3 Autômatos Celulares com Pontos Quânticos (QCA)

3.1. Introdução

Este capítulo apresenta o paradigma de Autômatos Celulares com Pontos Quânticos (QCA), descrevendo como as células de QCA funcionam e interagem entre si e qual a função do *clock* na formação dos circuitos de QCA. Além disso, os dispositivos básicos de QCA serão explicados em detalhes e os circuitos lógicos previamente desenvolvidos serão apresentados. É importante salientar que neste trabalho será assumido que todos os problemas práticos de fabricação podem eventualmente ser resolvidos, permitindo explorar todas as potencialidades dessa nova tecnologia.

3.2. Princípios dos Dispositivos

No paradigma de QCA os dispositivos são compostos por células, cada uma contendo um número de pontos quânticos. Um ponto, neste caso, é apenas uma região fixa no espaço onde a carga elétrica pode ou não estar localizada. O diagrama básico de uma célula é mostrado na figura 1, consistindo de quatro pontos quânticos posicionados nos cantos da célula. Cada célula possui dois elétrons livres e móveis (representados pelo círculo escuro), que podem tunelar entre os vários pontos quânticos posicionados em seu interior. A carga positiva (1/2 Coulomb por ponto quântico) que compensa as cargas negativas dos elétrons é fixa e imóvel [46]. Assume-se que o tunelamento para o exterior da célula é totalmente proibido, devido à grande barreira de potencial existente.

Se considerarmos possível controlar o tunelamento entre os pontos quânticos de uma célula e, se em um dado momento este tunelamento estiver proibido, os elétrons estarão bem localizados. A repulsão Coulombiana entre os elétrons tende a posicioná-los em diagonais opostas, como mostrado na figura 3. Portanto, uma célula isolada tem dois estados equivalentes de energia. Estes

estados são denominados de *polarização de célula* P = +1 e P = -1. O termo *polarização de célula* refere-se ao arranjo das cargas no interior da célula de QCA. Logo, pode-se codificar informação binária, onde P = +1 representa o dígito binário 1 e P = -1 representa o dígito binário 0.



Figura 3– Diagrama de uma célula de QCA com quatro pontos quânticos em seus dois possíveis estados de polarização.

Se duas células forem posicionadas lado a lado, sendo que a polarização de uma delas seja fixa, os dois estados de polarização possíveis da outra célula não serão equivalentes em termos de energia. Considere o exemplo mostrado na figura 4, onde assume-se que a célula 2 possui polarização fixa em $P_2 = -1$. Logo, esta distribuição das cargas na célula 2 tende a influenciar a distribuição das cargas na célula 1, sendo então responsável pela polarização da célula 1 (P₁). Assim, a célula 1 tende a ter a mesma polarização que a célula 2, o que diminui a energia da interação Coulombiana entre todos os elétrons envolvidos. É essencial observar, no gráfico da figura 4, a forte natureza não-linear da interação entre as células. Uma pequena assimetria das cargas na célula 2 já é suficiente para influenciar fortemente a polarização da célula 1.



Figura 4– Interação não-linear entre as células de QCA. A polarização da célula 2 é fixa e influencia a polarização da célula 1.

A seguir será introduzido o conceito de "kink energy" $(E_{i,j}^k)$ que representa o custo de energia das células i e j terem polarizações opostas. Isto é obtido calculando, simplesmente, a interação eletrostática entre todas as cargas das diferentes células. Logo, para cada ponto da célula i calcula-se a interação entre este ponto e todos os pontos da célula j, utilizando a eq. (2) abaixo,

$$E_{i,j} = k \frac{q_i q_j}{\left| r_i - r_j \right|} \tag{2}$$

onde k é uma constante que depende do material utilizado, $q_i e q_j$ são as cargas dos pontos i e j, respectivamente, e $r_i - r_j$ é a distância entre esses dois pontos..

