânica quântica é uma *ferramenta de trabalho* da qual ele se utiliza para descrever as propriedades físicas dos materiais. Aqui uma constatação notável: ao tentarmos “reconstruir” o mundo macroscópico a partir do microscópico utilizando as leis da mecânica quântica, é de se esperar que as propriedades físicas resultantes como, por exemplo, a de conduzir corrente elétrica, ou conduzir calor, de certa forma guardem

uma “memória quântica”. Por exemplo, podemos compreender porque ao aquecermos a ponta de um garfo, o calor chega até a outra ponta e queima a nossa mão, enquanto o mesmo não acontece com um pedaço de vidro, utilizando as leis da mecânica quântica!

Um tipo de material em particular é o responsável por uma revolução tecnológica que alterou as nossas vidas de maneira drástica e definitiva: os semicondutores. Estes são a “matéria prima” do “cérebro” de um computador.

## 5.2 Periodicidade na Natureza

As propriedades físicas dos materiais estão em grande parte relacionadas ao modo como os átomos que os compõem se organizam espacialmente. Podemos imaginar os átomos em um sólido ligados quimicamente entre si como se fossem pequenas bolas presas por hastes de arame, formando uma estrutura. O comprimento de cada haste representa a distância interatômica. Em certos tipos de materiais este arranjo espacial é aleatório. É como se cada haste tivesse um comprimento diferente da outra, e estivesse orientada de modo aleatório no espaço. Estes tipos de materiais são chamados de *amorfo*s. Um exemplo de material amorfo é o vidro comum (desses que usamos em janelas). Em outros tipos de materiais algo surpreendente acontece: os átomos se arranjam espacialmente de uma maneira absolutamente regular. Tais materiais são chamados de *cristalinos*. O diamante e os metais são exemplos de materiais cristalinos. Somente materiais sólidos apresentam cristalinidade; líquidos e gases são sempre amorfos. Todas as substâncias da

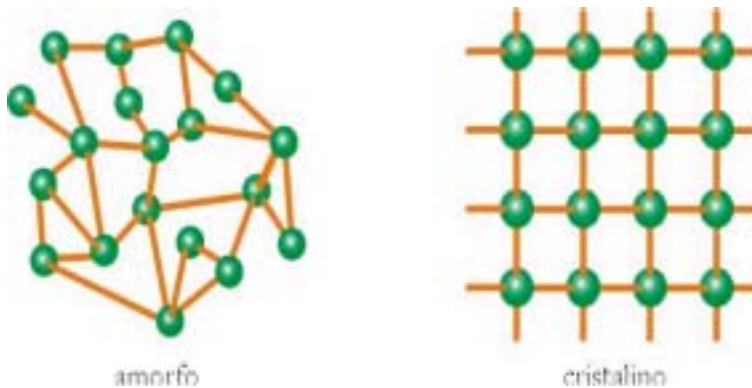
tabela periódica se solidificam com algum tipo de cristalinidade, e para cerca de 2/3 dos elementos, o material formado é um metal. Não é de surpreender a importância dos metais para a nossas vidas!

Chamamos de *rede cristalina* esta estrutura espacial regular de átomos. A regularidade é responsável por várias propriedades importantes dos sólidos. Imagine uma rede cristalina como uma repetição de uma estrutura básica contendo alguns íons presos a ela, por todo o espaço. Por exemplo, imagine um cubo de aresta  $a$  onde em cada vértice existe um íon preso. A rede cristalina consiste na repetição do cubo por todo o espaço. Se colocarmos a origem de um sistema de coordenadas sobre um átomo na base do cubo, os átomos nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  podem ser localizados pelos vetores  $a\mathbf{i}$ ,  $a\mathbf{j}$  e  $a\mathbf{k}$ . Se tivéssemos um paralelepípedo com arestas  $a$ ,  $b$  e  $c$ , ao invés de um cubo, teríamos  $a\mathbf{i}$ ,  $b\mathbf{j}$  e  $c\mathbf{k}$ . Chamamos esses vetores de *vetores de base*, e de uma maneira geral os representamos por  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  e  $\mathbf{a}_3$ . Qualquer átomo (ou íon) em uma rede cristalina pode ser localizado a partir de um certo número inteiro desses vetores de base. Representamos por  $\mathbf{R}$  a posição genérica de um íon em uma rede cristalina:

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$$

onde  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_3$  são números inteiros. Por exemplo, em uma rede qualquer, o íon da origem possui  $(n_1, n_2, n_3) = (0, 0, 0)$ ; o íon na posição adjacente sobre o eixo  $x$  possui  $(n_1, n_2, n_3) = (1, 0, 0)$ . O que se encontra sobre o eixo  $z$  a dez cubos acima da origem possui  $(n_1, n_2, n_3) = (0, 0, 10)$ ; o primeiro íon sobre a diagonal do cubo terá  $(n_1, n_2, n_3) = (1, 1, 1)$ , e assim por diante.

A distância de um dado átomo até a origem é dada pelo módulo do vetor<sup>2</sup>  $\mathbf{R}$ :  $|\mathbf{R}| = R = \sqrt{n_1^2|\mathbf{a}_1|^2 + n_2^2|\mathbf{a}_2|^2 + n_3^2|\mathbf{a}_3|^2}$ . Os módulos dos vetores de base variam de alguns angstroms a algumas dezenas de angstroms, dependendo do cristal, mas tipicamente estes valores estão entre 5 e 15 angstroms. Então, em um cristal cúbico, para o qual  $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = |\mathbf{a}_3| = 8,5\text{Å}$ , o átomo em  $(n_1, n_2, n_3) = (2, 5, -7)$  (ou seja, com vetor posição  $\mathbf{R} = 2\mathbf{i} + 5\mathbf{j} - 7\mathbf{k}$ ) dista da origem de  $R = \sqrt{4 + 25 + 49} \times 8,5 \approx 75,1\text{Å}$ .

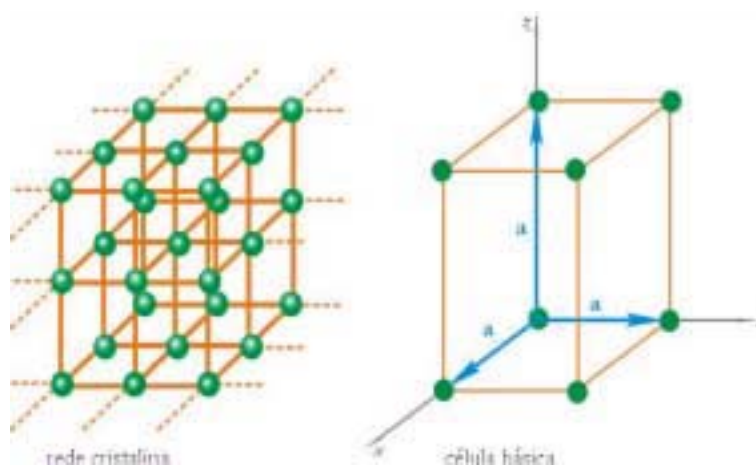


Um material cristalino contrasta com um amorfo por apresentar regularidade espacial no arranjo de seus átomos.

Agora vamos discutir um pouco a idéia que temos sobre os metais. A característica mais marcante de um metal é a sua capacidade de conduzir corrente elétrica. Todos os fios que passam por dentro das paredes das nossas casas, e que são ligados a lâmpadas, tomadas, eletrodomésticos,

<sup>2</sup>Supõe-se um sistema de coordenadas triortogonal.

etc. são feitos de algum tipo de metal. Além disso, metais são maleáveis, o que os torna apropriados à moldagem, como por exemplo em um parafuso, um alicate, uma panela ou até mesmo em uma escultura. Se elevarmos sua temperatura acima de um valor crítico, metais podem ser fundidos, ou seja, tornam-se líquidos. Colocados em um molde e resfriados, adquirem a forma do molde. Ao retornar ao estado sólido, o metal continua com as mesmas características físicas que tinha antes da fusão. Estes são exemplos de propriedades macroscópicas dos metais que os tornam úteis à nossa vida. Mas, como compreender estas propriedades de um ponto de vista microscópico? Ou seja, como as leis da mecânica quântica conferem aos metais suas propriedades? A resposta está em parte relacionada à periodicidade espacial dos átomos na rede, e em parte ao princípio de exclusão de Pauli.



Uma rede cristalina tridimensional é construída a partir da repetição de uma célula básica no espaço.

### 5.3 Porque a Lata Difere do Diamante?

No capítulo anterior falamos brevemente da ligação metálica; dissemos que os elétrons de um metal se deslocam livremente entre os íons. São os íons que formam a estrutura cristalina. Ou seja: em um metal os íons podem ser considerados em posições fixas e regulares, formando a rede cristalina, enquanto que os elétrons se movem livremente entre eles. Tudo se passa como se os elétrons formassem um gás cujas partículas se movessem entre os íons, ocasionalmente se chocando com eles. De fato, esta imagem do gás é muito utilizada para compreendermos certas propriedades dos metais. Contudo, devemos lembrar que trata-se aqui de um gás especial: um gás de elétrons (lembre que estes elétrons ocupavam as camadas mais externas dos átomos antes deles constituírem o metal). Mas, como vimos, elétrons são partículas com spin semi-inteiro,  $S = 1/2$ , e por isso são chamados de férmions. Nos referimos então aos elétrons nos metais como formando um *gás de Fermi*. Outra coisa a ser lembrada do capítulo anterior é que nem todos os elétrons dos átomos que formam metais se tornam “livres” para compor este gás. De fato, a grande maioria permanece preso aos próprios átomos de origem, e só aqueles das camadas mais externas conseguem se libertar.

São os elétrons do gás de Fermi os responsáveis pela corrente elétrica nos metais. Como eles são livres para se deslocar, ao aplicarmos um campo elétrico a um pedaço de metal (por exemplo ligando um pedaço de fio de cobre aos terminais de uma bateria), os elétrons do gás ficam sujeitos a uma força elétrica  $F = -eE$ , e se deslocam na direção do campo. O que evita o aumento indefinido da corrente são precisamente

as colisões entre os elétrons e os íons. Deste ponto de vista, a única diferença entre um metal como o alumínio de um garfo, e um isolante como o diamante, é a existência de um gás de Fermi no primeiro. Mas só com isso ainda não podemos compreender porque em alguns casos os elétrons mais externos dos átomos se libertarão para formar o gás, e em outros não. Ou seja, o que determina, em última instância, se um material é condutor ou isolante? Com a palavra, Sua Exa., a Mecânica Quântica.

## 5.4 Autoestados em uma Caixa Periódica

A idéia mais simples que podemos ter a respeito de elétrons em um metal, é a de uma caixa cúbica contendo um número muito grande de partículas carregadas, que podem se mover livremente.

Vimos no capítulo três que a energia de um elétron que se desloca livremente pelo espaço é dada por:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

onde  $k = p/\hbar$  é o módulo do vetor de onda do elétron, e pode ter qualquer valor. Temos agora que considerar o que acontece com essas energias quando o elétron se desloca dentro de um material cristalino, ao invés de livremente. Vimos que a rede cristalina é constituída por várias “caixinhas” que se justapõem preenchendo o espaço. Então, um bom ponto de partida para resolver o nosso problema é estudar o que ocorre com um elétron dentro de uma caixa. Como veremos abaixo, a caixa limita o movimento do elétron, e isso altera os valores de energia que ele pode adquirir.

