

## Demônio de Maxwell, Física da Computação e Motores Moleculares

**Questão: Um robô nanométrico consegue violar a irreversibilidade?**

### 1. O Demônio de Maxwell

Em 1871, Maxwell publicou o livro *Theory of heat*, e em sua discussão sobre a 2ª lei da Termodinâmica, teceu a seguinte consideração (p. 328):

Mas se concebermos um ser cujas faculdades são tão nítidas que ele consegue acompanhar o curso de cada molécula, tal ser, cujos atributos ainda são essencialmente finitos como os nossos, seria capaz de fazer o que para nós é atualmente impossível.

A descrição deste ser, que Kelvin (1874) chamaria de “demônio inteligente de Maxwell”, foi feita pela primeira vez em carta de Maxwell a Peter Guthrie Tait, em 1867, referindo-se a um gás distribuído entre dois compartimentos A e B, ligados por um buraco com uma porta deslizante, com o gás em A inicialmente mais quente do que em B:

Deixe ele [o demônio] primeiro observar as moléculas em A e quando ele vir uma vindo, cujo quadrado da velocidade é menor do que a velocidade quadrática média das moléculas em B, faça ele abrir o buraco e deixar ela passar para B. Em seguida, deixe ele procurar uma molécula de B, cuja velocidade quadrática é maior do que a velocidade quadrática média em A e, quando ela chegar no buraco, deixe-o abrir a porta deslizante e deixá-la entrar em A, deixando a porta fechada para todas as outras moléculas. [...] Assim, o número de moléculas em A e B é o mesmo que no início, mas a energia em A aumentou e a em B diminuiu, ou seja, o sistema quente esquentou e o mais frio esfriou, e mesmo assim nenhum trabalho foi realizado, empregando-se apenas a inteligência de um ser muito observador e de dedos delicados.

O manuseio da portinha deslizante pode ser considerado sem atrito, e assim sua operação não realiza trabalho. O objetivo de Maxwell foi “mostrar que a 2ª Lei da Termodinâmica tem apenas certeza estatística” (carta a Tait, posterior a 1874), ou seja, pode ser violado em flutuações momentâneas.<sup>233</sup>

Em 1912, o polonês Marian von Smoluchowski mostrou que uma portinha que funcionasse como uma válvula, deixando passar moléculas apenas em uma direção, não poderia violar a 2ª lei por causa das suas próprias flutuações térmicas (movimento browniano) (ver seção XXVI.6).

Em 1929, o físico húngaro Leó Szilárd fez uma análise cuidadosa para verificar se um ser “inteligente” poderia de fato violar a 2ª lei, constituindo assim um “moto perpétuo de 2º tipo”. Um moto perpétuo de 1º tipo seria uma máquina que violaria a lei de conservação de energia, e a de 2º tipo violaria a lei de aumento de entropia. Szilárd elaborou um modelo de molécula única, que pode ocupar duas câmaras, que examinaremos (com detalhes adicionais) na Fig. XXIII.3. Sua conclusão foi a de que o processo de medição efetuado pelo demônio necessariamente dissiparia a energia necessária para salvar a 2ª lei, elevando a entropia em pelo

---

<sup>233</sup> As citações foram tiradas do cap. 1 do livro de LEFF, H.S. & REX, A.F. (orgs.) (1990), *Maxwell's demon: entropy, information, computing*, Princeton U. Press, pp. 3-6, que além da introdução dos organizadores contém uma porção de textos clássicos sobre o demônio.

menos  $k \ln 2$  (onde  $k$  é a constante de Boltzmann). Tal associação entre medição e aumento de entropia estava sendo elaborada na época, no contexto da Física Quântica, por seu colega húngaro John von Neumann.

## 2. Dissipação de Energia na Observação

Szilárd, no entanto, não pôs o dedo na etapa exata que levaria à dissipação de energia. Uma ideia para resolver isso foi proposta por Pierre Demers (1944), que salientou que só é possível distinguir um sinal luminoso emitido em um fundo radiativo, a uma certa temperatura  $T$  de corpo negro, se este sinal tiver uma energia maior do que  $kT$ . Esta ideia foi utilizada por Léon Brillouin (1949), e de maneira independente por Dennis Gabor (1951).

