

Mecânica
quântica,
ciência básica
e geração
de riqueza

ANTÔNIO JOSÉ ROQUE DA SILVA

Avicenis

A large, stylized white graphic of the word "SALSA" is positioned on the left side of the page, set against a dark blue background. The letters are thick and have a decorative, calligraphic feel. The 'S' is particularly large and prominent, extending from the top to the bottom of the page.

**ANTÔNIO JOSÉ
ROQUE DA SILVA**
é professor do Instituto
de Física da Universidade
de São Paulo.

INTRODUÇÃO

A mecânica quântica é considerada, atualmente, a teoria fundamental que descreve a evolução dinâmica e o comportamento de todos os objetos que conhecemos na natureza. Esse lugar de destaque era ocupado até o início do século XX pela mecânica clássica ou, como é também chamada, mecânica newtoniana. A descrição física da natureza tem como linguagem básica a matemática. Uma vez definido o sistema de interesse com seus constituintes fundamentais, é necessário caracterizar as variáveis que descrevem o estado particular desse sistema, bem como a maneira como esses constituintes interagem. Finalmente, para descrever como o sistema se modifica ao longo do tempo, ou seja, sua evolução dinâmica, é preciso conhecer as equações fundamentais que regem como essas variáveis se transformam. Além dessas equações, existe a questão conceitual de interpretação e conexão dos resultados matemáticos com a observação experimental.

Na mecânica clássica, as variáveis dinâmicas são a posição e o momento linear das partículas, e a equação que descreve a evolução temporal dessas variáveis é a equação de Newton. Essa equação descreve, basicamente, a taxa de variação temporal da posição e do momento, e conecta essa taxa com as forças entre as partículas. Conceitualmente, uma das idéias centrais da mecânica newtoniana é a possibilidade de acompanhar com precisão absoluta a

trajetória de cada partícula, e prever com exatidão e certeza o resultado de uma medida no futuro conhecendo-se as condições do sistema no presente. O mundo funciona como uma máquina precisa, e essa visão mecanicista do universo percolou da física para outras áreas do pensamento humano, desde meados do século XVIII até o início do século XX.

Uma série de resultados experimentais, principalmente ligados ao estudo de sistemas atômicos e de como esses interagem com a radiação eletromagnética, mostrou que a teoria newtoniana não era capaz de explicar satisfatoriamente o comportamento da natureza nessa escala de tamanho. Como resultado dessa situação de crise, nas primeiras três décadas do século XX, houve uma mudança de paradigma, com o estabelecimento de uma nova teoria, a mecânica quântica. A variável dinâmica que agora caracteriza o estado de um sistema é um objeto matemático mais complexo que o conjunto de posições e momento da mecânica clássica. Essa variável é chamada de função de onda. Equações que descrevem a variação temporal dessa função de onda foram estabelecidas. De maneira semelhante à equação de Newton, essas equações têm seus nomes associados aos físicos que as estabeleceram: equação de Schroedinger e equação de Dirac, em suas versões não-relativística e relativística, respectivamente. O austríaco Erwin Schroedinger e o inglês Paul Dirac receberam o Prêmio Nobel de Física em 1933 por suas contribuições. Tendo definido as variáveis dinâmicas e as equações que descrevem suas evoluções temporais, a questão de interpretação dos resultados matemáticos na mecânica quântica leva a uma ruptura fundamental com as idéias mecanicistas da física newtoniana. As equações de Schroedinger e Dirac descrevem agora como esse objeto matemático, função de onda, evolui no tempo. Essa evolução ainda é completamente determinista. Entretanto, a ligação desse objeto com a interpretação dos resultados experimentais é muito mais sutil que na mecânica clássica. O que é possível prever a partir da função de onda

é somente a probabilidade de que um determinado resultado experimental seja realizado. Não é mais possível, em um caso geral, o conhecimento preciso do que irá ser observado em uma dada medida. Isso traz uma mudança conceitual fundamental. Não é mais possível o conhecimento com precisão absoluta, mesmo que em tese, da posição e do momento linear de uma dada partícula. Existe uma incerteza intrínseca no conhecimento dessas variáveis complementares.