Imagine uma caixa cúbica com aresta  $L$  e com volume  $V = L^3$ . Como dentro da caixa o elétron está livre, a função de onda associada a cada estado eletrônico  $\mathbf{k}$  dentro dela será:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

ou, em termos das componentes cartesianas de  $\mathbf{r}$  e  $\mathbf{k}$ :

$$\psi_{\mathbf{k}}(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_x x + ik_y y + ik_z z} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z}$$

Note que a probabilidade por unidade de volume de encontrarmos um elétron em qualquer posição dentro da caixa é constante (ou seja, independe de  $x$  e  $k$ ) e igual a

$$|\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \times \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{V}$$

Agora devemos nos perguntar o que acontece com um elétron que chega perto de uma das faces do cubo, ou seja, em  $x = L$ ,  $y = L$  ou  $z = L$ . É intuitivo pensarmos que, como temos *certeza* que o elétron está dentro do volume  $V$ , a sua função de onda deve se anular para esses valores de  $x$ ,  $y$  e  $z$ . Caso contrário estaríamos afirmando que o elétron poderia ser encontrado do lado de fora da caixa! Consequentemente, devemos impor a condição de que a função de onda se anule nessas posições, ou seja:

$$\psi_{\mathbf{k}}(L, y, z) = \psi_{\mathbf{k}}(x, L, z) = \psi_{\mathbf{k}}(x, y, L) = 0$$

Consequentemente:

$$e^{ik_x L} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = e^{ik_x x} e^{ik_y L} e^{ik_z z} = e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z L} = 0$$

Cada uma dessas três condições se aplica independentemente das outras duas. Tomemos, por exemplo, a condição  $e^{ik_x L} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = 0$ . Como  $k_y, k_z$  e  $y, z$  são arbitrários, a condição acima implica em

$$e^{ik_x L} = \cos(k_x L) + i \operatorname{sen}(k_x L) = 0$$

Para que esta equação seja satisfeita, é preciso que os termos do lado direito da primeira igualdade se anulem individualmente. Acontece que não existe nenhum valor do argumento  $k_x L$  tal que isto ocorra! Se tivéssemos somente a parte real ou somente a imaginária desta equação, a condição imposta seria respectivamente satisfeita para  $k_x L = n_x \pi/2$  ou  $k_x L = n_x \pi$ , onde  $n_x$  é ímpar no primeiro caso, e qualquer inteiro no segundo. Podemos repetir o argumento para as componentes  $y$  e  $z$  de  $\psi$ . Então, neste caso, a condição que impusemos sobre a função de onda obriga que ela seja uma função senoidal (ou cossenoidal) simples:

$$\psi_k(x, y, z) = A \operatorname{sen}(k_x x) \operatorname{sen}(k_y y) \operatorname{sen}(k_z z)$$

onde  $A$  é uma constante. A função acima se anula nas paredes da caixa, sob as condições de que  $k_x L, k_y L$  e  $k_z L$  sejam iguais a múltiplos inteiros de  $\pi$ . Esta função portanto descreve apropriadamente um elétron preso dentro de uma caixa. Note que agora a distribuição de probabilidades não é mais uniforme, mas dada por:

$$|\psi_k(x, y, z)|^2 = A^2 \operatorname{sen}^2(k_x x) \operatorname{sen}^2(k_y y) \operatorname{sen}^2(k_z z)$$

Esta imposição feita sobre a função de onda leva às seguintes condições sobre as componentes do vetor de onda:

$$k_x = \frac{\pi}{L}n_x, \quad k_y = \frac{\pi}{L}n_y, \quad k_z = \frac{\pi}{L}n_z$$

onde  $n_x, n_y, n_z$  são números inteiros<sup>3</sup> Ou seja, tal imposição leva a uma *quantização* das componentes do vetor de onda  $\mathbf{k}$ :

$$\mathbf{k} = \frac{\pi}{L}(n_x\mathbf{i} + n_y\mathbf{j} + n_z\mathbf{k})$$

(não confunda o vetor de onda  $\mathbf{k}$  do lado esquerdo como vetor unitário  $\mathbf{k}$  da direção  $z$  do lado direito. A situação de escassez é tão grave que está começando a faltar até letra!). Conseqüentemente, as energias possíveis dentro da caixa também se tornam quantizadas:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Este é o efeito geral de prendermos um elétron dentro de uma caixa: tornarmos quantizados os seus níveis de energia, que caso contrário formariam um espectro contínuo.

Por exemplo, para  $n_x = n_y = 0$ , e  $n_z = 1$ :

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$

Se, por outro lado,  $n_x = n_y = n_z = 1$  a energia do elétron será:

$$E = 3 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$

e assim por diante.  $n_x, n_y$  e  $n_z$  são números quânticos que caracterizam os estados eletrônicos dentro da caixa.

---

<sup>3</sup>Note que desta forma teremos  $k_x x = x n_x \pi / L$ . Ou seja, quando  $x = L$ ,  $k_x x = n_x \pi$  e a função de onda se anula. O mesmo ocorre para as outras componentes.

Uma outra maneira de abordar o problema é ao invés de modificarmos a função de onda, mantermos a sua forma exponencial, e modificarmos as condições impostas sobre ela nas paredes da caixa. É neste ponto onde o problema do elétron em uma caixa evolui para o problema de um elétron em um cristal. Poderíamos imaginar o cristal como vários cubos, cada qual com volume  $V$ , justapostos, de maneira que quando um elétron chegar em uma das faces, ele simplesmente “entra” no cubo vizinho. Como todos os cubos são idênticos, posições equivalentes em cubos diferentes terão associadas os mesmos valores da função de onda<sup>4</sup>. Ou seja, a função de onda se tornará uma função periódica espacialmente, com período igual ao comprimento  $L$ . Tal periodicidade é expressa matematicamente por:

$$\psi_k(x, y, z) = \psi_k(x + L, y, z)$$

$$\psi_k(x, y, z) = \psi_k(x, y + L, z)$$

$$\psi_k(x, y, z) = \psi_k(x, y, z + L)$$

Estas condições podem parecer menos intuitivas que as anteriores, mas elas são mais convenientes, pois com elas a forma de exponencial complexa da função de onda pode ser mantida. Como veremos abaixo, isso não modifica substancialmente os estados de energia dentro da caixa. Às vezes em física temos que deixar de lado a intuição em benefício das conveniências matemáticas! Substituindo a primeira condição acima na forma exponencial da função de onda, obtemos:

---

<sup>4</sup>Mais precisamente, é o módulo quadrado de  $\psi$  que se repetirá dentro do cristal. Suponha, hipoteticamente, que tenhamos  $L = 10\text{Å}$ , e que  $|\psi(x = 3\text{Å}, y = 0, z = 0)|^2 = 0,01$ . Como os cubos são equivalentes, deveremos ter  $|\psi(x = 3, y = 0, z = 0)|^2 = |\psi(x = 13, y = 0, z = 0)|^2 = |\psi(x = 23, y = 0, z = 0)|^2 = 0,01$ , etc.

$$e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = e^{ik_x L} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} \Rightarrow e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} (e^{ik_x L} - 1) = 0$$

que leva a:

$$e^{ik_x L} = 1$$

Esta condição é satisfeita para<sup>5</sup>  $k_x L = 2n_x \pi$  ou  $k_x = 2n_x \pi / L$  com  $n_x$  um inteiro. Chegamos então a um resultado semelhante ao anterior, somente mudando as condições sobre as funções de onda. Repetindo o procedimento para as outras componentes obtemos  $k_y = 2n_y \pi / L$  e  $k_z = 2n_z \pi / L$ . Note que a única diferença entre os dois casos é o fator ‘2’ multiplicativo. As energias nesse caso se tornam:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{2\hbar^2 \pi^2}{mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

É importante lembrar que *ambas* funções de onda representam elétrons livres em uma caixa. No entanto, a função exponencial complexa descreve uma distribuição de probabilidades uniforme, enquanto que a função senoidal não. Em se tratando de elétrons em cristais é preferível trabalhar com a forma exponencial. Mas, o importante no momento não é a forma da função de onda, e sim os valores possíveis para as energias dos elétrons dentro da caixa. Definindo a quantidade  $\epsilon = 2\hbar^2 \pi^2 / mL^2$ , podemos escrever as energias acima sob a forma

$$E = \epsilon (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

---

<sup>5</sup>Note que agora não temos de escolher entre o seno ou o cosseno da função de onda.

Cada estado eletrônico continua sendo caracterizado por três números quânticos,  $n_x, n_y$  e  $n_z$ , e pode, de acordo com o princípio de exclusão, acomodar no máximo dois elétrons, com spins opostos. A título de exercício, vamos calcular a quantidade  $\epsilon$ . Substituindo o valor  $10\text{Å} = 10^{-9}$  m para  $L$ , obtemos:

$$\epsilon = \frac{2 \times 1,05^2 \times 10^{-68} \times 3,14^2}{9,11 \times 10^{-31} \times 10^{-18}} = 2,39 \times 10^{-19} \text{ J} = 1,5 \text{ eV}$$

Se o gás possui  $N$  elétrons, cada par ocupará um estado. Por exemplo, a energia mais baixa é dada por  $n_x = n_y = n_z = 0$ , que corresponde a  $E = 0$ . Neste estado podemos colocar 2 elétrons. O estado imediatamente acima corresponde a  $E = \epsilon$ . Para este valor de energia temos 6 possibilidades distintas:

$$(n_x, n_y, n_z) = (\pm 1, 0, 0); (0, \pm 1, 0); (0, 0, \pm 1)$$

Podemos acomodar então 12 elétrons com energia  $\epsilon$ . O próximo nível de energia é  $E = 2\epsilon$ , para o qual podemos ter

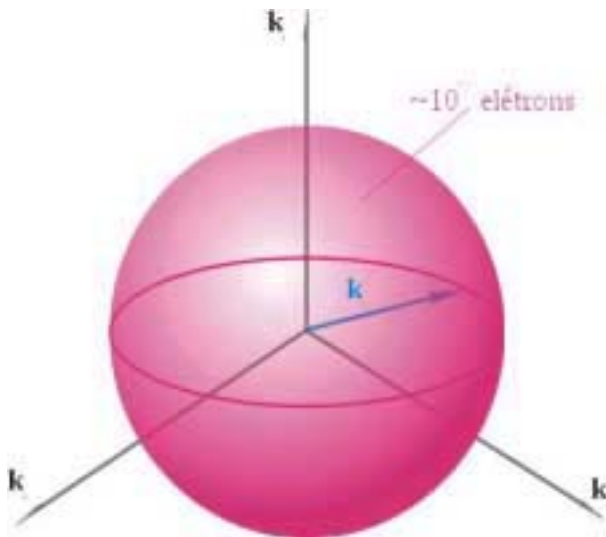
$$(n_x, n_y, n_z) = (\pm 1, \pm 1, 0); (\pm 1, 0, \pm 1); (0, \pm 1, \pm 1)$$

num total de 12 estados onde cabem 24 elétrons. E assim por diante, até chegarmos ao último dos  $N$  elétrons do gás. Note a semelhança entre este problema e aquele do preenchimento dos níveis de energia do átomo: lá também tínhamos 3 números quânticos,  $n, l$  e  $m_l$ , e para cada um desses conjuntos poderíamos colocar até 2 elétrons. É como se a nossa caixa com volume  $V$  e  $N$  elétrons fosse um enorme átomo! O último elétron do gás ocupará o estado de maior energia possível, que obviamente terá a ele associado o maior valor possível de vetor

de onda. Este valor dependerá do número total de elétrons  $N$ . Se  $N = 2$ , somente o estado  $E = 0$  estará ocupado, e o vetor de onda associado será  $k_{max} = 0$ ; se  $N = 4$ , a maior energia será  $E = \epsilon$ , e o respectivo vetor de onda  $k_{max} = \sqrt{2m\epsilon}/\hbar$ , e assim por diante. Para um gás de elétrons em um metal, o valor de  $N$  é monstruosamente grande, algo da ordem de  $10^{23}$ . O valor da energia mais alta possui um nome especial (e pouco imaginativo!): *energia de Fermi*, representada por  $E_F$ . Associada à energia de Fermi está o *vetor de onda de Fermi*:  $k_F$ . A relação entre as duas quantidades é dada por:

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

Nos metais o valor de  $E_F$  varia entre 5 e 10 eV, e  $k_F$  é tipicamente da ordem de  $1,5 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$ .



