

.....
Belita Koiller

Instituto de Física, Universidade
 Federal do Rio de Janeiro
 e-mail: bk@if.ufrj.br

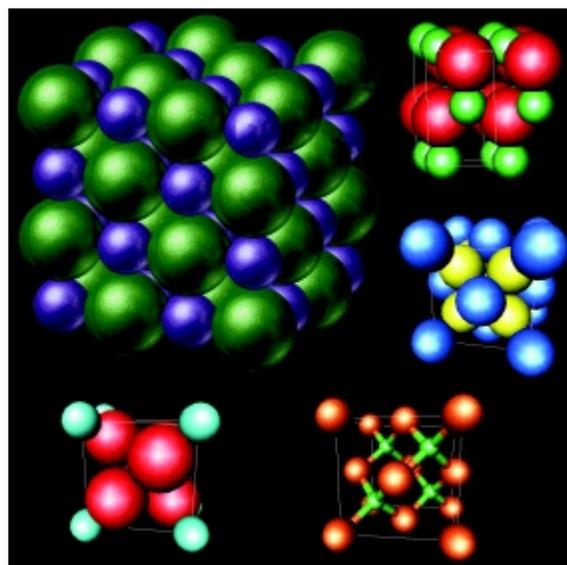
A organização dos átomos na formação do estado sólido dos materiais tem conseqüências importantes nas propriedades eletrônicas dos mesmos. O entendimento microscópico da estrutura da matéria é relativamente recente. Há séculos cientistas reconheceram que a matéria não é um contínuo sucessivamente divisível, mas sim constituída de átomos. Uma das evidências deste conhecimento foi a publicação, já em 1822, de um tratado de cristalografia. As formas facetadas dos diferentes cristais, com planos de lapidação preferenciais, permitiu a classificação dos mesmos segundo o posicionamento periódico dos átomos em estruturas geométricas regulares chamadas redes cristalinas.

Em 1869, o cientista russo Mendeleev organizou todas as espécies atômicas até então identificadas em uma tabela com linhas em ordem crescente de massa e na qual elementos em uma mesma coluna têm propriedades químicas semelhantes. Esta organização dos átomos constitui a moderna Tabela Periódica dos Elementos, e sua concepção por Mendeleev deu início à química moderna.

O início da física moderna pode ser atribuído à descoberta, em 1897, da primeira partícula sub-atômica: o elétron. Estudos visando o entendimento microscópico do comportamento dos elétrons em sólidos abriram novas áreas da física básica. Abriam ainda a possibilidade de controle dos elétrons em diferentes materiais, levando a engenhosas invenções e à fabricação dos aparelhos eletrônicos que tanto impactam o nosso dia-a-dia. Neste artigo assinalamos as principais etapas destes desenvolvimentos básicos, bem como algumas aplicações e perspectivas futuras.

da condução de eletricidade pelos metais. Thomson realizou experimentos em um tubo de raios catódicos: raios emitidos por um filamento metálico aquecido semelhante ao de uma lâmpada incandescente, e acelerados por uma grade mantida a um potencial inferior ao do filamento emissor, demonstrando que estes raios eram constituídos de partículas (os elétrons) de carga negativa. Por sua descoberta, Thomson recebeu o Prêmio Nobel de Física em 1906.

Vários modelos atômicos microscópicos se sucederam imediatamente, dos quais citamos i) o de Rutherford (1911), consistindo um sistema solar em miniatura, com os elétrons orbitando em torno de um núcleo maciço central; ii) o de Bohr (1913), restringindo as órbitas do modelo de Rutherford a alguns poucas segundo critérios de quantização; e iii) o de Schrödinger (1925), abandonando a



Diferentes tipos de arranjos periódicos de átomos formando estruturas cristalinas.

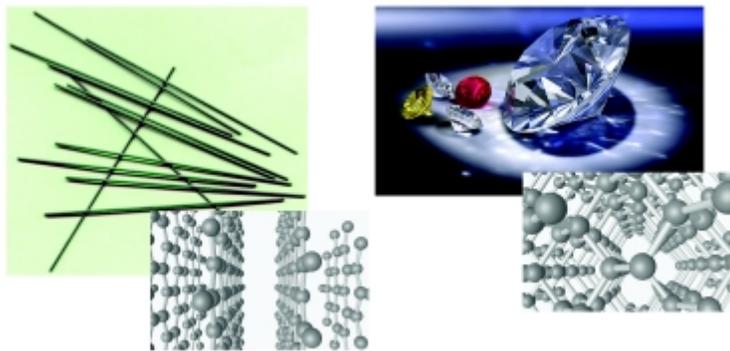
idéia de órbita e adotando a interpretação probabilística da mecânica quântica. Elétrons em átomos, moléculas e sólidos não seguem as leis de Newton da mecânica clássica, mas as leis da mecânica microscópica, ou mecânica quântica. Os trabalhos de Bohr e de Schrödinger, marcos iniciais do sucesso da mecânica quântica, foram também reconhecidos com o Prêmio Nobel em 1922 e 1933, respectivamente.