Seguindo Brillouin, considere que o demônio de Maxwell consegue observar as moléculas usando uma pequena lanterna. Para que a luz da lanterna fosse visível para o demônio, os fótons teriam que ter uma energia  $h\nu > kT$ . Para que a observação se concretizasse, a retina do demônio teria que absorver cada fóton, e esta absorção acarretaria necessariamente uma dissipação de energia, correspondendo a um aumento de entropia maior do que  $h\nu/T$ , o que compensaria a diminuição de entropia no gás.

## 3. Limites Físicos da Computação

Em 1982, Charles Bennett mostrou que a limitação imposta por Brillouin e Gabor para a observação de fótons podia ser contornada em sistemas mecânicos que não envolvem absorção de luz. Para entendermos seu resultado, mencionemos alguns princípios da área de limites físicos da computação, explorados especialmente por Rolf Landauer e pelo próprio Bennett.

A questão geral é: quais são os limites físicos últimos para a realização de uma computação mecânica? Quais os limites mínimos de gasto de energia, de tempo e de tamanho? Alguns princípios gerais podem ser invocados.

1) Em primeiro lugar, *uma computação nunca gera informação*. Geralmente a saída de uma computação carrega menos informação do que a entrada. Por exemplo, a entrada “2 + 2” contém a informação obtida na saída, “4”, mas contém também informação adicional, pois sabemos quais são os dois números sendo somados. Apenas com a saída, não há informação se a entrada foi “2 + 2” ou “3 + 1”. Neste caso, perdeu-se informação na computação, e a porta lógica correspondente é irreversível.

2) Princípio de Landauer (1961): Em sistemas físicos reais, *a destruição de informação sempre dissipa energia*. Para ilustrar este princípio, considere a memória magnética de um computador, que armazena 1 bit de informação em um poço de potencial duplo, como o da Fig. XXVI.1.

De início, todos os registros estão com o dígito “0”, o que pode ser ilustrado por uma bolinha no fundo do poço da esquerda. Após a realização da computação, a bolinha pode estar marcando “0” ou “1”. Nosso objetivo é restaurar a memória para o estado inicial sem dissipar energia, ou seja, realizando um processo sem atrito. Suponha que o estado final do registro seja “1” (parte de cima da figura). Podemos definir uma função  $F(t)$  que leva a bolinha do lado direito para o esquerdo, primeiro dando energia para a bolinha, e depois retirando o mesmo valor de energia. O apagamento de memória sem atrito funciona quando o estado final é “1”. Porém, o estado final poderia ter sido “0” (parte de baixo da figura). Neste caso, se aplicarmos a mesma função  $F(t)$ , a bolinha termina com um movimento oscilatório, que não corresponde

a um valor bem definido para o registro! Assim, nossa tentativa de apagar a memória sem atrito fracassa.

Com atrito, porém, a tarefa é factível. Podemos usar a mesma função  $F(t)$ , junto com a dissipação de uma parte da energia da bolinha. Já vimos que a função funciona bem para o caso em que a bolinha se encontra em “1”. Para o caso em que se encontra em “0”, a perda de energia impedirá que a bolinha fique oscilando a esmo, pois ela não terá energia para sair do poço “0”, e com a dissipação contínua de energia, acabará parada no fundo do poço “0”. Desta maneira, é possível restaurar o estado “0” em todos os registros, sem precisar saber qual foi o estado ao final da computação.<sup>234</sup>

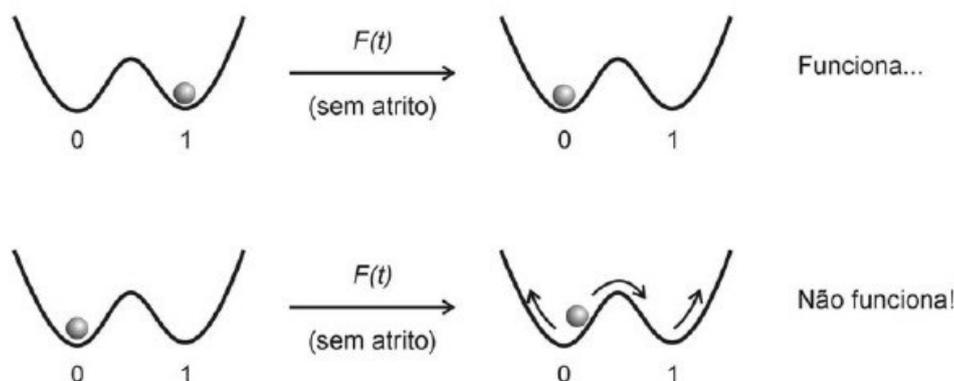


Figura XXVI.1. Ilustração do princípio de Landauer.