A esfera de Fermi representa a configuração de menor energia de um número muito grande de elétrons que não interagem entre si.

## 5.5 O Mundo é Quântico!

Na seção anterior vimos que os autoestados de um elétron dentro de uma caixa periódica são quantizados de zero até um valor máximo  $E_F$ . Note que esta é uma consequência somente da periodicidade da caixa e do princípio de exclusão. O que vamos considerar agora é o que acontece quando os íons são inseridos nestas caixas para formar a rede cristalina.

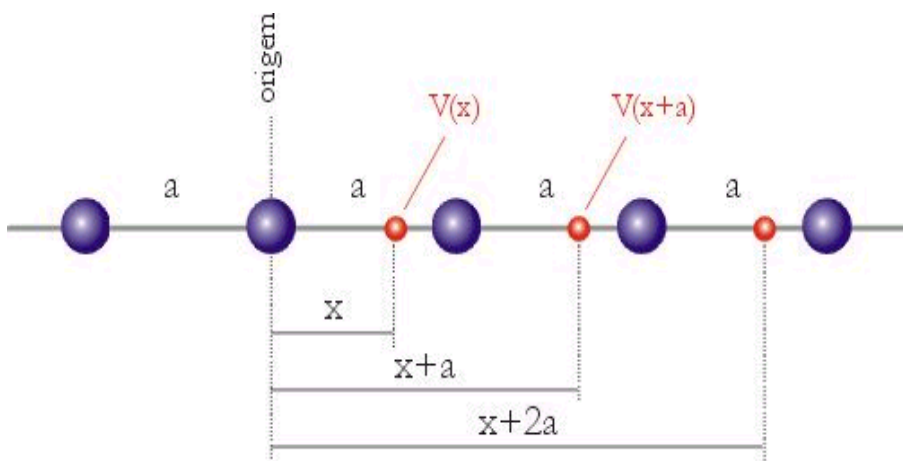
Imagine um elétron deslocando-se entre os íons positivos que formam a rede cristalina. Como o elétron possui carga negativa, ele sentirá a presença dos íons através da interação coulombiana. Chamamos esta ação dos íons da rede cristalina sobre os elétrons de *potencial cristalino*. Se só houvesse 1 único íon, a interação seria aquela que já vimos, proporcional ao produto das cargas e inversamente proporcional à distância. Mas o que temos agora não é um único íon, e sim um arranjo periódico de íons. Esta periodicidade se reflete no potencial cristalino, que também se torna uma função periódica da posição dos íons. Por exemplo, para simplificar vamos imaginar uma rede cristalina unidimensional ao longo do eixo  $x$ , com os íons separados por uma distância  $a$ . A posição de qualquer íon nesta rede especial será dada por  $\mathbf{R} = na\mathbf{i}$ , com  $n$  inteiro. O íon da origem corresponderá a  $n = 0$ , o primeiro íon à esquerda  $n = -1$ , o segundo da direita  $n = 2$ , e assim por diante. Considere então um elétron que se encontra em uma posição  $x$ , medida a partir da origem, por exemplo,  $x = a/3$ . Nesta posição o elétron “sente” um certo valor do potencial cristalino, devido a *todos* os íons da rede. Considere então um elétron e o desloque da posição  $x$  para a

posição  $x + a = 4a/3$ . Ora, exatamente devido à periodicidade da rede cristalina, o elétron não distinguirá essa nova posição da anterior. Isto quer dizer que o potencial cristalino que ele sente em  $x$  será idêntico ao que ele sentirá em  $x + a$ . Ou seja, o potencial será uma função periódica, cujo período é exatamente o espaçamento entre os íons. Se representarmos por  $V(x)$  a energia potencial do elétron na posição  $x$ , podemos expressar matematicamente esta periodicidade por:

$$V(x) = V(x + a)$$

Para um cristal real em três dimensões, substituímos  $x$  por  $\mathbf{r}$ , e  $a$  por  $\mathbf{R}$ ; o primeiro vetor é a posição do elétron no espaço, o segundo é a posição de um íon qualquer na rede. A expressão acima se torna neste caso:

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$



Potencial periódico em 1 dimensão. Ao se deslocar da posição  $x$  para  $x + a$ , um elétron perceberá exatamente a mesma vizinhança, e conseqüentemente o mesmo potencial.

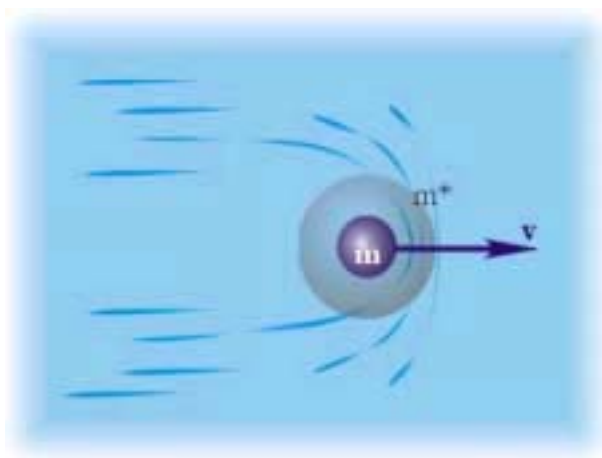
Esta propriedade de periodicidade do potencial é de suma importância para as propriedades físicas dos sólidos cristalinos. Note que sequer mencionamos a forma funcional de  $V$ , ou seja, como  $V$  varia com  $r$ , mas apenas que a função  $V(\mathbf{r})$  possui periodicidade espacial. Se o elétron fosse livre, seu espectro de energia seria contínuo, e ele poderia ter qualquer valor de energia, ou equivalentemente estar em qualquer estado  $k$ . Ao contrário, na caixa este espectro se torna quantizado, em unidades de uma quantidade mínima  $\epsilon$ . Ao considerarmos o potencial cristalino, como efeito geral da sua periodicidade, o espectro já quantizado pela caixa, é adicionalmente *desdobrado em regiões permitidas e regiões proibidas de energia*. Ou seja, o potencial faz com que algumas regiões do espectro de energia não existam mais. As regiões com estados de energias disponíveis são chamadas de *bandas de energia*, e as regiões proibidas de *hiatos* ou *lacunas* ('gaps', em inglês). Dentro de uma banda de energia os autoestados podem ainda ser escritos com uma forma semelhante à do elétron livre, apenas com um novo símbolo para a massa do elétron:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

onde agora, ao invés de  $m$ , utilizamos  $m^*$  para a massa do elétron. Esta quantidade é chamada de *massa efetiva*.

Vamos fazer uma pausa para discutirmos esta interessante idéia de massa efetiva. Para entendê-la vamos recorrer ao oscilador harmônico. Suponha que você queira medir a massa de um objeto observando suas oscilações quando preso a uma mola. Você prende o objeto na mola, cuja constante elástica  $k$  você conhece. Põe o sistema para oscilar, e

com a ajuda de um cronômetro mede o período de oscilação,  $\tau$ . A partir do período, você calcula a frequência angular  $\omega = 2\pi/\tau$ . Mas por outro lado você sabe que a frequência angular é dada por  $\omega = \sqrt{k/m}$ , e na medida em que  $k$  é conhecida, a massa pode ser obtida da relação  $m = k/\omega^2$ . O que aconteceria se a experiência fosse repetida dentro de um líquido, como por exemplo dentro de um tanque com água? Obviamente o período de oscilação mudaria, e conseqüentemente o valor medido da massa. Qual o significado desse novo valor de massa? De certa forma esse novo valor refletirá as propriedades do líquido; se colocarmos álcool ou óleo ao invés de água, o valor medido da massa mudará. Em última análise, o valor da massa medido desta maneira embute as *interações* do objeto que se move com o meio no qual ele está inserido. Dizemos então que medimos uma *massa efetiva*. A massa efetiva é a massa real do objeto, *revestida* das interações entre ele e o meio. É uma maneira de levarmos em conta interações cujos detalhes não conhecemos! Em física é assim: tratamos com pompa e detalhes matemáticos o que conhecemos; ao que não conhecemos associamos uma letra qualquer, damos um nome pomposo, e incluímos nos cálculos. É bárbaro! O mesmo ocorre com o elétron no metal. Como não conhecemos os detalhes das interações entre ele e os íons da rede, varremos tudo isso para debaixo do tapete, quer dizer, para dentro da massa do elétron, que passa então a ser chamada de massa efetiva. Os físicos adoram inventar nomes extravagantes para essas coisas (talvez para dar um tom de nobreza à carreira e compensar a baixa remuneração!): dizemos que a massa do elétron foi *renormalizada*.



O conceito de massa efetiva é uma maneira de levarmos em consideração as interações de um objeto se movendo em determinado meio. Os efeitos do meio sobre o movimento se refletem na massa “aparente” do objeto.

Resumindo: elétrons que se deslocam dentro de caixas periódicas possuem um espectro de energia quantizado. Quando íons positivos são colocados nessas caixas para formar a rede cristalina, eles geram sobre os elétrons um potencial eletrostático que possui a periodicidade da rede. O efeito deste potencial sobre os níveis de energias dos elétrons é dividir o espectro em bandas de energias, separadas por hiatos. Para um elétron em um nível de energia dentro de uma dessas bandas, o efeito da interação pode ser incorporado à sua massa, que então passa a ser chamada de massa efetiva.

Devemos agora considerar o que acontece se tivermos não somente um, mas  $N$  elétrons. Os estados de energia dentro das bandas deverão ser ocupados de acordo com o princípio de exclusão de Pauli. O resul-

tado dessa ocupação explica as diferenças entre materiais condutores e isolantes.

## 5.6 Metais, Isolantes e Semicondutores

Vimos que o efeito geral do potencial cristalino é criar bandas de energias intercaladas por hiatos. Dados  $N$  elétrons, preenchemos os níveis de energia do mais baixo para o mais alto. Para simplificar, vamos imaginar que temos somente duas bandas separadas por um hiato. Dado um número  $N$  de elétrons, como distribuí-los nos níveis de energia dentro de uma banda? Sabemos do princípio de exclusão que cada estado  $k$  pode acomodar no máximo dois elétrons. Podemos então dividir o problema em 3 situações possíveis: (i)  $N/2$  é menor que o número de estados disponíveis na banda de energia mais baixa; (ii)  $N/2$  é maior que o número de estados de energia disponíveis na banda mais baixa, e (iii)  $N/2$  é exatamente igual ao número de estados disponíveis na banda mais baixa.