Para encontrar a *"kink energy*", primeiramente calcula-se a interação eletrostática quando as células possuem polarizações opostas, em seguida calcula-se novamente para quando elas têm polarizações semelhantes e então subtrai os dois valores.

O exemplo abaixo calcula a "*kink energy*" para o caso onde existem duas células posicionadas lado a lado. Para efeito de simplificação, vamos considerar que a distância entre dois pontos adjacentes seja igual a 1 u.m., a carga negativa dos pontos onde existe um elétron seja igual a -1 e a carga positiva dos pontos onde não existe um elétron seja igual a +1. O esquema das duas células tendo polarizações semelhantes e polarizações opostas está ilustrado na figura 5.



Figura 5– Duas células lado a lado com polarizações semelhantes e com polarizações opostas.

Primeiramente, calcula-se a interação eletrostática entre o ponto 1 e todos os outros pontos da outra célula, a seguir faz-se o mesmo com o ponto 2 e assim sucessivamente até o ponto 4.

Abaixo está o cálculo da interação eletrostática para o caso das células com polarizações opostas.

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

Portanto, $E_1 = 0,41k$. Observe que para calcular a interação eletrostática para o caso onde as duas células têm mesma polarização, muda-se o sinal de todos os termos da direita da equação acima, devido à mudança de posição do elétrons dentro de uma das duas células. Logo, $E_2 = -0,41k$ e a "*kink energy*" entre estas duas células é igual a 0,82k. Este fato explica a razão pela qual as duas células da figura 4 tendem a ter a mesma polarização, isto minimiza a interação coulombina entre elas.

Sem entrar em detalhes sobre a fabricação dos circuitos de QCA (mais à frente mostraremos algumas das alternativas de fabricação) vamos rapidamente entrar na questão de entrada e saída destes circuitos. Inserir uma entrada em um circuito de QCA requer determinar o estado de polarização da célula de entrada. Isto pode ser facilmente obtido utilizando condutores para repelir os elétrons de um ponto quântico e atraí-los para outro ponto quântico. Em pontos quânticos feitos de semicondutores, por exemplo, está é uma técnica experimental conhecida como *"plunger electrode"* e altera a ocupação dos elétrons em um determinado ponto quântico[47][48]. Por outro lado, ler um estado de saída é mais difícil. Para isto é necessário sentir a carga dos pontos quânticos de uma célula de saída sem que este processo de medida altere o estado de polarização desta célula ou de uma célula vizinha. Para que estas medidas sejam feitas, *electrometers* feitos de contatos balísticos em ponta e, até mesmo, de pontos quânticos já foram demostrados [49].

Portanto, os circuitos de QCA funcionam porque a topologia das células de pontos quânticos fornece uma relação entre o problema físico de busca de um estado de energia estável (ou meta-estável) das células e o problema computacional de encontrar a lógica desejada. Os dispositivos lógicos básicos apresentados a seguir exemplificam essa relação entre o problema físico e o problema computacional.

3.3. Dispositivos Lógicos Básicos

Com o intuito de criar os dispositivos de QCA, as células devem ser posicionadas de maneira a aproveitar a interação entre elas, levando à lógica desejada. A seguir, os dispositivos básicos de QCA são apresentados e detalhados.

O dispositivo de QCA mais simples é o fio de QCA, mostrado na figura 6. A célula posicionada mais à esquerda representa a entrada do circuito e sua polarização é fixa. No estado de menor energia, todas as células posicionadas em linha terão a mesma polarização da célula de entrada. Assim, a polarização da célula de entrada se propaga ao longo do fio sem a necessidade de fluxo de corrente elétrica. Isso ocorre devido à interação coulombiana entre as células vizinhas, como pode ser observado na região marcada entre as duas células mais a esquerda. Se essas duas células não possuíssem a mesma polarização, a energia de repulsão entre seus elétrons seria muito forte, como já explicado anteriormente.

Interação coulombiana



Figura 6– Um fio de QCA.