3) *Computação reversível*. O terceiro princípio da física da computação é que portas lógicas irreversíveis e apagamento de memória não são necessários para a computação. Em outras palavras, é possível haver computação reversível. Este resultado foi provado por Bennett em 1973, que mostrou como, ao invés de apagar memória, pode-se acumular um “lixo” de informação que guarda a história dos passos da computação. Após escrever a saída em uma folha de papel, o computador pode simplesmente reverter todos os seus passos, terminando no seu estado inicial.

#### 4. Demônio e Apagamento de Memória

Com esses princípios, podemos apresentar a solução de Bennett para a questão do demônio de Maxwell. A dissipação de energia no demônio não ocorre na observação, que pode em princípio ocorrer de maneira mecânica (sem usar fótons), mas sim *no apagamento* da memória.

<sup>234</sup> A discussão nesta seção é extraída de: LANDAUER, R. (1961), “Irreversibility and heat generation in the computing process”, *IBM Journal of Research and Development* 3, 183-91. BENNETT, C.H. (1987), “Demons, engines and the second law”, *Scientific American* 257(5), 88-96. Sobre o último parágrafo da seção XXVI.4, a abordagem usual feita por físicos matemáticos que trabalham com Termodinâmica é salientar que a análise só faz sentido de maneira precisa em sistemas cuja tamanho tende a infinito, o que no caso de um gás de uma única molécula envolveria um número infinito de ciclos do demônio de Maxwell. Assim, a questão de o demônio ter uma memória inicial grande mas finita não constituiria uma ameaça à 2ª lei da Termodinâmica. Devo este comentário a Guilherme Zambon, orientando de Frederico Borges de Brito.

Consideremos o demônio de Maxwell conforme a Fig. XXVI.2. Ele possui um sensor muito acurado, para observar a posição das moléculas, um locomotor, para se mover, e um efetor, para mover objetos sem atrito. Ele possui uma memória, cujo estado inicial é “0”; na figura, ela aparece como armazenando 1 bit de informação, mas pode ser maior. A energia da bateria é usada para apagar a memória, ao final do processo. Em sua memória, o demônio também precisa ter armazenado um programa (que não aparece na figura), que indica como ele deve agir.

Na Fig. XXVI.3, apresentam-se os passos de operação do demônio, em sua tentativa de violar a 2ª lei da Termodinâmica. Ele atuará em um gás de uma única molécula, colocado em um recipiente com pistão móvel e retirável, envolto por um banho térmico. Sua finalidade é realizar trabalho, por meio da elevação de tijolos em um campo gravitacional, presos em uma corrente, sem dissipar energia. Ele tentará extrair energia térmica do banho que envolve o recipiente de gás, e convertê-la integralmente em trabalho mecânico (sem perdas).

Os passos indicados na figura são os seguintes. (a) O demônio se prepara para agir. (b) Ele olha para a molécula, esperando o momento em que ela esteja no lado direito da caixa. Para poder agir, deve registrar 1 em sua memória. (c) Levanta a parede e liga as correntes. (d) A molécula obtém energia em seus choques com o banho térmico, fechando o pistão. (e) O demônio retira a parede. (f) Agora ele está pronto para recomeçar, como na situação (a).

O demônio claramente realizou trabalho sem dissipar energia. Se ele retornar ao seu estado inicial, ele poderá repetir o ciclo indefinidamente, constituindo um moto perpétuo de 2º tipo. Porém, há uma diferença entre o estado inicial (a) e o final (f): o registro em sua memória. Para retornar ao estado inicial, ele terá que apagar 1 bit em sua memória, mas para conseguir isso, terá que dissipar energia, pelo princípio de Landauer.

Assim, o demônio de Maxwell não consegue violar a 2ª lei da Termodinâmica em um ciclo fechado. No entanto, enquanto ele não tiver que apagar a memória, ele pode continuar realizando trabalho sem dissipar energia! Por exemplo, se ele tiver 100 bits de memória, pode repetir o ciclo 100 vezes, elevando o peso a uma altura 100 vezes maior, convertendo toda energia em trabalho. No entanto, pode-se dizer que esse ganho é compensado pela dissipação que ocorreu na fabricação do seu chip de memória.