Como estamos interessados em descrever a corrente elétrica nos materiais, devemos considerar o que ocorre em cada um dos casos acima quando um campo elétrico é aplicado. A aplicação do campo resulta em um acréscimo de energia para cada elétron. Este acréscimo de energia, por sua vez, implica em cada elétron mudar de seu estado, inicialmente caracterizado por  $k$ , para outro caracterizado por  $k' > k$ . No caso (i) como os  $N$  elétrons não chegam a preencher todos os níveis da banda mais baixa, não há problema. Os elétrons mais energéticos, com  $k = k_F$  passam para os estados vazios imediatamente acima e deixam

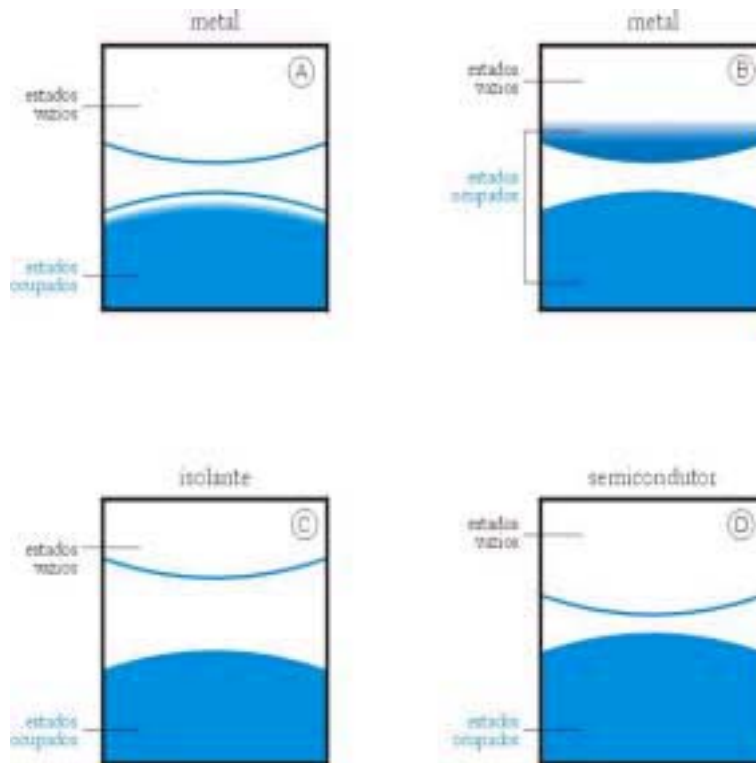
vagos seus estados anteriores para serem ocupados pelos elétrons imediatamente abaixo, e assim por diante até o estado com  $k = 0$ . Esta é a situação de um metal simples como o lítio ou o sódio. O que acontece no caso (ii)? Também não há problema. Como o número de elétrons ultrapassa os estados de energia disponíveis na banda inferior, ao completá-la, simplesmente “pulamos” sobre o hiato e continuamos preenchendo os estados na banda superior com o restante dos elétrons. Para os elétrons da banda superior tudo se passa como no caso (i). Mas, e para os elétrons que preencheram completamente a banda inferior? Ao sentirem o campo elétrico eles tentam se mover, mas como a banda está completa, não existirão estados disponíveis que eles possam ocupar. Consequentemente esses elétrons simplesmente não se movem! A condutividade elétrica neste caso é realizada apenas pelos elétrons que estão na banda superior. Este também é um caso metálico, um pouco mais complexo que o caso (i). Não é difícil imaginar o que ocorre no caso (iii) onde o número de elétrons preenche exatamente os estados da banda inferior. Neste caso não haverá condutividade, e o material será um isolante! Então, no que diz respeito à condutividade elétrica, as diferenças entre metais e isolantes são conseqüências do modo como as bandas de energias são preenchidas nestes materiais.

Antes de prosseguirmos, vamos resumir o que foi dito até aqui: os dois ingredientes fundamentais para entendermos porque alguns materiais conduzem corrente elétrica e outros não, são: (a) o potencial periódico da rede cristalina que cria uma estrutura de bandas de energia separadas por hiatos onde não existem estados eletrônicos e (b) o princípio de exclusão de Pauli que dita a maneira pela qual os estados

dentro de cada banda devem ser preenchidos.

O caso (iii) acima, onde o número de elétrons preenche exatamente a banda inferior é o importante caso dos isolantes, mas também descreve a situação dos materiais chamados *semicondutores*. Semicondutores são a matéria prima de diodos e transistores, e possuem vastíssimas aplicações na indústria eletrônica, principalmente na indústria de informática. A diferença entre o isolante e o semicondutor é basicamente o tamanho do hiato de energia que separa as duas bandas. Se este for muito grande, temos um isolante, mas se ele for suficientemente pequeno, temos um semicondutor. Mas, o que significa ser suficientemente pequeno? Significa que elétrons que ocupam estados no topo da banda inferior (inicialmente preenchida) podem ser facilmente promovidos para os primeiros estados da banda superior. Esta transferência de elétrons pode ocorrer meramente por um efeito de temperatura; a agitação térmica dos elétrons faz com que alguns deles pulem do topo da banda de baixo para o fundo da banda de cima.

Na próxima seção veremos como o número de elétrons na “banda de cima” de um semicondutor pode ser controlado, deste modo conferindo a esses materiais suas propriedades elétricas especiais.



A classificação de materiais em isolantes e semicondutores depende da estrutura de bandas de energia de cada um e do preenchimento dos estados dentro das bandas.

## 5.7 Junções, Diodos e Transistores

Circuitos eletrônicos são conjuntos de peças construídas de materiais e formas diferentes, ligadas eletricamente entre si, e que servem para executar determinadas tarefas. Para entrarem em funcionamento, os circuitos eletrônicos precisam ser percorridos por uma corrente elétrica. Como vimos, uma corrente elétrica flui sempre que houver um campo elétrico aplicado a um material que possui cargas livres que possam se mover. Na prática, para termos um campo elétrico aplicamos uma diferença de potencial, como os 127 volts das tomadas de nossas casas, ou aqueles 1,5 volts de uma pilha pequena. Por exemplo, um rádio é um circuito eletrônico cuja finalidade é transformar a informação contida

em uma onda eletromagnética captada por sua antena, em ondas sonoras que possam ser ouvidas e compreendidas por nós. Se o nosso cérebro tivesse a capacidade de detectar e decodificar ondas eletromagnéticas, não precisaríamos de rádio! Para o rádio realizar esse truque é preciso que ele seja alimentado por uma bateria, ou seja, é preciso que uma corrente elétrica percorra os seus componentes eletrônicos. Cada um desses componentes possui características próprias, e responde de determinada forma à passagem da corrente. Essas características são expressas por curvas de voltagem *versus* corrente elétrica. Por exemplo, um pedaço de fio pode ser considerado o componente eletrônico mais simples que se pode ter. Se ligarmos as pontas do fio aos terminais de uma bateria de 1,5 volts, aparecerá uma corrente percorrendo o fio. Se colocarmos duas baterias em série, de modo a obter 3 volts, a corrente aumentará proporcionalmente, e assim por diante. Esta proporcionalidade é expressa pela famosa lei de Ohm:

$$V = RI$$

onde  $V$  é a voltagem aplicada,  $I$  é a corrente que percorre o fio, e  $R$  é a sua resistência. Note que a voltagem  $V$  é controlada externamente, e portanto independe da forma, do tamanho ou diâmetro do fio. A corrente  $I$  é o efeito que surge como consequência da aplicação de  $V$ , e a resistência  $R$  é uma característica do material e da sua forma geométrica, que no caso de um fio comum é a de um cilindro. Mantendo-se a forma do fio, ou seja, seu diâmetro e comprimento, materiais diferentes terão valores de  $R$  diferentes.  $R$  está também relacionada a processos microscópicos de colisões dos elétrons com a rede cristalina ao se deslo-

carem dentro do material. Para um fio,  $R$  é inversamente proporcional à área da seção transversal (ou seja ao quadrado do raio) do fio,  $A = \pi a^2$ , onde  $a$  é o raio da seção transversal do fio, e diretamente proporcional ao seu comprimento  $l$ . Estes são fatores geométricos;  $R$  é também proporcional à *resistividade*,  $\rho$ , uma grandeza intrínseca ao material. Para um fio, a expressão matemática da resistência é:

$$R = \frac{l}{A}\rho$$

Para fios do mesmo material, se dobrarmos a área da seção transversal  $R$  fica reduzida a metade, enquanto que se dobrarmos o seu comprimento,  $R$  também dobra. Podemos dizer *grosso modo* que o engenheiro está interessado em  $R$ , enquanto o físico da matéria condensada em  $\rho$ . Para um metal comum como o cobre, esta quantidade, é dada por:

$$\rho = \frac{m^*}{ne^2\tau}$$

onde  $m^*$  é a massa efetiva do elétron no material,  $n$  a densidade de elétrons (ou seja, o número de elétrons por unidade de volume de material), e  $e$  o valor da carga do elétron. O parâmetro  $\tau$  tem unidade de tempo, e representa o fato de que ao se deslocarem sob a ação do campo elétrico, os elétrons colidem com os íons da rede. O significado físico de  $\tau$  é o *tempo médio* entre duas colisões sucessivas entre um elétron e os íons da rede. Note então que ao medirmos  $R$ , sabendo o diâmetro e o comprimento do fio, podemos calcular  $\rho$ , e conseqüentemente ter acesso a quantidades microscópicas, como  $m^*$  e  $\tau$ ! Em física experimental é sempre assim: mede-se alguma coisa, sabe-se *a priori* uma segunda, e calcula-se uma terceira!

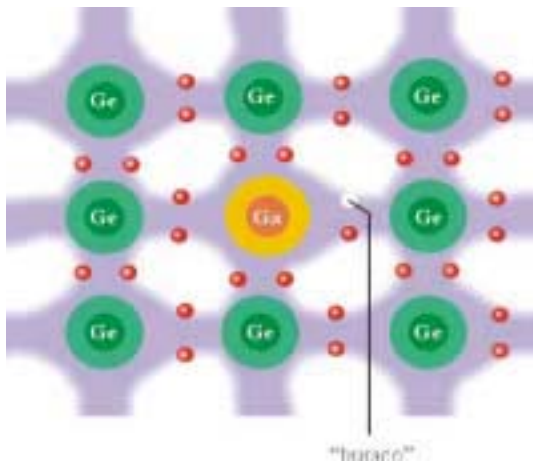
O fio metálico é o exemplo de resistor mais simples de todos. Sua curva  $V$  vs.  $I$  é uma reta cuja inclinação nos dá o valor de  $R$ . O resistor é um exemplo do que se chama em eletrônica *componente linear passivo*. Linear porque a corrente varia linearmente com a voltagem, e passivo porque o valor de  $I$  não depende de mais nenhuma outra voltagem além daquela aplicada aos seus terminais. Nem todos os objetos terão uma curva simples assim. De fato, é precisamente a não-linearidade de certos componentes eletrônicos que os torna úteis em eletrônica. Particularmente importantes são os transistores, objetos cuja curva  $V$  versus  $I$  pode ser controlada por um sinal elétrico aplicado em um eletrodo de controle. Transistores são feitos de materiais semicondutores, e representam o mais importante exemplo de *componente eletrônico ativo*.

Recordando, um semicondutor é um material que possui uma banda de energia completamente ocupada, um hiato de energias proibidas, e outra banda com estados eletrônicos disponíveis acima. A largura do hiato é pequena o suficiente para que elétrons possam passar da banda inferior para a banda superior. Chamamos de *banda de valência* a banda inferior, e *banda de condução* a superior. Se o hiato for muito grande, teremos um isolante ao invés de um semicondutor. Exemplos de materiais semicondutores são o germânio (Ge), o silício (Si), o arseneto de gálio (GaAs), o óxido de zinco (ZnO), entre outros. No Ge, por exemplo, o hiato de energia entre a banda de valência e a banda de condução é de 0,72 eV (1 eV = 1 eletrônvolt é a energia adquirida por um elétron ao atravessar uma diferença de potencial de 1 volt). No Si o hiato é de 1,1 eV. De maneira geral, a largura do hiato em semicondutores está entre 1 e 3 eV. Esses materiais são exemplos de *semi-*

*condutores intrínsecos*. São assim chamados porque são substâncias puras, e suas características de semicondutividade são devidas somente a propriedades intrínsecas dos elementos que os constituem. Acontece que as propriedades elétricas de semicondutores intrínsecos podem ser dramaticamente alteradas (e controladas!) se outros elementos forem adicionados à rede cristalina semicondutora. Esses elementos “externos” são incluídos em quantidades extremamente pequenas, e por essa razão são chamados de *impurezas* (não confunda ‘impureza’ com ‘sujeira’). Para entendermos como funciona uma junção, um diodo e um transistor, é preciso entender os efeitos de impurezas adicionadas a semicondutores intrínsecos.