Evidências experimentais concretas dos arranjos atômicos periódicos no estado sólido foram conseguidas por Davisson e Germer (1927) através de uma técnica de microscopia desenvolvida por eles que utiliza a transmissão de elétrons em vez de luz através do cristal. Este efeito é possível devido ao comportamento ondulatório (quântico) dos elétrons, previsto por de Broglie, o que permite a fabricação dos microscópios eletrônicos, aperfeiçoados e utilizados até hoje. Por seus trabalhos, de Broglie recebeu o Prêmio Nobel em 1929, e Davisson e Germer em 1937. Outro efeito quântico engenhosamente explorado para a fabricação de microscópios poderosos, neste caso permitindo a visualização em escala atômica, é o Efeito Túnel, que consiste na possibilidade de propagação de um elétron através de regiões inacessíveis pelas leis da mecânica clássica. Em 1981, Binnig e Rohrer inventaram o microscópio de varredura por tunelamento (STM), dispositivo que fornece imagens reais da disposição atômica em superfícies de sólidos. Por esta invenção, estes dois pesquisadores receberam o Prêmio Nobel em 1986.

De acordo com o comportamento no transporte de corrente elétrica, os sólidos podem ser classificados em condutores, isolantes ou semicondutores. Com relação à tabela periódica de Mendeleev, os condutores tendem a ocupar a região à esquerda da tabela, e os isolantes à direita, ficando os semicondutores na região de fronteira. Infelizmente, uma tentativa de classi-

A existência de uma banda parcialmente ocupada garante o comportamento metálico do sólido. Os isolantes e semicondutores correspondem à presença exclusiva de bandas totalmente ocupadas ou desocupadas

O grafite (à esquerda) é constituído, em escala microscópica, de átomos de carbono ordenados em estrutura hexagonal. Os mesmos átomos de carbono, ordenados em estrutura cúbica, constituem o diamante (à direita).



ficar os sólidos em qualquer tipo de tabela periódica fracassaria, devido à relevância da disposição espacial dos átomos em redes cristalinas. Um exemplo bem conhecido é o caso do carbono no estado sólido: se o arranjo atômico é cúbico, resulta o diamante, enquanto que se o arranjo é hexagonal, resulta o grafite! Em 1955, Bundy e colaboradores realizaram um velho sonho dos alquimistas, submetendo uma amostra de grafite a condições extremas de temperatura e pressão, transformando-a em diamante. Atualmente, várias outras formas do carbono foram identificadas, como por exemplo os nanotubos de carbono.

Um dos sucessos iniciais da mecânica quântica foi a explicação por Bloch, Peierls e Wilson, em 1930, da razão para a diferença notável no transporte de corrente elétrica entre metais e não-metais. As seguintes características do comportamento quântico determinam as propriedades de transporte de elétrons em sólidos cristalinos:

- Os elétrons são partículas caracterizadas pela carga e , massa m (como as da partícula clássica) e *spin*. O *spin* é um fenômeno puramente quântico, vagamente semelhante à rotação de um pião. A medida do *spin* do elétron fornece um entre dois valores possíveis: $\sigma = \uparrow$ ou $\sigma = \downarrow$ que correspondem, na analogia com o pião, à rotação do mesmo no sentido horário ou

anti-horário.

- A energia dos elétrons tem seus valores restritos a faixas (ou bandas) permitidas intercaladas por faixas proibidas. As faixas proibidas denominam-se *gaps* de energia.

- A cada valor permitido da energia está associado um vetor \mathbf{k} e um índice de banda n . O índice de banda indica o ordenamento das diferentes energias associadas a um dado \mathbf{k} : as energias permitidas são denominadas $E_n(\mathbf{k})$ e o estado do elétron com esta energia e *spin* σ é denotado por $|n, \mathbf{k}, \sigma\rangle$.