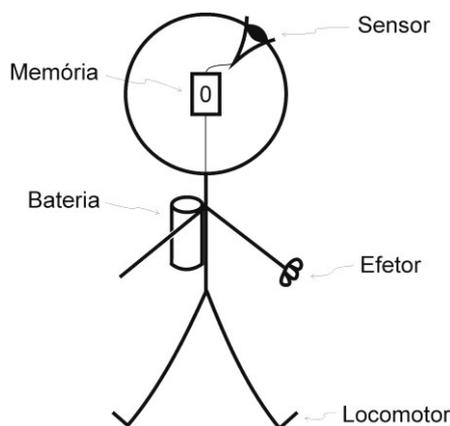


Figura XXVI.2: O demônio de Maxwell.

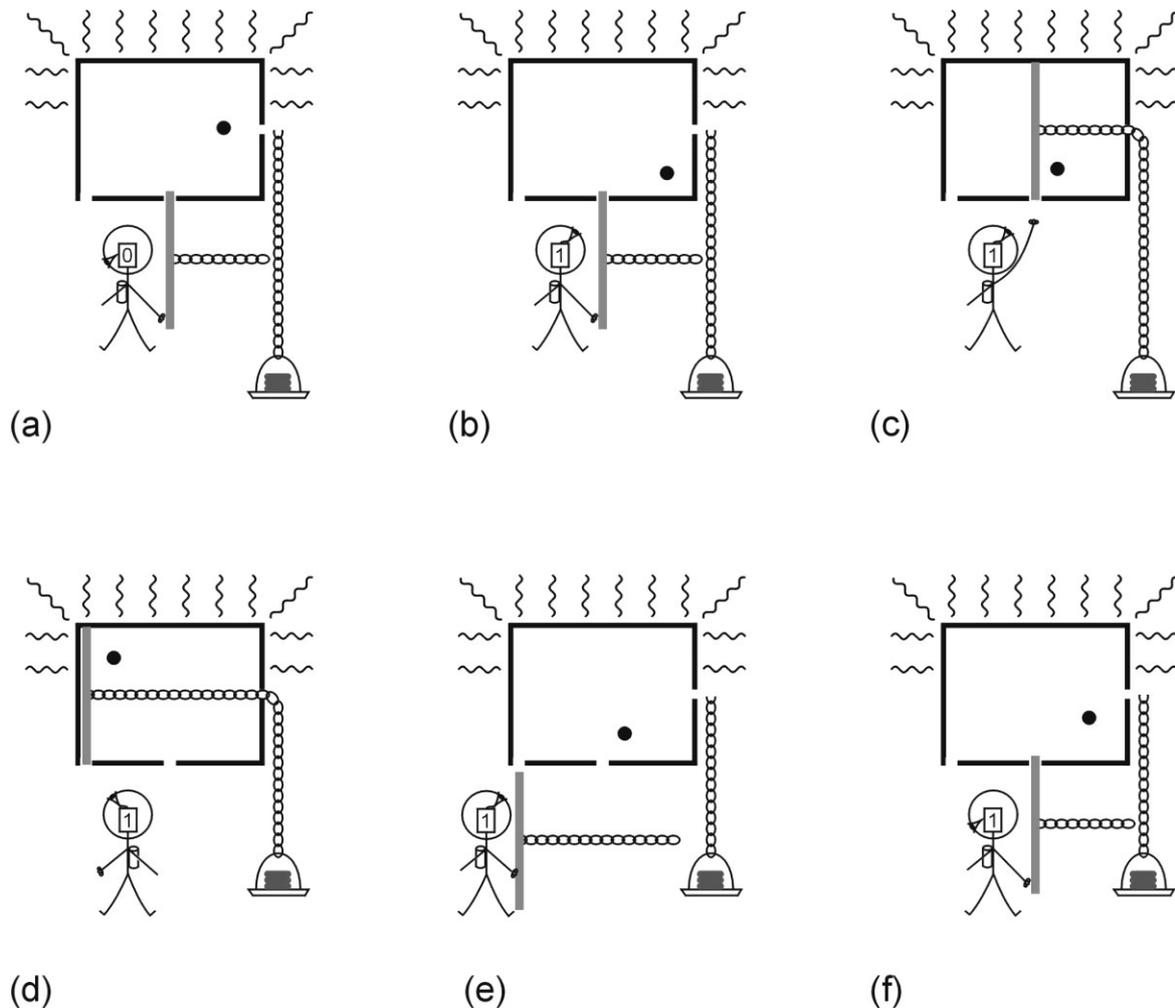


Figura XXVI.3: Ciclo de atividade do demônio de Maxwell.