Semicondutores cujas propriedades elétricas são controladas pela adição de impurezas em semicondutores intrínsecos, são chamados de *extrínsecos*. Tomemos como exemplo o Ge e o Si. Os átomos desses elementos possuem configurações eletrônicas externas muito semelhantes: o Ge termina com as camadas eletrônicas  $4s^24p^2$ , e o Si com  $3s^23p^2$ . Eventualmente o leitor terá notado que na coluna desses elementos na tabela periódica todos os elementos terminam com 4 elétrons, dois em um orbital  $p$  e dois em um orbital  $s$ . São esses elétrons que formam as ligações covalentes no semicondutor. Portanto, em um cristal de Ge, cada átomo contribui com 4 elétrons para a banda de valência. Suponha agora que um dos átomos de Ge seja substituído por um átomo de arsênio (As). A configuração eletrônica do arsênio termina com  $4s^24p^3$ , ou seja, o As possui 1 elétron a mais que o Ge. Esse elétron extra não encontra vaga na banda de valência da rede de Ge, e conseqüentemente é obrigado a pular para a banda de condução. Então, a inclusão de uma

impureza de As em uma rede de Ge resulta em 1 elétron na banda de condução. Obviamente não se consegue colocar 1 único átomo em uma rede, mas a concentração de impurezas pode ser controlada com grande precisão, o que permite o controle fino no número de transportadores de carga na banda de condução de um semiconductor. Uma impureza que *doa* um elétron para a banda de condução, como o faz o As no Ge, é chamada de *doadora de elétrons*, e o semiconductor assim formado é chamado de *tipo n* (o ‘n’ tendo o significado de ‘negativo’, porque cargas negativas foram doadas à rede original).



A inclusão de um átomo de Ga em uma rede de Ge resulta na remoção de um elétron da banda de valência do material, deixando um buraco em seu lugar.

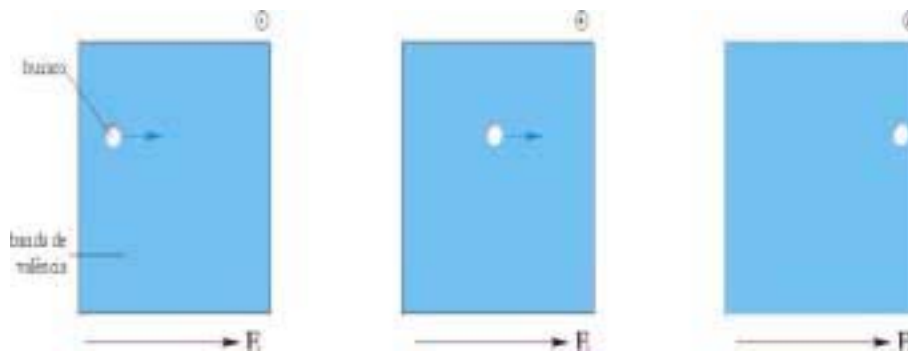
Na tabela periódica o As possui 1 elétron a mais do que o Ge e está à sua direita. Ao contrário, o gálio (Ga) está à esquerda do Ge, e possui configuração eletrônica externa  $4s^23p^1$ , ou seja, com 1 elétron a

menos que o Ge. O que acontece se ao invés de As colocarmos Ga em uma rede de Ge? Exatamente o oposto: um dos elétrons da banda de valência originalmente pertencente ao Ge, ocupará uma vaga no átomo de Ga, deixando um *buraco* na banda. Agora respire fundo e prepare a sua paciência, porque aqui acontece uma daquelas coisas que dão vontade de a gente largar a física e ir criar galinhas: *buracos conduzem eletricidade!* É isso aí mesmo que você acabou de ler; um buraco se comporta como uma carga positiva dentro da banda de valência, tanto quanto um elétron se comporta como uma carga negativa na banda de condução, e se move sob a ação de um campo elétrico. No fundo, no fundo, não é tão estranho assim; com o tempo a gente se acostuma e passa a considerar essas maluquices coisas normais. Imagine uma banda de valência totalmente ocupada, com exceção de uma única posição eletrônica que está vazia. Este é o buraco. Suponha que um campo elétrico seja aplicado. Cada elétron da banda ficará sujeito a uma força  $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$ . Se todas as posições estivessem ocupadas, o princípio de exclusão proibiria o surgimento de corrente elétrica. Mas como existe uma vaga livre, um elétron próximo a essa vaga pode se mover e pular para ela, deixando por sua vez a sua posição vaga para outro elétron se mover, etc. Assim, o movimento dos elétrons para um lado, equivale ao movimento do buraco para o lado oposto. Temos com isso uma corrente de buraco! Física é a ciência mais econômica que existe: até a ausência de alguma coisa (como se supõe a respeito de um buraco) contribui para as propriedades físicas de objetos. Para efeitos de cálculo, cada buraco se comporta como uma partícula com massa, carga, etc. É uma coisa de louco! Impurezas que criam buracos na

banda de valência são chamadas de *receptoras de elétrons*, e o material semiconductor formado desse jeito é chamado de *tipo p* (o ‘p’ de ‘positivo’). Resumindo, a corrente elétrica em semicondutores do tipo n é devida ao movimento de elétrons na banda de condução, e em semicondutores do tipo p, devida a buracos na banda de valência. Damos o nome de *dopagem* ao processo controlado de introdução de impurezas em semicondutores intrínsecos. Aliás, voltando a essa história de buracos, eles normalmente estarão também presentes nos semicondutores intrínsecos. Como dissemos, devido ao fato do hiato de energia ser pequeno, elétrons no topo da banda de valência pulam para a banda de condução por efeito da temperatura<sup>6</sup>. Se a temperatura for tal que essa quantidade se torne da ordem do hiato, os elétrons da banda de valência podem pular para a banda de condução, deixando buracos para trás. Ao aplicarmos um campo elétrico, haverá duas correntes: uma de elétrons na banda de condução, e outra de buracos na banda de valência. Cada uma para um lado!

---

<sup>6</sup>Lembre que a energia térmica é medida por  $k_B T$ , onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann. A temperatura ambiente, por exemplo,  $T = 300\text{K}$ , a energia térmica é igual a  $1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K} \times 300 \text{ K} = 4,14 \times 10^{-21} \text{ J}$ , ou  $0,026 \text{ eV}$ . Se em um semiconductor o hiato entre a banda de condução e a de valência for da ordem deste valor, elétrons podem pular de uma banda para a outra por mero efeito da temperatura.



Em um semiconductor, o movimento de um elétron para uma direção equivale ao movimento de um buraco para a outra. O buraco se comporta como uma partícula com a mesma massa do elétron, porém com carga contrária.

Considere agora o que ocorre quando, no *mesmo cristal* semiconductor, uma região é dopada com doadores de carga, e a outra com receptores. Ou seja, o cristal é dividido em uma região do tipo n e outra do tipo p. A região de junção entre essas duas regiões é chamada *junção pn*. Junções pn são a base de diodos e transistores semicondutores. Os elétrons da região n tendem a fluir para a região p, e os buracos da região p tendem a fluir para a região n. Na medida em que isso ocorre, as cargas se acumulam dos dois lados, e um potencial eletrostático aparece, fazendo diminuir o fluxo. O resultado geral deste acúmulo de cargas negativas no lado p e positivas no lado n é o aumento do potencial eletrostático no lado p em relação ao lado n. Note que este potencial é uma propriedade *intrínseca* do material, e

só depende das concentrações de impurezas p e n, e das características do semicondutor antes da dopagem. É fácil ver que se tentarmos fazer passar uma corrente elétrica por uma junção pn, o resultado dependerá da direção em que o campo elétrico é aplicado, ou, da polaridade do potencial aplicado. Por exemplo, se aplicarmos um potencial positivo no lado negativo, e negativo no lado positivo, a diferença de potencial interno será acentuada, e não haverá fluxo de corrente. Se, por outro lado, revertermos a polaridade, ou seja, potencial positivo aplicado no lado positivo e negativo no lado negativo, a junção conduzirá. Temos com isso um elemento de circuito não linear, ou seja, sua curva  $V$  vs.  $I$  diferente de uma reta. Note o contraste com o caso do fio metálico, para o qual a corrente só depende do valor da voltagem, e não da direção do campo elétrico. O que acabamos de descrever é o comportamento de um *diodo* semicondutor, que só conduz para voltagens aplicadas em determinada direção.

Uma das aplicações mais comuns de junções pn são os chamados diodos *LEDs*, do inglês *Light Emitting Diodes*, ou diodos de emissão de luz. Como vimos no capítulo quatro, quando um elétron em um átomo faz uma transição de um nível de energia mais alto para um mais baixo, ele emite um fóton de energia. Nos LEDs ocorre algo semelhante: a voltagem interna na junção pn é construída de modo que o fóton emitido por um elétron que decaia da banda de condução para a banda de valência esteja na região do visível.

Transistores por sua vez nada mais são do que duas junções pn (ou dois diodos) justapostas<sup>7</sup>. Podem ser do tipo *pnp* ou do tipo *npn*, de-

---

<sup>7</sup>Transistores construídos desta forma são chamados de *transistores bipolares*.

pendendo da maneira como os diodos são conectados. São o exemplo mais importante de componentes *ativos* em eletrônica, ou seja, componentes que quando alimentados por um sinal externo, controlam a corrente elétrica em circuitos. As aplicações práticas dos transistores são infindáveis, e obviamente este não é o espaço apropriado para discutí-las. Vamos apenas mencionar a propriedade que faz os transistores tão úteis para a eletrônica. Considere, por exemplo, um transistor npn. Este é geralmente um objeto com 3 terminais, chamados de *emissor*, *base* e *receptor*. Esses terminais estão eletricamente ligados às regiões npn (ou pnp) do material semicondutor. A utilidade dos transistores vem do seguinte fato: quando ligado de maneira apropriada, a corrente que flui do coletor para o emissor pode ser controlada, e é proporcional à corrente que flui pela base, ou seja:

$$I_{coletor} = \alpha I_{base}$$

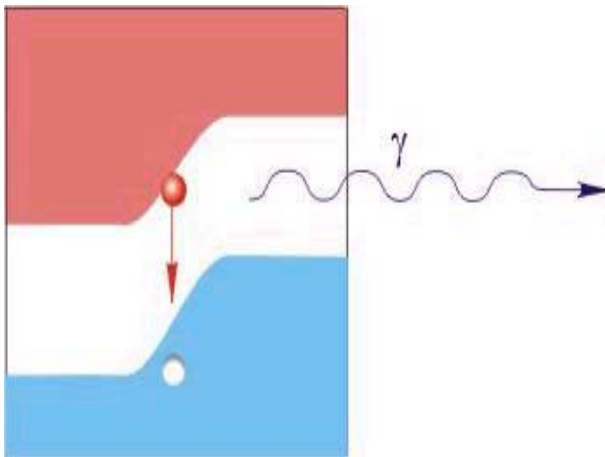
onde  $\alpha$  vale tipicamente 100. Então, uma pequena corrente na base controla uma corrente muito maior no coletor. Por conta desta propriedade, transistores podem atuar em circuitos eletrônicos como *amplificadores de corrente*.

Essas propriedades dos materiais semicondutores tornaram possível a construção não só de diodos e transistores como elementos de circuitos individuais, mas circuitos eletrônicos completos dentro de um único cristal semicondutor. A deposição controlada de várias regiões npn no mesmo semicondutor resulta em resistores, diodos e transistores conectados entre si, alguns podendo conter o estonteante número

---

Existem, contudo, outros tipos de transistores cujo princípio de funcionamento é diferente.

de 10 mil transistores dentro de um pequeno pedaço de silício. Circuitos construídos dessa maneira são chamados de *circuitos integrados*, e na sua forma final, encapsulado e exibindo apenas os terminais para conexões elétricas, são apelidados de *chips*. Para algumas aplicações especiais, circuitos integrados podem chegar a ter milhões de componentes eletrônicos em um único chip!



Um LED, do inglês *Light Emitting Diode* é uma das inúmeras aplicações dos semicondutores na eletrônica.