Quando as células são posicionadas em diagonal umas das outras, tendem a ter polarizações invertidas. Essa característica é utilizada para a construção de um inversor, como o mostrado na figura 7. Esta inversão de polarização é devida à repulsão entre os elétrons. Assim como no caso do fio, a figura 7 destaca a região de interação entre os elétrons de células diferentes, neste caso, nas diagonais.



Figura 7– O inversor de QCA.

O *fan-out* de um sinal é ilustrado na figura 8. Observe que, mesmo a célula 2 estando em diagonal com as células 4 e 6, essas duas últimas tendem a ter a mesma polarização da célula de entrada, mais à esquerda. Isso se deve à interação mais forte, por estar lado a lado, entre as células 3 e 4 e entre as células 3 e 6. Como a célula 3 tende a ter a mesma polarização da célula de entrada, ela transfere essa polarização para as células posicionadas na vertical da figura.



Figura 8– O a distribuição de sinal em um circuito de QCA.

O dispositivo lógico básico em QCA é um *majority gate* de três entradas apresentado na figura 9. A célula central tem sua energia mais baixa quando assume a polarização da maioria das três células de entrada, porque esta é a configuração onde a repulsão entre os elétrons das três células de entrada e da célula central é menor. A saída desse dispositivo pode ser conectada a um fio pela célula de saída. Observe na figura 9 que, mesmo a célula de entrada A estando na polarização que representa o binário 0, a célula central tem a mesma polarização das células de entrada B e C.



Figura 9– O *Majority Gate* e como ele pode ser usado para implementar as portas lógicas E e OU.

Observe também, na figura 9, que se a célula de entrada A é fixada na polarização que representa o binário 0, tem-se uma porta lógica E de duas entradas (entradas B e C). Da mesma forma, se a célula for fixada com o binário 1, tem-se uma porta lógica OU.

3.4. Células Rotacionadas e Circuitos em um Plano

Os circuitos de QCA possuem a vantagem adicional de poderem ser construídos em um plano. Para que isso seja possível é necessário introduzir o conceito de células rotacionadas. A grande diferença entre essas células e as células tradicionais, apresentadas anteriormente, é que as primeiras tem seus pontos quânticos rotacionados em 45° em relação aos pontos quânticos das últimas. Diferentemente das células tradicionais, as células rotacionadas tendem a inverter suas polarizações quando colocadas lado a lado. Conforme explicado no item 3.2, a *"kink energy"* de duas células rotacionadas posicionadas lado a lado é de -1,25k, ou seja, a interação eletrostática quando as células possuem polarizações diferentes é de -0,625k e de 0.625k quando possuem a mesma polarização. Logo, células com polarizações opostas têm energia de interação menor. A figura 10 mostra um fio de QCA com células rotacionadas.



Figura 10- Um fio de células rotacionadas.

O cruzamento de informação no plano só ocorre porque duas células lado a lado, sendo uma rotacionada e outra tradicional, possuem uma interação eletrostática nula entre elas, ou seja, a *"kink energy"* é igual a zero. Isto é facilmente observado devido ao posicionamento dos elétrons na figura 11. Logo, em ambas as células, os dois possíveis estados de energia serão equivalentes, conforme pode-se ver na figura 11. Assim, se um fio de células rotacionadas cruzar um fio de células tradicionais não haverá interferência entre eles, logo a informação será transmitida independentemente nos dois fios, conforme mostra a figura 12.



Figura 11– Interação coulombiana entre uma célula tradicional e uma rotacionada.



Figura 12- Cruzamento de informações em um plano.

3.5. Zonas de *Clock*

Nos circuitos CMOS tradicionais o *clock* possui duas fases: alto e baixo. Neste caso, o *clock* é simplesmente considerado como um sinal que controla o tempo em que os dados serão transferidos. Em circuitos QCA, o *clock* não é tratado como um sinal igual aos outros, mas é visto como um campo elétrico que controla as barreiras de tunelamento dentro de uma célula, controlando quando uma célula pode ou não estar polarizada. Neste caso o *clock* é utilizado para sincronizar a informação, evitando que um sinal atinja uma porta lógica e se propague antes que outros sinais de entrada atinjam a porta.