## 5. Críticas à abordagem informacional de Landauer-Bennett

No final do milênio, iniciou-se uma onda de críticas à abordagem informacional de Landauer-Bennett, com os filósofos John Earman e John Norton, do importante centro de filosofia da ciência da Universidade de Pittsburgh, argumentando que os conceitos de informação e de apagamento de informação não desempenham papel algum nas explicações sugeridas para a impossibilidade de violar a 2ª lei da Termodinâmica.<sup>235</sup> Como as explicações dadas por Bennett *pressupõem* a 2ª lei (por meio do princípio de Landauer), então não haveria necessidade de salvar a 2ª lei por meio de considerações envolvendo a noção de informação.

Em sua resposta, Bennett (pp. 508-9) considerou que a crítica faz “alguma justiça”, mas defendeu que o princípio de Landauer “desempenha uma importante função pedagógica”, ajudando os alunos a evitar o erro de supor que “há um custo intrínseco de ordem  $kT$  para cada ato elementar de processamento de informação” (o que não ocorre quando a computação é

<sup>235</sup> EARMAN, J. & NORTON, J.D. (1998-9), “Exorcist XIV: the wrath of Maxwell’s demon. I. II.”, *Studies in the History and Philosophy of Science* 29, 435-71; 30, 1-40. A resposta foi dada em: BENNETT, C.H. (2003), “Notes on Landauer’s principle, reversible computation, and Maxwell’s demon”, *Studies in the History and Philosophy of Science* 34, 501-10. Outra crítica à abordagem informacional é: HEMMO, M. & SHENKER, O. (2010), “Maxwell’s demon”, *Journal of Philosophy* 107, 389-411.

reversível). Em defesa do princípio de Landauer, pode-se mencionar também um interessante experimento realizado com uma partícula coloidal presa em um poço de potencial duplo, como o da Fig. XXVI.1, cuja média de calor dissipado satisfaz o princípio.<sup>236</sup>

Earman & Norton criticam as explicações que apelam para um demônio “antropomorfizado”, argumentando que em todos os casos relevantes o problema pode ser resolvido com um campo de forças (hamiltoniano) inanimado (p. 4) e com flutuações térmicas. Elogiam a abordagem feita por Smoluchowski (1912), que leva em conta apenas as flutuações térmicas da válvula mecânica que separa os dois compartimentos de gás. O erro da tradição teria sido separar o problema do demônio da questão das flutuações (p. 24).

Para esclarecer a abordagem em termo de flutuações térmicas, consideremos o problema da catraca e lingueta em movimento browniano, analisado qualitativamente por Smoluchowski, e aprofundado por Feynman.

## 6. Catraca e lingueta em movimento browniano

Considere o sistema da Fig. XXVI.4, em que há dois recipientes com gás, ligados por uma haste. À esquerda há uma catraca (em inglês, *ratchet*), ou roda dentada, com  $N$  dentes, cujo giro em um dos sentidos de rotação é travado por uma lingueta (pronuncia-se “lingüeta”; em inglês, *pawl*), ou seja, uma tira metálica. À direita há uma pá, que recebe choques aleatórios das moléculas do gás, e dessa forma oscila aleatoriamente em ambos os sentidos de rotação. Os dois sistemas são interligados por uma haste que pode girar, acoplada a um disco de raio  $R$ , com um peso. Se as flutuações forem suficientemente intensas, alguém que olha a partir da extrema direita consegue ver a pá girar em sentido horário, mas há um limite no sentido anti-horário, por causa da lingueta, que trava o sistema neste sentido. Se a flutuação girar o sistema em um ângulo maior que  $360^\circ/N$ , a roda passará a ser travada no dente seguinte, e trabalho com valor  $\varepsilon$  terá sido realizado sobre o peso, que terá subido uma distância  $2\pi R/N$ .