## 5.8 O que são Computadores?

Computadores invadiram a nossa vida. Aos poucos foram se popularizando, e já é impossível pensarmos em viver sem eles. Há pouco tempo atrás o uso de computadores estava restrito aos centros de pesquisas e às universidades, e sua tarefa principal era a realização de cálculos

científicos complicados que tomariam muito tempo, para serem feitos a mão. O avanço na tecnologia dos computadores foi (e ainda está sendo) tão rápido, que muita gente não conseguiu acompanhar, e acabou ficando de fora dessa nova era. Hoje, com a proliferação dos computadores pessoais, usamos o computador não só para fazer contas e gráficos, mas como máquina de escrever, como telefone, fax, secretária eletrônica, correio, livro, televisão, despertador, máquina de vídeo-game, enciclopédia, aparelho de som, para mencionar umas poucas aplicações.

Mas, como os computadores conseguem fazer tudo isso? No fundo a idéia é muito simples, e está baseada no fato de que números e operações matemáticas podem ser representados por níveis de voltagens em circuitos eletrônicos. Por razões de estabilidade e reprodutibilidade, ao invés de vários, usa-se somente dois níveis de voltagem. Vamos fazer a seguinte analogia: imagine várias tomadas em uma parede da sua casa, por exemplo, quatro. Essas tomadas estão ligadas a disjuntores que podem estar ligados ou desligados. Você tem um voltímetro, e quer verificar quais tomadas estão ligadas. Atenção: não interessa o *valor* da voltagem em cada uma delas (se 100 volts, 50 volts, etc.), mas somente um ‘sim’ ou ‘não’. Imagine que as 4 tomadas estão dispostas em uma linha, e você comece a medir da esquerda para a direita. A cada tomada que estiver polarizada você associa o dígito ‘1’, e a cada uma que estiver desligada você associa o dígito ‘0’. Então, um possível resultado da sua medida seria ‘1011’, significando que a primeira, a terceira e a quarta tomadas estão polarizadas, e a segunda não. Esta sequência de dígitos pode ser considerada uma *representação de um número na base 2*, ou seja, um número em um sistema numérico que

possui somente dois dígitos, 0 e 1. Tal sistema numérico é chamado de *binário*. O nosso sistema numérico possui 10 dígitos (incidentalmente porque possuímos 10 dedos nas mãos!), de zero a nove, e por isso é chamado de sistema *decimal*. Para transformar a sequência ‘1011’ para decimal procedemos da seguinte forma: multiplicamos cada dígito da sequência pela potência de dois relativa à sua posição, e somamos tudo. As posições começam a ser contadas da direita para a esquerda, sendo 0 associado à primeira. Por exemplo, na sequência ‘1011’ o primeiro dígito é 1, e ocupa a quarta posição. Portanto, a sua representação decimal será  $1 \times 2^3 = 8$ , o segundo será  $0 \times 2^2 = 0$ , o terceiro  $1 \times 2^1 = 2$  e o último  $1 \times 2^0 = 1$ . Assim teremos:

$$1011 \Rightarrow 8 + 0 + 2 + 1 = 11$$

Ou seja, ‘1011’ em binário é igual a ‘11’ em decimal. Você pode representar o número ‘11’, ou qualquer outro, através das tomadas da sua casa!

Se você acha isso esquisito demais, é porque ainda não notou que no sistema decimal procedemos da mesma maneira. Por exemplo, considere o número 528. Esse número pode ser decomposto exatamente da mesma forma na base decimal:

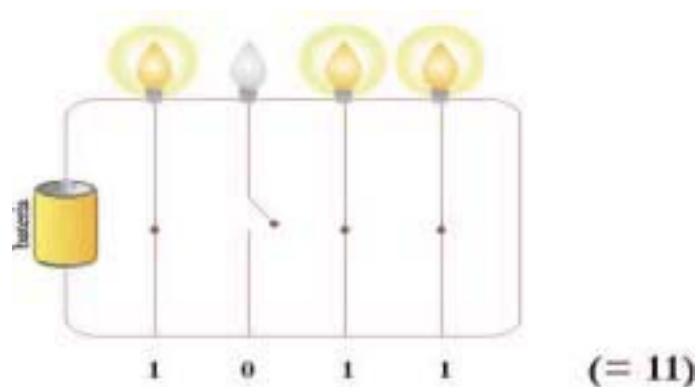
$$528 = 5 \times 10^2 + 2 \times 10^1 + 8 \times 10^0$$

Substitua agora as tomadas por circuitos integrados em chips onde transistores polarizados representam ‘1’ e não-polarizados representam ‘0’, e você tem a base para o funcionamento de um computador. Podemos não somente representar números, mas realizar operações

matemáticas de todo tipo, apenas com esses ‘zeros’ e ‘uns’, polarizando e despolarizando (ou seja, ligando e desligando) transistores em chips construídos especialmente para esta finalidade: os chamados microprocessadores.

Podemos então esquematicamente resumir a evolução do átomo ao computador:

elementos tetravalentes (Ge, Si)  $\Rightarrow$  cristais semicondutores intrínsecos  $\Rightarrow$  dopagem e cristais semicondutores extrínsecos tipo ‘p’ e tipo ‘n’  $\Rightarrow$  junções pn  $\Rightarrow$  diodos  $\Rightarrow$  junções pnp ou npn  $\Rightarrow$  transistores  $\Rightarrow$  circuitos integrados  $\Rightarrow$  microprocessadores  $\Rightarrow$  computadores



Na lógica binária o que importa é se um determinado elemento do circuito está “aceso” ou não. O estado “aceso” representa o dígito lógico ‘1’, e o estado “apagado” o dígito lógico ‘0’.

## 5.9 Bits & Bites: o Básico

Um Computador é um complexo emaranhado de circuitos eletrônicos organizados para executar operações lógicas. Essas operações são realizadas através de combinações de seqüências de sinais elétricos que representam os *bits* ‘0’ e ‘1’. Uma seqüência de oito bits é chamada um *bite*. Microprocessadores são caracterizados pela quantidade de bits com que operam. Por exemplo, os velhos microprocessadores 8088 e 80286 operavam com seqüências de 16 bits, ou seja, 2 bites. Neste caso, o maior número decimal possível de ser representado em tais processadores é:

$$\begin{aligned}
 1111111111111111 &\Rightarrow 2^{15} + 2^{14} + 2^{13} + 2^{12} + 2^{11} + 2^{10} + 2^9 + 2^8 + 2^7 + \\
 &\quad + 2^6 + 2^5 + 2^4 + 2^3 + 2^2 + 2^1 + 2^0 = \\
 &= 32768 + 16384 + 8192 + 4096 + 2048 + 1024 + 512 + 256 + 128 + \\
 &\quad + 64 + 32 + 16 + 8 + 4 + 2 + 1 = 65.535
 \end{aligned}$$

Qualquer número maior do que 65.535 precisa ser “quebrado” em números menores para ser processado nestes microprocessadores. Computadores baseados nos processadores 80386, 80486 e Pentium operam com uma seqüência de 32 bits ao invés de 16, o que os permite operar diretamente com números até 4.294.967.295.

Basicamente um computador pode ser dividido em cinco partes distintas: *entrada* (input), *saída* (output), *memória*, *unidade de controle*, e as *unidades lógica e aritmética*. O teclado, por exemplo, representa uma das unidade de entrada de dados, e a tela uma das de saída. Resultados de operações são armazenados na memória. O papel da unidade

de controle é interpretar comandos e configurar os circuitos eletrônicos de acordo para que a operação desejada seja executada. As unidades de controle e lógica e aritmética são organizadas em um único bloco chamado *unidade central de processamento* (UCP).

A grande utilidade de um computador reside no fato de que podemos “ensiná-lo” a executar tarefas lógicas. Essas tarefas são ditadas a ele sob a forma de seqüências de instruções, ou *programas*. Programas de computador podem ser escritos em várias *linguagens* diferentes, como por exemplo, o FORTRAN, o PASCAL, o C++, etc. Cada linguagem tem suas peculiaridades, vantagens ou desvantagens, dependendo da tarefa a ser realizada. Aprender uma linguagem de computador consiste em aprender os seus comandos e sua *sintaxe*, ou seja, as regras sob as quais os comandos devem ser escritos. O programa abaixo é um exemplo de programa escrito em FORTRAN que instrui o computador a ler dois números de entrada, calcular e exibir na tela as médias aritmética e geométrica entre eles:

```
PROGRAM MEDIAS
PRINT*, 'Entre com dois números'
READ*, XN1, XN2
ARI = 0.5*(XN1+XN2)
GEO = SQRT(XN1*XN2)
PRINT*, 'Média aritimética:', ARI
PRINT*, 'Média geomética:', GEO
STOP
END
```

O mesmo programa poderia ter sido escrito em PASCAL ou C++,

ou ainda qualquer outra linguagem (às vezes, linguagens de computadores são como times de futebol: provocam acaloradas discussões entre os “experts”. Portanto, desde já me confesso um programador medíocre e rogo clemência aos inimigos do FORTRAN por este exemplo cretino de programação).

O computador não tem como compreender os comandos acima na forma como eles estão escritos. O comando 'PRINT\*,' ('imprimir', em inglês), por exemplo, instrui o computador a exibir na tela o que vier depois da vírgula (no caso da segunda linha do programa acima, a frase 'Entre com dois números'). Para que o computador entenda o comando, é preciso que ele seja traduzido para uma seqüência de bits. Quem faz este trabalho de intérprete entre as palavras do mundo dos humanos para as palavras do mundo dos computadores é um programa chamado de *compilador*. Portanto, para que o programa acima possa ser executado em um computador, é preciso que nele esteja instalado um compilador FORTRAN. Se o programa fosse escrito em C++, seria preciso ter instalado um compilador C++, e assim por diante.

A simplicidade do programa acima pode até insultar a inteligência de alguns. De fato, para que tanta tecnologia só para calcular médias aritmética e geométrica entre dois números? Para isso usamos uma máquina de calcular de bolso. Muito bem, e que tal calcularmos os autoestados de energia de um átomo de urânio, cujo núcleo possui 238 prótons e nêutrons? Ou ainda as autofunções de um elétron em uma rede de silício? É para isso que servem os computadores; executar tarefas que não podemos realizar com instrumentos mais simples! É óbvio que um programa que calcule autoestados de um átomo será

consideravelmente mais complexo que o do exemplo acima!

Para que um programa de computador, com seu compilador, possam ser executados, é preciso que um outro programa esteja em operação. Este é uma espécie de administrador do computador; ele é chamado de *sistema operacional*. Os sistemas operacionais mais conhecidos para microcomputadores na atualidade são o MS-DOS, LINUX, UNIX e o WINDOWS. Sistemas operacionais são programas que devem ser lidos pelo computador a partir de algum meio de gravação (como, por exemplo, um disquete). Mas, para ter condições de executar qualquer comando de um programa, o computador necessita executar antes operações ainda mais elementares. Estas operações são de fato os comandos que “trazem o computador à vida”. É mais ou menos como ao acordarmos de manhã após uma noite de sono pesado: abrimos os olhos, e começamos aos poucos a nos mexer antes de executarmos tarefas mais complexas, tais como escovar os dentes ou tomar banho. Quando ligamos o computador, umas poucas linhas de comando que estão gravadas permanentemente em sua memória o instruem a executar uma série de testes preliminares, como a verificação da alimentação dos circuitos elétricos, reconhecimento do teclado, drives, a unidade de CD, etc., e só então buscar o sistema operacional, que finalmente o tornará apto a executar tarefas. Este programa inicial, que transforma o computador de um monte de fios e pedaços de semicondutores sem vida, em um poderoso, fiel e incansável aliado, é chamado *bootstrap*, ou simplesmente *boot*. Esta palavra denota o fato de que o computador, ao ser ligado, “acorda” com o próprio esforço, sem intervenção externa.

O uso de computadores revolucionou a pesquisa científica, em par-

ticular a pesquisa em física. Com eles podemos não só realizar cálculos complicados, impossíveis de serem feitos a mão, como também simular o comportamento de sistemas sob as mais variadas condições e comparar com o comportamento de sistemas reais. Por exemplo, podemos simular reações químicas na ausência de gravidade, o que é obviamente impossível de ser realizado em um laboratório na Terra. Podemos calcular os níveis de energia dos elétrons em um átomo isolado de carbono e comparar com aqueles de elétrons em uma rede cristalina de carbono. E assim por diante. É impossível pensar em pesquisa científica nos dias de hoje sem o auxílio de um computador.