- Cada estado $|n, \mathbf{k}, \sigma\rangle$ pode estar ocupado por, no máximo, um elétron. Esta é a expressão do Princípio da Exclusão de Pauli, outro fenômeno puramente quântico.

Do ponto de vista dos elétrons, o estado fundamental de um sólido, correspondente à situação de mais baixa energia total (temperatura $T = 0$ K), é obtido ocupando sucessivamente os estados $|n, \mathbf{k}, \sigma\rangle$ em ordem crescente de energia, até que todos os elétrons do sólido estejam acomodados. Desta forma as bandas de energia mais baixa estarão ocupadas, as de energia mais alta estarão desocupadas. Eventualmente existirão bandas parcialmente ocupadas; a existência de uma banda parcialmente ocupada garante o comportamento metálico do sólido.

Em 1911 foi descoberto um novo estado dos elétrons em condutores quando resfriados a baixíssimas temperaturas: o estado superconductor. Seu descobridor, Kamerling Onnes, recebeu o Prêmio Nobel de Física em 1913. A supercondutividade se estabelece a partir de uma temperatura crí-

tica T_c que varia de material para material. Por exemplo, no caso do mercúrio, $T_c = 4$ K, enquanto que $T_c = 7$ K para o chumbo. O estado supercondutor é caracterizado pela resistência elétrica nula do material para temperaturas abaixo de T_c e não pode ser descrito no contexto individual de cada elétron: trata-se de um fenômeno coletivo dos elétrons no ambiente da rede cristalina. Outra característica deste estado é a repulsão do supercondutor por um campo magnético aplicado. A supercondutividade continua sendo um dos aspectos mais estudados do comportamento de sólidos, tendo a descoberta dos “supercondutores de alta temperatura” em 1987 (T_c da ordem de 100 K) reavivado o interesse neste fenômeno.

Os isolantes e semicondutores correspondem à presença exclusiva de bandas totalmente ocupadas ou desocupadas. A separação em energia entre o último estado ocupado e o primeiro desocupado constitui uma faixa proibida, ou *gap*, caracterizada pela energia E_{gap} . Se o valor deste *gap* de energia for grande comparado às energias térmicas disponíveis, resulta um comportamento isolante, enquanto que se E_{gap} for da ordem da energia térmica no ambiente do sistema (esta energia é $E_{term} = k_B T$, $k_B = 1,38 \times 10^{-5}$ eV/K é a constante de Boltzmann e T a temperatura), obtém-se o comportamento semicon-

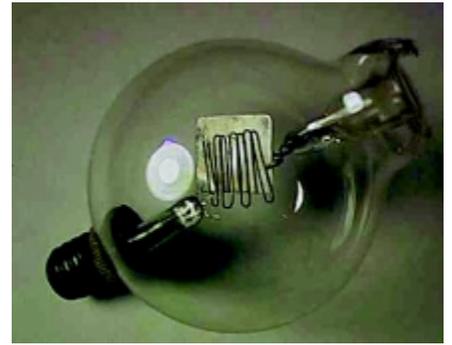


Uma pastilha no estado supercondutor levita acima de uma bobina ao ser repelida pelo campo magnético gerado pela bobina. A supercondutividade é um fenômeno coletivo dos elétrons no ambiente da rede cristalina.

ductor. Na prática, são considerados semicondutores materiais com E_{gap} até 2 eV.

Em 1906, De Forest inventou um dispositivo denominado válvula triodo, que é semelhante ao tubo de raios catódicos de Thomson: elétrons emitidos por um filamento são acelerados ou freados pelo potencial de uma grade de controle. Neste caso os elétrons que atravessam a grade são recolhidos por um dreno, fechando um circuito elétrico. A ação deste dispositivo é de *controlar* uma resposta relativamente forte – a corrente colhida pelo dreno – através de um sinal relativamente fraco – a tensão aplicada à grade. A válvula constitui portanto um **amplificador** de sinal elétrico, tendo sido utilizada em vários aparelhos elétricos como os amplificadores de som e as primeiras televisões. O primeiro computador eletrônico digital, denominado ENIAC (Electronic Numerical Integrator and Computer), também utilizava válvulas. As válvulas apresentam limitações severas: os feixes de elétrons transitam em tubos de vidro que são volumosos e frágeis, além das altas temperaturas requeridas para que os filamentos metálicos emitam os elétrons, gerando forte aquecimento e dissipação de energia. Outro grave inconveniente é sua curta vida útil, comparável à de uma lâmpada incandescente. O enorme sucesso e a rápida proliferação de aplicações desta invenção demandou portanto a substituição das válvulas por dispositivos de estado sólido: o *habitat* robusto e natural para os elétrons.