Será que tal sistema pode gerar trabalho indefinidamente, a partir da energia térmica fornecida pelo ambiente externo (que mantém os gases à temperatura constante)? Smoluchowski (1912) e Feynman et al. (1962) argumentaram que não, pois as flutuações térmicas que fazem a pá girar aleatoriamente também fazem a lingueta vibrar, impedindo que a catraca seja travada. Quantitativamente, a probabilidade de a pá girar em uma unidade da catraca é  $\exp(-\varepsilon/kT)$ , que é igual à probabilidade de a lingueta se soltar.<sup>237</sup>

A máquina fracassa por que as temperaturas  $T$  de ambos os recipientes são as mesmas, e o princípio de Carnot (2ª lei da Termodinâmica) impede que se realize trabalho sem diferença de temperatura. Por outro lado, se a temperatura  $T_2$  do gás que anima a pá for maior do que a temperatura  $T_1$  da catraca e lingueta, trabalho poderá ser realizado, levantando o peso. Tal tipo de máquina é chamada de “catraca browniana”.

<sup>236</sup> BÉRUT, A.; ARAKELYAN, A.; PETROSYAN, A.; CILIBERTO, S.; DILLENSCHNEIDER, R. & LUTZ, E. (2012), “Experimental verification of Landauer’s principle linking information and thermodynamics”, *Nature* 483, 187-90.

<sup>237</sup> FEYNMAN et al. (1963), op. cit. (nota 158), vol. 1, pp. 46-1 a 46-9.

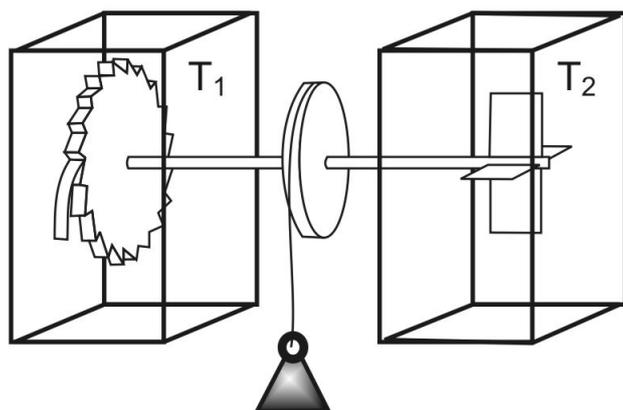


Figura XXVI.4. Catraca browniana realiza trabalho quando a temperatura  $T_2$  do gás em torno da pá é maior do que  $T_1$  no recipiente em torno da catraca, cujo movimento em um sentido é travado por uma lingueta.

## 7. Motores Moleculares

Nossa intuição, acostumada com as máquinas grandes produzidas intencionalmente pelo ser humano, tem dificuldade de compreender “máquinas” no mundo nanoscópico, imersas num ambiente de flutuações térmicas, exibindo funções sem terem sido desenhadas por um engenheiro.<sup>238</sup> Os *motores moleculares* são proteínas que realizam trabalho mecânico a temperatura constante (ao contrário da catraca browniana), como os motores translocacionais que transportam objetos (como vesículas, organelas e macromoléculas) dentro das células com grande precisão espacial e temporal, acopladas a trilhos que formam o citoesqueleto da célula. O transporte de organelas “realizado” pelo motor molecular envolve consumo de combustível, por meio de reações químicas como a hidrólise de ATP (trifosfato de adenosina). Tal processo químico leva a uma modificação da conformação estrutural da macromolécula, o que faz com que a molécula libere uma de suas cabeças dos trilhos para realizar um passo. O movimento da cabeça é estocástico (aleatório), flutuando conforme os choques das moléculas de água, até se fixar novamente no microtúbulo. Esse passo de alguns nanômetros ocorre em tempos médios da ordem de milissegundos, e nem sempre ocorre no mesmo sentido (ou seja, o motor às vezes retorna um passo). A teoria física geral deste processo só foi elaborada na década de 1990, com os trabalhos do biofísico R.D. Astumian e de outros.<sup>239</sup>

Há três tipos de motores moleculares translocacionais. A miosina se move ao longo dos filamentos da actina, e é responsável principalmente pelo movimento e contração de músculos. A kinesina e a dineína estão associadas ao transporte de organelas ao longo dos microtúbulos, que são arranjados radialmente na célula (Fig. XXVI.5).