Essas equações e idéias vêm sendo aplicadas em um número enorme de situações físicas, e até hoje não existe nenhuma observação que indique que as idéias da mecânica quântica necessitem de revisão. Do ponto de vista fundamental, existem ainda questões conceituais que são constantemente debatidas, e ainda há o grande desafio intelectual de compatibilizar a mecânica quântica com a gravitação. Mas para a descrição da interação entre átomos, como eles formam moléculas e sólidos, e como é a interação desses sistemas com a radiação eletromagnética, a teoria quântica é extremamente bem estabelecida e bem-sucedida.

Para a escala de energia das ligações químicas, as partículas “fundamentais” a serem consideradas na descrição de todos os fenômenos são os elétrons e os núcleos. A estrutura nuclear subjacente, com sua composição em prótons e nêutrons, e esses em *quarks*, não é relevante. Além disso, a única interação importante é a eletromagnética. Para explicarmos o comportamento das moléculas, dos sólidos, as reações químicas e, por que não dizer, a vida, é preciso saber a composição do sistema de interesse (quais átomos estão envolvidos) e utilizar a mecânica quântica mais a teoria que descreve as interações entre partículas carregadas e campos eletromagnéticos, que é o eletromagnetismo. Os tipos de átomos definem quais núcleos estão presentes, e a interação desses com os elétrons – e esses entre si – define a chamada estrutura eletrônica do material. Essa estrutura eletrônica é responsável pela maior parte das propriedades observadas dos materiais.

SEMICONdutoRES E A INDÚSTRIA DA INFORMÁTICA

Como eles emitem e absorvem luz, como eles transportam carga elétrica (se são isolantes, metais ou semicondutores), qual a dureza dos materiais, etc. A descrição dessa estrutura eletrônica exige a solução das equações da mecânica quântica. É impossível a utilização da física newtoniana nesse contexto.

Olhando agora para a relação entre o avanço do conhecimento científico e a riqueza, vemos que existe uma ligação íntima entre eles. Novas idéias ou novas descobertas científicas invariavelmente levam a avanços tecnológicos, os quais acarretam novos produtos ou processos. Que por sua vez garantem uma vantagem mercadológica ao seu possuidor, resultando, finalmente, na geração de riqueza. Exemplos associados à física do século XIX são os avanços na termodinâmica e suas aplicações em máquinas a vapor e motores a combustão, e os avanços no eletromagnetismo que resultaram em avanços tecnológicos na área de comunicação a distância, do telégrafo às ondas de rádio. A mecânica quântica não é exceção. Como escrito por Tegmark e Wheeler no artigo “100 Years of Quantum Mysteries” na *Scientific American*, de fevereiro de 2001, “*We virtually ignore the astonishing range of scientific and practical applications that quantum mechanics undergirds: today an estimated 30 percent of the U.S. gross national product is based on inventions made possible by quantum mechanics...*”. Na verdade, é difícil imaginar o mundo como conhecemos hoje sem algumas dessas invenções: transistores de estado sólido, *lasers* em aparelhos de leitura de CDs, discos magnéticos, ressonância magnética nuclear, só para citar alguns exemplos. O conhecimento da mecânica quântica é hoje fundamental para a produção de novas tecnologias de ponta. Portanto, o aprendizado de seus conceitos fundamentais e o seu domínio operacional são hoje um requisito necessário não só aos físicos, mas também aos engenheiros e químicos. Somente assim poderá um país se tornar competitivo do ponto de vista de novas tecnologias.

A revolução na forma como nos comunicamos e obtemos informações hoje em dia está diretamente ligada aos avanços no poder de processamento e à constante redução dos preços dos computadores. Essas duas características estão diretamente ligadas à evolução da unidade de processamento central, ou CPU (do inglês *central processing unit*). Uma CPU contém hoje em dia dezenas de milhões de transistores em um único “chip” de silício, que é o material semiconductor utilizado pela indústria da eletrônica. Esse número de transistores em uma única CPU tem duplicado a, aproximadamente, cada 24 meses. Essa tendência é conhecida como lei de Moore. Gordon Moore, um dos fundadores da Intel, percebeu esse comportamento já em 1965, e ele se mantém até hoje. Claro que no fundo essa “lei” somente caracteriza a capacidade da indústria eletrônica em gerar os avanços tecnológicos necessários para sua continuidade. Na realidade o ponto importante não é somente a duplicação da capacidade de processamento, mas esse avanço acompanhado de uma manutenção do preço médio.