O *clock* de QCA foi definido por Lent [3] como tendo quatro fases, conforme mostrado na figura 13. Considera-se que cada fase esteja deslocada de 90° uma das outras. Na primeira fase, chamada de *switch*, as células de QCA começam despolarizadas com o potencial das barreiras de tunelamento, entre os pontos quânticos, baixo. Durante esta fase as barreiras são aumentadas, progressivamente, e as células começam a se polarizar de acordo com o estado dos seus *drivers* (i.e. suas células de entrada). É nesta fase que ocorre a computação. Ao final desta fase, as barreiras estão elevadas o suficiente para

evitar o tunelamento de qualquer elétron e os estados das células estão fixos. Durante a segunda fase de *clock*, conhecida como *hold*, as barreiras são mantidas elevadas, assim as células dessa fase possuem estados fixos e podem ser usadas como entradas para o próximo estágio. Na terceira fase de *clock*, *release*, as barreiras são abaixadas e as células são permitidas a relaxar para um estado despolarizado. Finalmente, durante a última fase de *clock*, chamada de *relax*, as barreiras das células são mantidas baixas e as células despolarizadas.



Figura 13– As quatro fases de clock em QCA.

Um conjunto de células de QCA pode estar divididos em zonas, o que permite o *clock* de grupos de células. Para cada zona, um único potencial pode modular as barreiras entre os pontos quânticos. O esquema de zonas de *clock* permite que um aglomerado de células de QCA faça um certo cálculo, tenha seus estados congelados e então tenha a sua saída como entrada da zona de *clock* seguinte.

O exemplo a seguir mostra como funciona as zonas de *clock* e como elas sincronizam a informação. O *majority gate* da figura 14 possui apenas uma zona de *clock*. Neste caso, o sinal da entrada B está mais próximo da célula central e a atingirá antes da chegada dos outros sinais. Com isso, o sinal da entrada B se propagará para a saída independentemente do valor das outras entradas. Obviamente o circuito apresentado não funciona com a lógica correta.



Figura 14- Majority Gate incorreto.

Ao contrário do circuito acima, o *majority gate* abaixo possui três zonas de *clock*, representadas pelos tons de cinza, que sincronizam os sinais das três entradas, fazendo com que elas cheguem à célula central ao mesmo instante, realizando a lógica correta.



Figura 15– *Majority Gate* com as zonas de *clock* sincronizando a informação.

No circuito da figura 15, as células da primeira zona de *clock* são polarizadas de acordo com as entradas, em seguida têm seus estados congelados, servindo como entradas para a segunda zona de *clock*. O mesmo ocorre com as células da segunda zona de *clock* (cinza claro) que serão utilizadas como entradas para a última zona de *clock*. Quando esta última zona de *clock* estiver na fase de *switch*, a primeira zona de *clock* estará na fase de *release* e suas células estarão sendo polarizadas.

3.6. Circuitos Lógicos já Desenvolvidos

As pesquisas sobre a arquitetura de circuitos de QCA primeiramente focaram-se no desenvolvimento dos dispositivos lógicos básicos e um somador completo foi apresentado como um circuito mais elaborado [3]. O trabalho de Niemier foi o primeiro a observar o efeito da topologia no desenvolvimento de circuitos de QCA. Seu trabalho inicial concentrou-se em desenvolver um processador simples utilizando as células de QCA [50]. Além disso, como o desenvolvimento de circuitos de QCA necessita de uma estrutura regular, o esquema de uma FPGA também foi explorado [51]. Outro ponto chave do trabalho de Niemier foi a exploração dos parâmetros e regras de desenvolvimento que governam a fabricação dos circuitos de QCA [52]. Apesar de saber que algumas das regras criadas por Niemier já não são mais válidas, seus estudos foram de grande importância, sendo o pioneiro no desenvolvimento da arquitetura dos circuitos de QCA.