Um motor molecular é um dispositivo que combina os efeitos do ruído térmico, assimetrias espaciais do potencial que governa seu sistema (conforme veremos na Fig. XXVI.6), e uma taxa de fornecimento de energia a esse sistema, o que resulta em um movimento direcionado da macromolécula.

<sup>238</sup> A escala microscópica, em torno de  $10^{-6}$  m, também envolve uma ontologia própria muito interessante. Ver PURCELL, E.M. (1977), Life at low Reynolds number, *American Journal of Physics* 45: 3-11.

<sup>239</sup> ASTUMIAN, R.D. (2001), “Making molecules into motors”, *Scientific American* 285(1), 56-64. A presente seção é baseada em MELO, Luma & PESSOA JR., O. (2015), “Eventos causais em motores moleculares”, in AHUMADA, J.V.; VENTURELLI, A.N. & CHIBENI, S.S. (orgs.), *Filosofia e historia de la ciencia en el Cono Sur: Selección de trabajos del IX Encuentro y las XXV Jornadas de Epistemología e Historia de la Ciencia*, Editorial de la UNC, Córdoba, pp. 489-99.

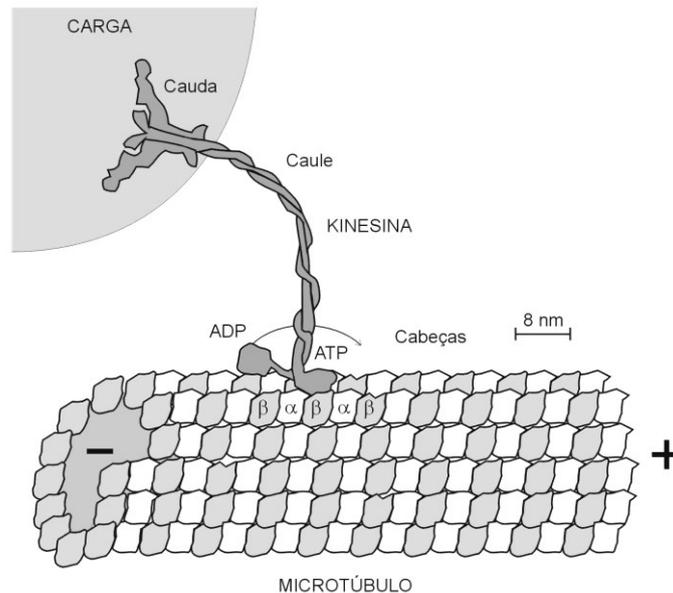


Figura XXVI.5. Motor molecular de kinesina transportando uma carga ao longo de um microtúbulo. O microtúbulo é um cilindro em que dímeros de  $\alpha$  e  $\beta$ -tubulina formam um perímetro de treze unidades com uma pequena helicidade (torção). Com a hidrólise de ATP, formando ADP, uma das cabeças motoras se solta da  $\beta$ -tubulina e flutua estocasticamente, geralmente se fixando 16 nm à frente (no sentido de polarização elétrica positiva) em outra  $\beta$ -tubulina. Uma proteína de coordenação liga a cauda do motor molecular à sua carga.

O processo químico por detrás da conversão de energia química em mecânica é a hidrólise de uma molécula de ATP (trifosfato de adenosina), tendo como produtos uma molécula de ADP (difosfato de adenosina), uma molécula de fosfato inorgânico Pi, e mais um próton:  $\text{ATP} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{ADP} + \text{Pi} + \text{H}^+$ . Quando o ATP se liga a um sítio específico na macromolécula, esta funciona como uma enzima, fornecendo energia de ativação e permitindo a formação de um estado de transição, que sendo muito instável, rapidamente é atacado por uma molécula de água, levando à sua quebra em ADP e Pi. Neste processo, a energia absorvida pela macromolécula muda a sua conformação estrutural, e libera a cabeça do trilho, que passa a flutuar livremente no banho aquoso (sendo que a macromolécula ainda se mantém fixa no trilho por meio de sua outra cabeça). As moléculas de água “bombardeiam” a proteína um número imenso de vezes por segundo, o que produz movimento browniano (aleatório). Tal bombardeamento envolve forças de natureza elétrica, especialmente pontes de hidrogênio.