O ingrediente fundamental de uma CPU é o transistor de efeito de campo ou, como é mais conhecido, o Mosfet, do inglês *metal-oxide-semiconductor field effect transistor*. De forma bastante simplificada, esse dispositivo tem uma estrutura de capacitor, em que um material dielétrico, o óxido, separa um material com características metálicas de um material semiconductor, que no caso é o silício. Através da aplicação de um campo elétrico entre o metal e o semiconductor, cargas elétricas são acumuladas ou removidas de uma pequena região do semiconductor próxima ao óxido. Na presença de uma diferença de potencial aplicada no semiconductor, pode-se então gerar ou não uma corrente elétrica. Essa presença ou ausência de corrente pode agora ser associada ao conjunto binário 0 ou 1. Dessa forma, pode-se fazer um processamento de informação.

A origem do Mosfet remonta ao ano de 1948, quando três pesquisadores, Shockley, Bardeen e Brattain, trabalhando nos laboratórios de Murray Hill da Bell Telephone, inventaram o transistor. Por essa descoberta os três receberam o Prêmio Nobel de Física de 1956. Esses pesquisadores estavam investigando cristais de silício e germânio. Esses dois sólidos são chamados de semicondutores. Semicondutores possuem uma condutância intrínseca que tem um valor intermediário entre metais e bons isolantes. Entretanto, o que realmente os distingue de isolantes é a possibilidade de alterar de forma controlada essa condutância através de introdução de átomos apropriados no lugar dos átomos originais. Esses átomos novos são chamados de impurezas, ou dopantes, e o processo é chamado de dopagem. Esses novos átomos introduzem portadores de carga de dois diferentes tipos: ou elétrons, e nesse caso são chamados de impurezas doadoras, ou a “ausência de elétrons”, chamados de buracos ou lacunas, e nesse caso são denominados impurezas aceitadoras. O primeiro transistor foi feito de germânio e seu funcionamento era distinto do Mosfet. Mas foi com essa invenção que se iniciou a mudança da válvula para dispositivos de estado sólido. A partir dessa invenção passou-se a ter uma perspectiva de miniaturização e eventual integração dos componentes de processamento, o que não ocorria com a válvula. Foi um engenheiro que primeiro realizou um circuito integrado, ou seja, vários transistores interconectados em um único pedaço de silício. Seu nome é Jack Kilby, e ele recebeu o Prêmio Nobel de Física em 2000 por essa invenção. É interessante notar que, apesar de Kilby ser engenheiro, ele diz em seu discurso quando do recebimento do Prêmio Nobel: *“Fortunately, I also had studied engineering physics, because I felt it might be more useful than knowing how to connect three-phase transformers! Looking back, I am glad I took those physics classes”*.

Para entender o funcionamento desses materiais semicondutores com e sem a presença de impurezas, é necessário conhecer suas estruturas eletrônicas. Ou