Pesquisas também têm sido feitas com o intuito de desenvolver circuitos de QCA tolerantes a falhas, além de construir ferramentas de CAD que auxiliem no teste e desenvolvimento de circuitos [53]. Kim chamou atenção às vulnerabilidades críticas nas estruturas dos dispositivos primitivos de QCA e propôs um guia para o desenvolvimento de novos circuitos que evitem o mal-funcionamento [54]. Kim também apresentou a topologia de um processador em substituição àquele considerado por Niemier. Além disso, várias pesquisas foram feitas com o objetivo de criar arquiteturas de memórias utilizando as células de QCA. Entre estes, o trabalho de Sara Frost propôs uma arquitetura de memória baseada na arquitetura do tipo H [55].

3.7. Alternativas de Fabricação

O conceito de QCA é bastante genérico e, consequentemente, possibilita uma variedade de formas de implementação. Como resultado, várias idéias têm surgido como alternativas para testar o conceito de QCA ou, até mesmo, como possível solução final para o desenvolvimento dos circuitos de QCA. Quatro alternativas de implementação têm se destacado e serão resumidas a seguir

3.7.1. Ilhas de Metal

Este tipo de implementação foi criado somente com o objetivo de provar o funcionamento da teoria de QCA, já que não possui possibilidade de miniaturização. Neste modelo, ilhas de alumínio são usadas para representar os pontos quânticos das células de QCA. Estas ilhas de metal, dos primeiros experimentos, são da ordem de 1µm e o sistema só funciona a baixíssimas temperaturas (em torno de 0,1K a 4K). Vários experimentos utilizando esta implementação demonstraram o sucesso da teoria de QCA[56][57][58][59].

3.7.2. Semicondutor

A implementação de QCA utilizando semicondutores tem a vantagem de poder utilizar o avançado e maduro processo de fabricação de semicondutores. Porém, a fabricação de semicondutores ainda não atingiu um ponto onde a produção de dispositivos com poucos nanômetros possa ser realizada em larga escala. A tecnologia de QCA com semicondutores utiliza a estrutura de pontos quânticos para confinar os elétrons[60]. Existem também, algumas pesquisas visando à realização da computação quântica utilizando QCA em semicondutores[61].

3.7.3. Magnético

Recentemente, QCA magnético (MQCA) tem chamado a atenção dos pesquisadores [62][63]. O funcionamento do MQCA é baseado na interação magnética de nanopartículas. O vetor de magnetização destas nanopartículas é similar ao vetor de polarização do QCA eletrônico. Neste caso a informação se propaga através da interação magnética, ao contrário das outras implementações onde a informação se propaga graças à interação eletrostática. Uma das vantagens imediatas desta tecnologia é que as células de MQCA podem operar à temperatura ambiente até mesmo para grandes dispositivos, na ordem de algumas centenas de nanômetros.

3.7.4. Molecular

Atualmente, vários pesquisadores têm investigado a realização de células de QCA usando moléculas[64][65][66]. Um sistema de QCA molecular possui várias vantagens incluindo: estruturas de células altamente simétricas, operação a altíssima velocidade, operação à temperatura ambiente e alta densidade espacial. Apesar de QCA molecular possuir muitas características atraentes, ainda há muitos desafios a serem superados antes que um computador molecular esteja disponível para o uso. Alguns destes desafios são: o correto posicionamento das células de QCA em uma superfície; a realização de mecanismos que permitam as operações de I/O em uma molécula; a determinação de qual a melhor molécula para exercer o papel de célula de QCA; desenvolvimento de uma tecnologia de *clock* que possibilite a criação de zonas de *clock* para circuitos complexos. Várias moléculas foram criadas e analisadas como possíveis soluções para construir células de QCA[67][68][69][70].

O Capítulo seguinte descreve o simulador de QCA desenvolvido neste trabalho.