## 5.10 A Internet

Além de realizarem cálculos complicados, tocarem música, exibirem filmes, trabalharem como máquinas de escrever, simuladores, etc., computadores possuem uma outra característica que os torna ainda mais úteis: podem ser interligados de modo a se comunicarem uns com os outros. Um conjunto de computadores ligados entre si forma uma rede (“net”, em inglês). Esta interconexão é realizada através de cabos elétricos especiais que conduzem os bits e bites de um computador para outro sob a forma de sinais elétricos. Desta forma podemos transferir dados de uma máquina para a outra. Mas, para que um computador possa aceitar documentos enviados de um outro, ambos devem compreender o formato da mensagem enviada. Ou seja, deve existir um *protocolo* obedecido por todas as máquinas ligadas a uma determinada rede.

Interconexões entre grupos de redes de computadores são chamadas de “inter-redes”, ou *internet*. A *Internet* (com “I” maiúsculo) é simplesmente a melhor e maior *internet* (com “i” minúsculo) já montada.

A idéia de redes de computadores nasceu de um projeto militar americano desenvolvido durante os anos de Guerra Fria pela agência ARPA (Advanced Research Projects Agency) com a finalidade de dificultar o acesso a informações sigilosas. Os dois tipos de serviços que se tornaram imediatamente importantes com a criação das redes foram o *Telnet*, que permitiu computadores de grande porte serem acessados e utilizados por usuários disponibilizados remotamente, e o endereço eletrônico (e-mail) que agilizou a circulação de informações entre os usuários da rede.

Com a sua criação, endereços eletrônicos tornaram-se rapidamente populares no meio acadêmico, onde cientistas de todo o mundo passaram a trocar idéias sobre temas de interesse comum usando este veículo de comunicação. Porém, a transferência de material muito extenso, como artigos de revistas especializadas, provou ser muito ineficiente através do e-mail usual. A fim de transferir arquivos muito extensos, foi criado um serviço chamado FTP (File Transfer Protocol - protocolo de transferência de arquivos). Através do FTP, pessoas do mundo inteiro passaram a acessar documentos, programas, textos, figuras, etc., localizados remotamente em algum arquivo de computador, em uma biblioteca, centro de pesquisa, etc. Contudo, a maneira como o FTP foi concebido exigia um certo grau de desembaraço do usuário com computadores, e portanto pouco amigável para o leigo. Além disso, a visualização de um documento adquirido via FTP não pode ser feita

antes da aquisição estar completa.

Contudo, no início dos anos 90 uma nova revolução ocorreu: Tim Berners-Lee, trabalhando no CERN, inventou um novo protocolo, chamado HTTP (HyperText Transfer Protocol - protocolo de transferência de hipertextos), que permitiu o desenvolvimento de uma nova maneira pela qual dados podiam ser lidos e exibidos na tela de um computador de modo simples para o usuário leigo. A invenção permitiu a criação da WWW (World Wide Web) e o desenvolvimento da Internet como a conhecemos hoje.

Suponha que dois computadores, Eduardo e Mônica, estejam ligados entre si. Eduardo possui uma série de documentos, fotografias, textos, etc., guardados em sua memória. Mônica está localizado em outra parte, e deseja acessar alguns desses documentos. Para que Mônica tenha acesso aos documentos de Eduardo, é preciso que um programa especial, chamado de *servidor*, esteja sendo executado em Eduardo. Quando Mônica envia alguma mensagem requerendo um documento de Eduardo, o servidor localiza o pedido e envia o resultado da busca de volta. O documento é então exibido na tela de Mônica.

A Internet é a maior rede de computadores do mundo. Através dela podemos, por exemplo, acessar a Biblioteca da Universidade de Harvard, participar de um jogo em um cassino em Las Vegas, visitar obras de arte em exposição no Louvre em Paris, acompanhar as imagens obtidas pela sonda “Pathfinder” em Marte, comprar um livro ou um CD em uma loja em Berlin, visitar o Vaticano em Roma, etc. É o maior (e mais democrático!) veículo de difusão de informação e conhecimento já inventado pelo homem!

## 5.11 O ADN Computa!

Computadores são máquinas que executam instruções codificadas em seqüências de dígitos ‘0’ e ‘1’. ADNs são moléculas que executam instruções codificadas como seqüências de moléculas menores denominadas ‘C’, ‘G’, ‘A’ e ‘T’ (seção 4.6). Uma instrução de computador pode ser algo como ‘1100001010010100010010100111...’, enquanto uma instrução de ADN pode ser algo como ‘CCGTTGATTTAAAACCCATGG...’. Computadores executam instruções através de combinações de sinais elétricos em circuitos eletrônicos. ADNs executam instruções através de combinações de reações químicas que ocorrem dentro das células de organismos. Uma operação típica realizada por computadores é: “some estes dois números”. Uma operação típica realizada por ADNs é: “faça esta proteína”. Vemos que existem semelhanças óbvias entre computadores e ADNs! Seria possível instruir moléculas de ADN para realizarem uma operação de computador como: “encontre a solução para tal problema”?

Leonard M. Adleman é pesquisador profissional em ciência da computação e biólogo amador. Ele é professor da *Universidade da Califórnia do Sul*, em Los Angeles. Estudando problemas matemáticos envolvendo moléculas de ADN em 1993, ele teve a idéia de fazer um *computador biológico*, onde moléculas de ADN seriam instruídas para resolver problemas matemáticos. As variáveis do problema seriam codificadas em seqüências de moléculas ‘C’, ‘G’, ‘A’ e ‘T’; as operações seriam realizadas através das reações químicas envolvendo essas moléculas, e a resposta viria também sob a forma de uma seqüência de ADN. A co-

dificação das variáveis em moléculas de ADN é possível porque nos dias de hoje (acreditem!) pode-se literalmente encomendar moléculas com qualquer seqüência desejada a laboratórios comerciais por um preço irrisório! Viva a tecnologia!

Adleman demonstrou a realização de sua idéia resolvendo um problema matemático que pode ser exemplificado através da seguinte situação simples: imagine que existam vôos comerciais entre quatro cidades: Rio, Belo Horizonte, São Paulo e Vitória. As regras do jogo são: existem vôos diretos (isto é, sem escala) entre Rio-Belo Horizonte, Vitória-São Paulo, São Paulo-Belo Horizonte, Vitória-Belo Horizonte, e Rio-Vitória. Com exceção deste último, os outros vôos só existem na ordem citada das cidades. Por exemplo: o vôo São Paulo-Belo Horizonte existe, mas o Belo-Horizonte-São Paulo não. O trajeto Rio- Vitória é o único em que existem vôos de ida e volta. Pois bem, dadas as regras, o problema a ser resolvido é: como viajar do Rio para Belo Horizonte passando somente uma vez por cada uma das cidades? Com um simples esboço em uma folha de papel imediatamente concluímos que a única resposta possível é: Rio-Vitória-São Paulo-Belo Horizonte. Este problema trivial se complica dramaticamente quando o número de cidades aumenta. Para dar uma idéia, se tivéssemos 100 cidades conectadas ao invés de quatro, para encontrar a trajetória correta dos vôos indo de uma cidade à outra passando somente uma vez por cada uma delas, com a ajuda de um computador como os que usamos atualmente, levaria mais tempo do que a idade do Universo!

Os nomes das cidades foram codificados nas seguintes seqüências de moléculas (obviamente Adleman utilizou nomes de cidades americanas

em seu experimento):

RIO DE JANEIRO:	ACTTGCAG
VITÓRIA:	TCGGACTG
SÃO PAULO:	GGCTATGT
BELO HORIZONTE:	CCGAGCAA

O leitor se recordará o que foi dito no capítulo quatro, que cada uma dessas moléculas só se liga ao seu complemento, sendo ‘A’ o complemento de ‘T’ (e vice-versa) e ‘G’ o complemento de ‘C’ (e vice-versa). Então, cada “cidade-molécula” terá um complemento. Por exemplo, o complemento do Rio de Janeiro será TGAACGTC, o de Belo Horizonte GGCTCGTT, etc. As trajetórias dos vôos foram codificadas tomando-se as quatro últimas letras da cidade de origem e juntando-as com as quatro primeiras da cidade de destino. Por exemplo, o código do vôo Rio-Vitória será: GCAGTCGG.

Por cerca de 20 dólares, Adleman obteve tubos contendo aproximadamente  $10^{14}$  moléculas de cada seqüência. Misturou-as em solução e cerca de 1 segundo depois tinha a resposta para o problema dentro do tubo (na verdade ele usou sete cidades, e não quatro, mas a discussão fica mais simples se usarmos apenas quatro). As reações ocorrem da seguinte maneira: imagine que uma molécula do tipo Rio-Vitória (GCAGTCGG) encontre uma molécula que é o complemento de Vitória (AGCCTGAC). Como AGCC é o complemento de TCGG, as duas moléculas são ligadas uma a outra, ficando a terminação TGAC do complemento livre. Quando o complexo formado encontra uma molécula Vitória-São Paulo (ACTGGGCT), novamente ocorre uma reação, pois ACTG é complemento de TGAC. Dessa forma as “moléculas-vôos” vão

se ligando entre si através das moléculas-complemento. A solução do problema estará codificada nas moléculas que apresentarem a seqüência: GCAGTCGGACTGGGCTATGTCCGA. Tal seqüência leva menos de 1 segundo para surgir dentro do tubo, o que representa um tempo muito menor do que aquele necessário para resolvermos o problema de cabeça!

Utilizando técnicas físico-químicas, Adleman separou as moléculas que continham a resposta do problema das outras (o que levou 1 semana!).

A possibilidade de construir computadores utilizando reações químicas entre moléculas de ADN representaria um ganho de velocidade e capacidade de armazenamento incomparavelmente maiores do que os existentes hoje com computadores usuais (a propósito, seríamos nós - juntamente os outros seres vivos - diferentes soluções, encontradas por ADNs, de um imenso problema matemático? Pense nisso!). Um grama de ADN pode guardar tanta informação quanto 1 trilhão de CDs. Os vários trilhões de reações químicas que ocorrem simultaneamente dentro do tubo representam uma capacidade de processamento paralelo que torna os supercomputadores da atualidade meras régua de cálculo! Adleman estima que serão necessários outros 50 anos de pesquisa e investimentos para se alcançar tal objetivo.

## 5.12 Computadores podem Pensar?

- Como ele se sente?

- Como ele se sente? Oh,...uma pergunta interessante meu rapaz....também gostaria de saber a resposta. Bem, vamos ver o que o nosso amigo

diz... é estranho...er...Ultrônico diz que ele não vê...não pode sequer entender o que você quer saber!

Os murmúrios e risos na platéia transformaram-se em uma algazarra. Adam sentiu-se terrivelmente embaraçado. O que quer que fizessem, eles não deveriam ter rido daquele jeito. (**The Emperor's New Mind** - A Nova Mente do Imperador - R. Penrose, Vintage 1990)

O crescente progresso feito na tecnologia da informática tem levantado questões instigantes e dividido opiniões na comunidade científica. A pergunta última que se coloca é: até que ponto computadores podem se aproximar das capacidades do cérebro humano? Computadores algum dia poderão pensar como uma pessoa? Poderão ter consciência como nós? Se apaixonar, sentir dor, ironizar, compreender, desenvolver aptidões para as artes, ciências, religião, etc.? Serão capazes de experimentar compaixão, ganância, orgulho, egoísmo? Como será o “ego” de um computador? Terão medo da morte? Terão laços de família? Desenvolverão doenças mentais? É preciso que se reconheça que no que diz respeito a uma série de tarefas, computadores já ultrapassaram em muito o cérebro humano. Por exemplo, um simples PC como o que uso no momento para escrever esta seção (Pentium MMX 200 MHz) é capaz de realizar milhões de operações matemáticas por segundo, o que é obviamente impossível para mim ou para qualquer outra pessoa fazer. Uma parte dos cientistas que estudam a chamada *Inteligência Artificial* (IA) defendem uma posição extrema: a de que para um computador alcançar o cérebro humano com todas as suas capacidades, é uma questão de tempo, rapidez, e espaço de memória. Uma corrente ainda mais radical da IA acredita que, de fato, computadores vão no

futuro superar o cérebro em todas as suas qualidades, e terão como nós experiências de auto-consciência! De outro lado encontram-se aqueles que rejeitam essa idéia. Alguns cientistas que entendem mais de cérebro do que de informática chegam a considerar sem sentido a simples comparação entre um computador e um cérebro humano (pelo menos com a tecnologia atual).