seja, é fundamental o entendimento dos níveis de energia desses materiais, e como eles são afetados pela presença de outros átomos. Para tanto é necessário a aplicação da mecânica quântica para a descrição do comportamento dos elétrons. Sem essa compreensão seria impossível o avanço tecnológico. Hoje em dia a diminuição dos transistores nos circuitos integrados levou a um problema importante, que tem uma natureza intrinsecamente quântica, que é o tunelamento de elétrons através da camada do óxido quando ela se torna muito fina. O tunelamento é a passagem de uma partícula por uma região de barreira de potencial que seria proibida na mecânica clássica por conservação de energia. Devido à característica probabilística da mecânica quântica, tal processo é possível. Quanto menor a barreira de potencial, maior a chance da partícula de atravessá-la via efeito túnel. Esse efeito “exótico” da mecânica quântica na verdade é utilizado de forma intencional em alguns tipos de transistores (chamados de transistores de efeito túnel) e em microscópios especiais que permitem visualizar e manipular átomos, os STMs (do inglês *scanning tunneling microscopes*). Leo Esaki recebeu o Prêmio Nobel de Física em 1973 pelos seus estudos sobre o efeito túnel em sólidos, e G. Binnig e H. Rohrer receberam o Prêmio Nobel de Física em 1986 pela invenção do STM. O STM é hoje uma das ferramentas mais importantes para as pesquisas em nanociência. Voltando ao problema do tunelamento em Mosfets, a indústria da eletrônica tem dedicado grande parte de sua pesquisa na investigação de materiais dielétricos alternativos que possam ser mais espessos, mantendo as características operacionais dos dispositivos, mas reduzindo dessa forma o tunelamento.

LASERS E COMUNICAÇÃO

O *laser*, do inglês *light amplification by stimulated emission of radiation*, ou seja, amplificação da luz por emissão estimulada de radiação, teve o conceito básico de sua

operação, a emissão estimulada, investigado por Albert Einstein em 1917. Análises da teoria de Planck para radiação, teoria esta que discute pela primeira vez a idéia de quantização de energia, levou Einstein a concluir que deveria haver um termo adicional de interação da radiação com a matéria que levaria a uma emissão, ou seja, decaimento de um sistema de estados de energia mais altos para níveis de energia mais baixos com geração de radiação eletromagnética para conservar energia, estimulada pela presença de radiação com uma dada frequência. Apesar de interessante, esse efeito não é em geral importante, pois, para que ele seja dominante, precisa-se ter um número grande de elementos do sistema ocupando os estados excitados, ou seja, com uma distribuição de energia invertida em relação ao que se tem normalmente.

Na década de 50, Townes, nos EUA, e Basov e Prochorov, na URSS, de forma independente, conseguiram pela primeira vez explorar essas idéias de emissão estimulada e inversão de população para gerar radiação eletromagnética. Inicialmente a frequência investigada foi na região de microondas, e o nome era Maser trocando-se *light* por *microwave*. Posteriormente esses pesquisadores conseguiram trabalhar na região da luz visível. Por essas contribuições esses três pesquisadores receberam o Prêmio Nobel de Física de 1964. A partir dessas invenções ocorreu um enorme avanço tecnológico com o desenvolvimento de *lasers* operando em diferentes frequências, com diferentes potências, ou de forma contínua ou de forma pulsada, com pulsos hoje em dia ultracurtos, que duram femtosegundos, ou seja, 10^{-15} s. Esses desenvolvimentos permitiram uma série de novas descobertas e investigações nas mais variadas áreas do conhecimento. Claramente todo o processo de absorção e emissão de radiação depende da mecânica quântica para seu correto entendimento.

Entretanto, a maior utilização dos *lasers* hoje em dia está ligada à transmissão de informação via fibras óticas e ao armazenamento e troca de informações via CDs. Nesses casos a emissão de radiação é feita a partir de um dispositivo baseado em

materiais semicondutores, que são as heterojunções semicondutoras. É interessante perceber a junção de áreas inicialmente com características tão distintas, como a física do estado sólido, e a ótica e a fotônica, levando ao desenvolvimento de dispositivos como os *lasers* (e também diodos emissores de luz, ou LEDs) de semicondutores. Esses dispositivos óticos de estado sólido dependem do arranjo artificial de átomos de diferentes tipos em uma estrutura de camadas. Através de um arranjo apropriado, é possível obter propriedades novas com relação tanto à frequência da radiação como a sua intensidade. A invenção desses dispositivos foi reconhecida pelo Prêmio Nobel de Física de 2000 para os pesquisadores Z. I. Alferov e H. Kroemer.

Todo o entendimento do comportamento dessas heteroestruturas semicondutoras depende da mecânica quântica. Sem ela seria impossível prever como seria o funcionamento desses dispositivos, quais e quantas camadas utilizar, etc. Além das aplicações práticas, essa capacidade de criar estruturas artificiais em camadas, através da deposição controlada de átomos, resultou em várias descobertas científicas importantes, como o efeito Hall quântico.