A energia química disponível por unidade de tempo para um motor molecular é da ordem de  $10^{-16}$  W. Em um segundo, são consumidas entre 100 e 1000 moléculas de ATP. O choque aleatório das moléculas de água, que bombardeiam o motor molecular, ocorre com uma potência de cerca de  $10^{-8}$  W. Vê-se com isso que a potência do ruído térmico é muitíssimo maior do que a potência química liberada para a realização de trabalho. Mesmo assim, o motor molecular consegue se locomover, mantendo sempre uma cabeça presa no trilho através da atração eletrostática. Isso é feito em uma das proteínas que compõem o microtúbulo, a  $\beta$ -tubulina. Juntamente com a  $\alpha$ -tubulina, forma-se um dímero (cuja repetição compõe o microtúbulo, ver Fig. XXVI.5), que gera um potencial eletrostático *assimétrico*. Esta é uma das chaves para a explicação física do fenômeno.

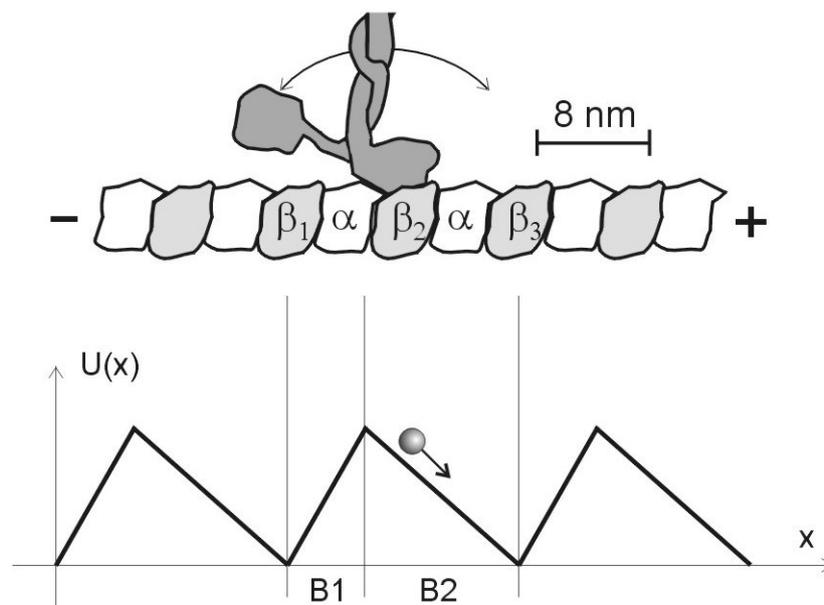


Figura XXVI.6: Atração eletrostática da cabeça do motor molecular segue um potencial assimétrico, representado na figura por uma curva dente de serra. Durante a hidrólise do ATP, uma cabeça adquire energia para se liberar do trilho. Neste momento, o potencial se anula, e a cabeça flutua aleatoriamente nos dois sentidos. Quando o potencial é restaurado, dependendo da posição da cabeça, ela retornará para sua posição em  $\beta_1$  ou irá para frente, para  $\beta_3$ . Devido à assimetria do potencial, a probabilidade de encontrar a cabeça na bacia que leva a  $\beta_1$  (que chamamos B1) é menor do que na bacia B2 que leva para  $\beta_3$ . A bolinha na figura representa uma possível posição da cabeça, que com o restabelecimento do potencial é atraída para  $\beta_3$ .

Na Fig. XXVI.6, ilustra-se esta assimetria com um potencial de tipo “dente de serra”, que descreve a atração eletrostática da cabeça livre para duas posições distintas. A hidrólise da molécula de ATP, que ocorre em instantes aleatórios, fornece energia para a cabeça se descolar do trilho, zerando o potencial, e a cabeça passa a flutuar aleatoriamente, em difusão por movimento browniano. Quando o potencial dente de serra é restabelecido, a assimetria do potencial faz com que a probabilidade seja maior para que a macromolécula caminhe “para frente” do que “para trás”.

A assimetria do potencial combinada à difusão das cabeças produzirá um movimento resultante em um sentido determinado, mesmo na presença de uma força externa contrária. Pelo modelo apresentado, fica claro que sem ruído ou flutuação não há motor, mas também é necessária a liberação quantizada de energia, mesmo que em instantes aleatórios. Ao contrário de sistemas macroscópicos, como a catraca e lingueta, o motor molecular funciona a uma temperatura média constante, mas aproveita as flutuações locais do movimento térmico das moléculas.