Entre os físicos-matemáticos de nossa época que mais contundentemente tem se oposto às idéias da IA, está Roger Penrose, do Instituto de Matemática da Universidade de Oxford. Penrose é autor do *best seller* **The Emperor's new Mind. Concerning Computers, Minds, and the Laws of Physics** (A Nova Mente do Imperador. A Respeito de Computadores, Mentas, e as Leis da Física). Penrose é partidário do segundo grupo, ou seja, não acredita que a maneira de “pensar” de um computador possa se igualar à maneira do cérebro humano. De fato, não acredita que um computador possa sequer imitar um cérebro em qualquer um de seus aspectos. Penrose não define (como ninguém o faz) consciência, mas a associa à compreensão, em particular à compreensão matemática. Ou seja, para ele o ato de compreender alguma coisa necessariamente envolve uma experiência consciente. Em seu livro ele tenta argumentar que o cérebro, ao contrário dos computadores, não funciona por algoritmos matemáticos. Um algoritmo é um procedimento através do qual um cálculo é realizado. Por exemplo, o algoritmo de Euclides (300 AC) é usado para encontrar o maior fator comum entre dois números<sup>8</sup>. Para exemplificar o algoritmo de Euclides tomemos os números 1365 e 3654. Qual o maior inteiro que

---

<sup>8</sup>Um fator comum é um número que divide outros dois em partes inteiras.

divide esses dois números? Para sabermos a resposta dividimos o maior número pelo menor, e tomamos o resto da divisão. Esse resto será o divisor do menor número entre os dois primeiros. O procedimento é repetido até chegarmos a resto zero:

$$3654 \div 1365 = 2 \text{ com resto } 924$$

$$1365 \div 924 = 1 \text{ com resto } 441$$

$$924 \div 441 = 2 \text{ com resto } 42$$

$$441 \div 42 = 10 \text{ com resto } 21$$

$$42 \div 21 = 2 \text{ com resto } 0$$

Logo, o maior divisor comum de 3654 e 1365 é 21:  $3654 \div 21 = 174$ , e  $1365 \div 21 = 65$ . O procedimento acima é o algoritmo de Euclides. Qualquer operação realizada em um computador é feita segundo um algoritmo. Penrose argumenta que a maneira segundo a qual o cérebro humano funciona é essencialmente diferente, ou seja, é não algorítmica, e portanto computador e cérebro são coisas fundamentalmente diferentes. Recentemente ele voltou ao tópico em um capítulo do livro **O que é Vida? Os Próximos Cinquenta Anos. Especulações sobre o futuro da biologia** (Ed. Brasileira Unesp 1997), uma comemoração aos 50 anos das palestras de Schrödinger realizadas em Dublin (veja capítulo três). Para terminar o capítulo, transcrevo abaixo os dois primeiros parágrafos da tradução brasileira.

*A mentalidade humana tem muitas facetas. Pode ser até que algumas delas possam ser explicadas pelos conceitos*

*da física atual e, além disso, estar potencialmente abertas à simulação em computadores. Os defensores da inteligência artificial (IA) afirmariam que tal simulação com certeza é possível - pelo menos no que diz respeito a muitas das qualidades mentais basicamente relacionadas com a nossa inteligência. E mais, ela poderia ser utilizada para capacitar um robô a comportar-se, especificamente nesses aspectos, do mesmo modo que um ser humano. Os defensores do IA forte iriam mais longe e sustentariam que toda qualidade mental pode ser imitada - e eventualmente suplantada - pelas ações dos computadores eletrônicos. Eles também afirmariam que essa mera ação computacional deve provocar, no computador ou no robô, o mesmo tipo de experiências conscientes pelas quais nós passamos.*

*Por outro lado, existem muitas pessoas que argumentariam o contrário: que certos aspectos da nossa mentalidade não podem ser tratados apenas em termos de computação. De acordo com essa visão, a consciência humana seria tal qualidade - ou seja, ela não é uma mera manifestação da computação. Na verdade, eu mesmo vou defender este argumento; mais do que isto, porém, vou argumentar que as ações que nossos cérebros realizam de acordo com nossas deliberações conscientes devem ser coisas que não podem nem mesmo ser simuladas em um computador - então, com certeza, a computação é incapaz, por si mesma, de gerar algum tipo de experiência consciente.*

PAINEL XI  
ALAN TURING

O inglês Alan Turing é considerado um dos principais precursores dos computadores digitais e da Inteligência Artificial. Nasceu em Londres, no dia 23 de junho de 1912. Sua carreira de matemático teve início em 1931, quando ingressou no *Kings College*, em Cambridge.

Em 1928, o matemático alemão David Hilbert, um dos mais importantes do século XX, lançou o seguinte desafio em um congresso internacional de matemática<sup>9</sup>: existiria algum procedimento “mecânico”, de caráter geral, que pudesse ser aplicado na resolução de *qualquer* problema matemático de uma determinada classe? Alan Turing se interessou pelo desafio, e ao tentar formalizar o conceito de “procedimento mecânico”, chegou ao que ficou conhecido como a *Máquina de Turing*, uma máquina imaginária que “compreenderia” as proposições de um dado problema em termos de seqüências de “zeros” e “uns”, e após operar na mesma base, daria a resposta também sob a mesma forma. Fundou assim as bases para o funcionamento dos modernos computadores digitais!

Durante a Segunda Guerra, Turing usou suas habilidades matemáticas para ajudar os britânicos no esforço de decifrar o sistema de códigos utilizado pelos alemães. Esses códigos eram gerados por um aparelho eletromecânico, uma espécie de computador rudimentar chamado *Enigma*, que constantemente criava novos códigos tornando a tarefa de decodificação virtualmente impossível para seres humanos. Turing, com outros cientistas britânicos, construiu um aparelho, denominado *Colos-*

---

<sup>9</sup>Hilbert gostava de desafios. Ele tinha um projeto de formular toda a matemática a partir de uns poucos axiomas. Em 1931, enquanto Hilbert tentava alcançar tal formulação, um jovem matemático austríaco, chamado Kurt Gödel, provou um teorema bombástico que implodiu o sonho de Hilbert, e o deixou, junto com os outros matemáticos da época, sem respiração. O Teorema de Gödel, apontado por alguns como o mais importante teorema da matemática, de certa forma estabelece os limites da própria matemática. Ele afirma essencialmente que nem tudo o que é verdade sobre números pode ser demonstrado matematicamente! Ou seja, dada qualquer estrutura matemática, formulada a partir de teoremas, axiomas, etc., sempre existirão propriedades numéricas que não serão demonstráveis a partir daquela formulação.

*sus*, capaz de realizar a tarefa de decodificação. Foi um dos primeiros passos em direção aos computadores digitais.

Turing acreditava que o cérebro humano, a despeito de sua complexidade, funcionava essencialmente como uma máquina e, conseqüentemente, poderia ser imitado por computadores. Em 1950, motivado por acaloradas discussões com seus colegas cientistas a respeito do futuro da computação, ele escreveu um artigo onde propôs um experimento que ficou famoso como *o Teste de Turing*, uma espécie de teste de inteligência para computadores. O teste consiste em uma pessoa propor perguntas a uma outra pessoa e a um computador, estes últimos estando separados visualmente do interrogador. Turing achava que se após algumas perguntas o interrogador fosse incapaz de diferenciar, a partir das respostas dadas, a pessoa do computador, a este poderia ser atribuída certa forma de inteligência.

Turing também trabalhou no *National Physical Laboratory*, em um projeto que visava construir um computador inteiramente inglês. Contudo, desapontou-se com a demora e complicações do trabalho, e abandonou o projeto antes do fim, mudando-se para Manchester. Naquela universidade engajou-se no projeto MADAM, *Manchester Automatic Digital Machine*. Perseguido por sua homossexualidade foi preso em 1952 por “indecência”, e obrigado a freqüentar sessões de psicoanálise que visavam “curá-lo”. No dia 7 de junho de 1954, durante uma crise de depressão, suicidou-se comendo uma maçã envenenada. Segundo os médicos que o examinaram, a causa da morte foi a “ingestão de cianureto de potássio durante uma crise mental”. Sua mãe, contudo, deu uma outra versão, a de que Turing costumava fazer testes caseiros com novas substâncias, e simplesmente foi descuidado.

#### **Onde saber mais: deu na Ciência Hoje.**

1. *Como Multiplicar Seqüências de ADN*, Salete Newton, vol. 12, no. 72, p. 9.
2. *Criogenia: quanto mais Frio Melhor*, Eugenio Lerner, vol. 3, no. 13, p. 88.
3. *O Efeito Hall Quântico*, Francisco Claro, vol. 6, no. 31, p. 36.
4. *Super-Redes: Harmonia das Bandas Cristalinas*, Eduardo de Campos Valadares, Marcus Vinícius B. Moreira, José Carlos Bezerra Filho e Ivan Frederico Lupiano Dias, vol. 6, no. 35, p. 44.

5. *Dispositivos Eletrônicos em Escala Atômica*, Eduardo C. Valadares, Luiz A. Curi e Mohamed Henini, vol. 18, no. 106, p. 40.

6. *Quasipartículas: Estados Coletivos da Matéria*, Carlos Alberto Aragão de Carvalho Filho, vol. 25, no. 145, p. 11.

## Resumo - Capítulo Cinco

Objetos macroscópicos são formados a partir de combinações entre átomos. Eles podem ser amorfos ou cristalinos. Nos amorfos a distribuição espacial dos átomos não possui regularidade, ao passo que nos cristalinos os átomos estão organizados em uma rede regular. Esta regularidade espacial dos átomos nos materiais cristalinos é responsável por várias propriedades macroscópicas importantes. Para entendermos as diferenças entre metais, isolantes e semicondutores precisamos de dois ingredientes: a regularidade da rede cristalina, e o princípio de exclusão de Pauli. A regularidade da rede faz com que o potencial elétrico gerado pelos íons seja periódico espacialmente. Esta periodicidade, por sua vez, divide o espectro de energias dos elétrons dentro do material em bandas separadas por hiatos. Os níveis de energia de uma banda são preenchidos pelos elétrons obedecendo o princípio de exclusão de Pauli. Ao chegar no topo de uma banda, o próximo nível disponível estará no fundo da banda superior adjacente. Semicondutores são materiais que resultam de um tipo especial de preenchimento de bandas de energias que possuem hiatos relativamente pequenos. A utilidade dos semicondutores vem do fato de que com eles podemos construir dispositivos eletrônicos onde a corrente elétrica pode ser controlada com grande precisão. Exemplos de tais dispositivos são transistores e chips de computadores. ‘Chip’ é um apelido para circuitos integrados, que são dispositivos eletrônicos com milhares de componentes menores interconectados eletricamente no mesmo cristal semiconductor. Caracteres numéricos e operações matemáticas podem ser representados como níveis de voltagens em circuitos eletrônicos. Computadores utilizam chips para realizar estas operações. O rápido desenvolvimento da tecnologia de informática tem levado alguns cientistas a estudar a capacidade de computadores para imitar o cérebro humano. Essa área de pesquisa é chamada de Inteligência Artificial.