MAGNETISMO E O ARMAZENAMENTO DE INFORMAÇÃO

O magnetismo é uma propriedade conhecida da humanidade há muitos séculos, e uma das primeiras importantes invenções que a utilizaram foi a bússola. Sem ela não teria sido possível a primeira grande interconexão dos seres humanos via as grandes navegações. Entretanto, o entendimento do magnetismo teve de esperar o desenvolvimento da mecânica quântica. Partículas carregadas quando em movimento geram um campo magnético. Esse é um efeito explicado pela teoria clássica do eletromagnetismo. Entretanto, os elétrons possuem

um momento magnético intrínseco, não associado com seu movimento orbital. A maneira como esses momentos magnéticos se alinham em um sólido, resultando eventualmente em uma magnetização total não-nula, só pode ser entendida por meio da mecânica quântica. Teorias clássicas sempre resultam em explicações incorretas. De forma simplificada, a interação coulombiana entre os elétrons, acoplada ao fato de os elétrons não poderem mais ser identificados com precisão absoluta (essa impossibilidade resulta que os elétrons são indistinguíveis uns dos outros de uma maneira intrínseca à natureza, e não devido a uma simples limitação observacional), resulta em uma interação efetiva que leva ao alinhamento de seus momentos magnéticos em alguns casos. Nessas situações temos os chamados materiais ferromagnéticos.

O fato de podermos ter uma magnetização não-nula permanente permite que armazenemos informação na forma de 0 e 1. Se a magnetização aponta em uma direção, por exemplo, chamamos isso de 0, se aponta em outra chamamos de 1. Esse é o princípio básico dos discos rígidos utilizados em computadores, bem como em várias outras formas de armazenamento magnético de informação. É interessante notar que um dos grandes avanços recentes nessa área está também acoplado à possibilidade de criação de heteroestruturas artificiais de átomos. Quando se acoplam camadas apropriadas de materiais magnéticos intercalados com camadas de materiais não-magnéticos, as propriedades de transporte de corrente através dessa estrutura dependem da direção do momento magnético dos elétrons. Basicamente, a resistência à passagem da corrente depende da orientação relativa dos momentos magnéticos dos elétrons condutores e das camadas magnéticas. Isso resulta em uma enorme sensibilidade, e possibilita o projeto de cabeças de leitura ultra-sensíveis. Com isso o tamanho da região no disco magnético que armazena a informação pode ser reduzido, e a quantidade de material armazenado por unidade de área aumenta significativamente. A importância desse efeito, conhecido como magnetorresistên-

cia gigante, foi reconhecida com o Prêmio Nobel de 2007, outorgado aos pesquisadores P. Grünberg e A. Fert. Além de permitir uma maior densidade de armazenamento de informação, esse efeito de variação da resistência com a orientação dos momentos magnéticos tem aberto perspectivas na área de processamento de informação, com projetos de dispositivos que operam utilizando não a carga como elemento fundamental, mas sim o momento magnético. Essa área recebe o nome de spintrônica.

MAGNETISMO NOS NÚCLEOS E A MEDICINA

Não somente os elétrons possuem um momento magnético intrínseco, mas também os prótons e nêutrons. Dependendo do número desses prótons e nêutrons em um núcleo, ele também possuirá um momento magnético intrínseco não-nulo. Poderíamos então falar em um magnetismo nuclear! Entretanto, seus efeitos não se manifestam macroscopicamente devido à manifestação dominante dos elétrons (o momento magnético intrínseco depende do inverso da massa da partícula, e um próton e nêutron são aproximadamente 2.000 vezes mais massivos que um elétron). Entretanto, é possível interagir com esses momentos magnéticos. A maneira é utilizar campos magnéticos e elétricos externos de maneira apropriada a entrar em ressonância somente com transições associadas aos níveis de energia nucleares. Pelas suas experiências decisivas nessa área, I. Rabi recebeu o Prêmio Nobel de Física de 1944.