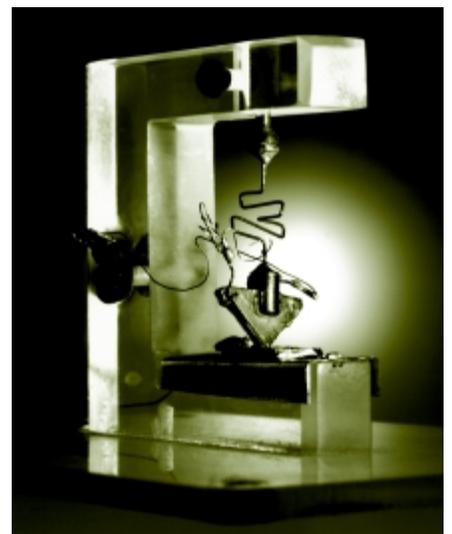
O substituto da válvula triodo de De Forest foi desenvolvido pelos pesquisadores Shockley, Bardeen e Brattain nos laboratórios da Bell Telephone em 1947. Eles receberam o Prêmio Nobel de Física em 1956 pela invenção do *transistor*. Trata-se de um dispositivo semiconductor, que se baseia no fato de que a substituição de uma pequena fração dos átomos de um material semiconductor, como o silício, por outra espécie atômica, como o fósforo, aumenta significativamente sua condutividade elétrica. A substituição de átomos de um semiconductor por outros, visando alterar



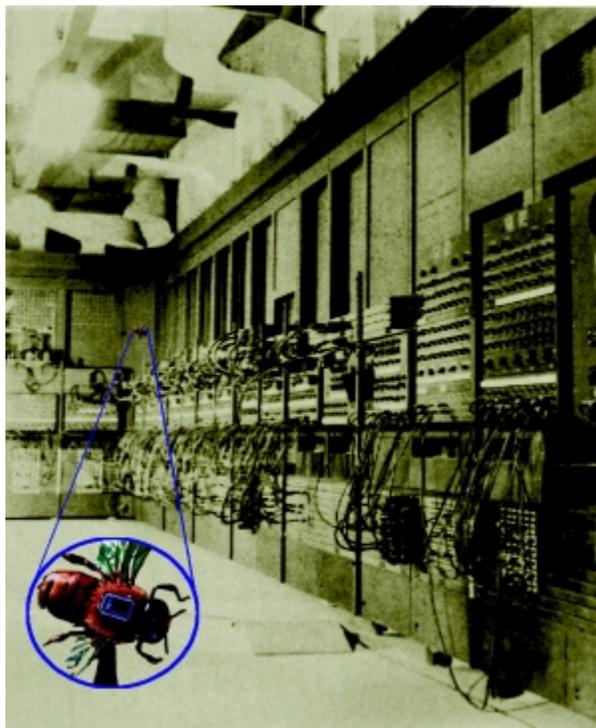
A válvula apresenta limitações severas: é volumosa, frágil, dissipa energia gerando calor e tem vida útil relativamente curta.

suas propriedades de transporte elétrico, é denominada *dopagem*. Através de diferentes dopantes, é possível produzir semicondutores onde o transporte de corrente é realizado por portadores de carga negativa ou positiva, e cuja densidade também pode variar de acordo com a concentração dos mesmos. Nas aplicações em dispositivos semicondutores, a dopagem envolve tipicamente a substituição aleatória de um para cada milhão de átomos no semiconductor.

O controle de sinais elétricos por transistores permite sua aplicação tanto em circuitos amplificadores quanto em circuitos lógicos. No caso de operações lógicas, o transistor funciona como uma chave, que abre e fecha um circuito elétrico fornecendo os bits 0 ou 1 conforme os sinais recebidos. Os *chips* dos computadores modernos são circuitos integrados (CI),



O primeiro transistor, protótipo montado em 1947 por Shockley, Bardeen e Brattain.



Sessenta anos da nossa aventura tecnológica: do Eniac (1946), com 17.468 válvulas, 500.000 conexões de solda, 30 toneladas de peso abrigadas em 180 m² de área construída, com 5,5 m de altura, 25 m de comprimento aos modernos chips com 42 milhões de transistores.

isto é, fabricados em um único “bloco” de silício e contendo dezenas de milhões de transistores. O primeiro CI foi fabricado por J. Kilby em 1958, tendo viabilizado a produção de calculadoras de bolso a partir de 1966. Pela invenção do CI, Kilby recebeu o Prêmio Nobel de Física no ano 2000. Atualmente a operação de cada transistor como uma chave lógica envolve uma corrente elétrica produzida por cerca de 1000 elétrons. Já foi demonstrado que é possível fabricar um transistor (SET) cujo chaveamento envolve a passagem de um único elétron.