Entretanto, as experiências de Rabi foram feitas com átomos isolados. Um grande avanço foi feito por F. Bloch e E. M. Purcell, que demonstraram ser possível utilizar essa técnica de ressonância para núcleos em sólidos e líquidos. Por suas contribuições eles também receberam o Prêmio Nobel de Física em 1952. Mais uma vez esses efeitos têm uma natureza intrinsecamente quântica, tanto na explicação do momento magnético

intrínseco das partículas, como na descrição do espectro discreto de energia, bem como na maneira que as transições entre esses níveis de energia ocorrem. A utilização desses princípios é mais conhecida pelas suas aplicações na medicina, em que imagens de tecidos do corpo podem ser feitas com grande precisão através da técnica de tomografia de ressonância magnética nuclear. Através de campos magnéticos intensos e com variações espaciais apropriadas, é possível “entrar em ressonância” com os núcleos (de hidrogênio, em geral) de particulares fatias de um determinado órgão. Utilizando técnicas sofisticadas de tratamento e análise de sinais, é possível criar imagens tridimensionais de regiões do corpo humano, o que tem sido fundamental na área de diagnóstico médico.

É interessante mencionar que uma outra técnica para gerar imagens, muito utilizada para diagnósticos na medicina, depende de uma outra propriedade explicada pela mecânica quântica. É a tomografia por emissão de pósitrons. Um material apropriado, que é instável e decai emitindo pósitrons, é inserido no organismo. Os pósitrons são as antipartículas dos elétrons, e podem se combinar com eles através de um processo chamado de aniquilação partícula-antipartícula. Nesse processo, as duas partículas “desaparecem” e energia é emitida na forma de raios gama (radiação eletromagnética de alta energia). A detecção dessa radiação permite a geração de imagens. Todos esses processos envolvidos só são explicados pela mecânica quântica. Na verdade, a existência de antipartículas foi pela primeira vez prevista teoricamente por P. Dirac através das soluções de sua equação relativística para a mecânica quântica.

O FUTURO

Como foi visto até agora, a mecânica quântica, que é a teoria fundamental que descreve o comportamento das partículas no nível atômico, é hoje largamente utilizada no projeto e desenvolvimento de um sem-

número de aplicações tecnológicas que são a base da nossa sociedade moderna. Toda a indústria de informática, transmissão e armazenamento de informação, depende hoje, de uma forma ou de outra, de conhecimentos advindos da mecânica quântica. Investigações científicas, que no início tinham o objetivo de elucidar as questões mais fundamentais da natureza, hoje são a base da alta tecnologia. Isso demonstra que a geração de riqueza está de forma intrínseca associada ao conhecimento básico. O caminho que leva de um à outra não é simples e linear, mas é claro que um país que não investe em ciência básica e formação de pessoal qualificado, com conhecimento científico moderno e aprofundado, não consegue competir no mundo moderno.

O futuro das aplicações da mecânica quântica em alta tecnologia é altamente promissor. As áreas de nanociência e nanotecnologia estão produzindo materiais e dispositivos que existem em uma escala de tamanho em que efeitos quânticos dominam. A engenharia nessa escala dependerá de um profundo conhecimento da mecânica quântica, e os cursos de engenharia terão de se adaptar. Talvez uma das maiores revoluções tecnológicas que estão por vir, e que está diretamente ligada aos princípios básicos da mecânica quântica, será a forma como fazemos processamento de informação. Desde os primeiros computadores a lógica que é empregada utiliza um sistema binário, de zeros e uns. A combinação apropriada desses números permite o armazenamento e o processamento da informação. Todos os dispositivos, apesar de utilizarem a mecânica quântica em seu funcionamento, empregam essa lógica binária. Entretanto, a chamada computação quântica poderá resultar em uma total mudança de paradigma. Nesse caso o próprio processamento da informação utilizará os princípios da mecânica quântica, através de um fenômeno exótico chamado de emaranhamento quântico. A grande dificuldade hoje está em se encontrar um sistema apropriado para ser a base dessa nova computação. Mas a história mostra que a criatividade humana sempre consegue suplantar as dificuldades tecnológicas.