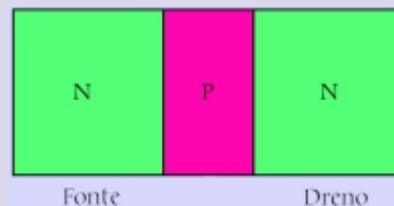
O vigoroso crescimento da microeletrônica é muitas vezes quantificado pela “lei” de Moore, que estabelece que o número de componentes em um único *chip* duplica a cada 18 meses. Embora esta tendência, enunciada em 1965, continue verdadeira no início do século XXI, fatalmente ela se esgotará quando o tamanho de componentes individuais nos *chips* se aproximar das dimensões atômicas: este será o fim da linha para dispositivos de Si baseados em sucessivos aprimoramentos e ajustes das concepções atuais. Os processos eletrônicos

envolvidos nos componentes semicondutores em uso exploram as propriedades quânticas dos elétrons, porém os sinais aplicados e medidos – tensões e correntes – são clássicos, semelhantes aos análogos nas válvulas que os precederam. Para *bits* constituídos de um único átomo, os efeitos quânticos se manifestam em todas as etapas do processamento. A manipulação controlada de estados de vários *bits* quânticos, ou *qbits*, é alvo de intensas pesquisas atualmente em desenvolvimento, inclusive no Brasil. Espera-se que uma nova geração de componentes eletrônicos opere em regime inteiramente quântico, levando ao desenvolvimento de transistores e outros dispositivos

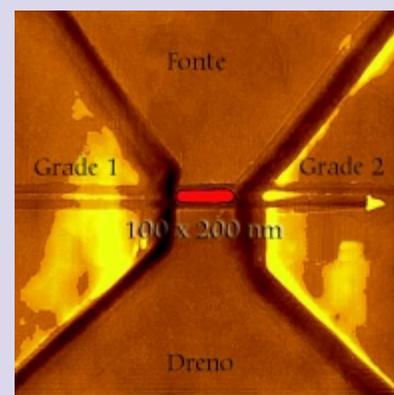
mais complexos tais como computadores quânticos.

A computação quântica pode revolucionar a solução de alguns tipos de problemas numéricos. Propostas de computadores quânticos baseados em semicondutores vêm despertando grande interesse devido à possibilidade de utilização dos recursos disponíveis associados com a infra-estrutura tecnológica já existente, bem como pela possibilidade de integração com os dispositivos convencionais. Tentativas de nano-fabricação de tais dispositivos baseados em silício e arseneto de gálio encontram-se em andamento, porém a possibilidade de controle das diversas operações necessárias ao funcionamento destes e de outros tipos de computadores quânticos permanece um desafio em aberto. Segundo Bruce Kane, que formulou em 1998 uma proposta de computador quântico baseado em silício, as flutuações inerentes a semicondutores dopados limita o desempenho da computação quântica, que poderá só ser acessível no limite extremo da lei de Moore: quando a engenharia de fabricação de

Rumo ao futuro: o transistor de um elétron



Um transistor consiste na justaposição de camadas de semicondutores com diferentes tipos de dopagem. A operação de cada transistor como uma chave lógica envolve a passagem de cerca de mil elétrons entre a fonte e o dreno.



Protótipo de um SET (single electron transistor) fabricado por H.W. Schumacher em 1999. O chaveamento do SET envolve a passagem de um único elétron.

dispositivos atingir o nível de controle individual: átomo-por-átomo. Concluimos este trabalho lembrando sábias palavras a respeito dos átomos:

Se, em algum cataclisma, todo o conhecimento científico fosse destruído, e uma única frase passasse para a próxima geração de criaturas, que frase conteria mais informação no menor número de palavras? Acredito que seja a hipótese atômica, o fato de que todas as coisas são feitas de átomos – pequenas partículas em movimento perpétuo, que se atraem quando estão próximas, mas que se repelem quando pressionadas entre si. Nesta frase existe uma enorme quantidade de informação sobre o mundo, se um pouco de imaginação e pensamento forem aplicados.

R.P. Feynman
The Feynman Lectures
on Physics