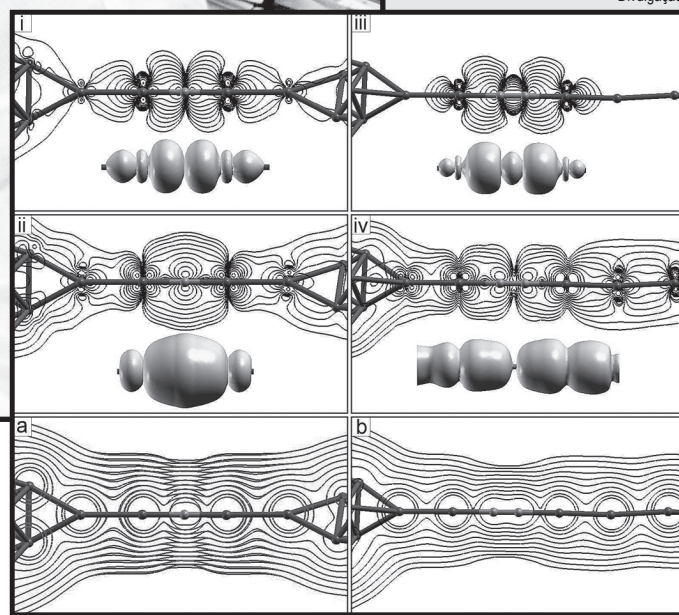


Foto: Antoninho Perri



O físico Edgard Pacheco Moreira Amorim: simulações computacionais (detalhe) abrem frente de pesquisa

Divulgação



Por um (nano)fio

Propriedades mecânicas e eletrônicas de materiais à base de cobre e ouro são pesquisadas por físico

JEVERSON BARBIERI
jeverson@unicamp.br

A necessidade de ampliar a capacidade de processamento computacional está resultando em um intenso esforço científico e tecnológico para produzir circuitos eletrônicos cada vez menores. A grande fronteira concentra-se atualmente nos nanofios metálicos – especialmente de cobre e ouro. Eles vêm sendo experimental e teoricamente estudados como possíveis nanocondutores capazes de fazer contatos elétricos e conectar dispositivos. O físico Edgard Pacheco Moreira Amorim pesquisou em seu doutorado as propriedades mecânicas e eletrônicas desses nanofios utilizando-se de simulações computacionais. Levando-se em conta que um

dos aspectos destes metais, quando tensionados, é rearranjar-se formando cadeias atômicas lineares – o que significa o menor condutor possível – um dos objetivos do trabalho foi mostrar que nanofios de cobre evoluem nesse sentido, assim como no ouro, embora neste caso com estruturas menores e menos simétricas. “A contribuição de fato da pesquisa está em constatar esse efeito. Consequentemente, isso abriu uma nova perspectiva de trabalho para teóricos e experimentais investigarem nanofios de cobre mais profundamente”, afirmou Amorim. A pesquisa foi orientada pelo professor Edison Zacarias da Silva, do Departamento de Física da Matéria Condensada, do Instituto de Física “Gleb Wataghin” (IFGW).

Amorim explicou que a cadeia atômica linear consiste numa linha na qual um átomo está ligado a dois outros sucessivamente numa configuração linear que pode chegar a até dez átomos no ouro. Como no caso do cobre foi constatada uma evolução para uma cadeia atômica menor e também com pontas menos simétricas, isso indica que tanto a maleabilidade quanto a ductibilidade que medem respectivamente a capacidade dos materiais deformarem, formando então lâminas e fios, nesse metal é menor que no ouro quando são consideradas suas configurações nanométricas.

A estrutura cristalina macroscópica de ambos os metais é composta por uma configuração periódica de geometria cúbica de face centrada,

na qual temos átomos nos vértices e no centro de cada face de um cubo repetido por todo sólido. Quando estes materiais são alongados até ficarem bem finos observa-se que a relação entre superfície e volume do condutor torna-se cada vez mais significativa, perdendo a coesão macroscópica entre os átomos. Nesta situação, prossegue Amorim, foi observado em alguns casos o aparecimento de estruturas não cristalinas, com geometrias tão diferentes que foram batizadas de estruturas “malucas”. São estruturas de múltiplas camadas, helicoidais ou de uma única camada, que foram observadas para ouro e platina em experimentos de microscopia eletrônica. “Em nossos cálculos, mostramos que nanofios de ouro, puxados em uma dada direção cristalográfica, evoluem intrinsecamente para uma estrutura helicoidal”, garantiu o físico.

Além disso, estabeleceu-se uma relação entre o aparecimento desse tipo de estrutura e a formação de longas cadeias atômicas lineares. Quando a estrutura helicoidal surge é possível mostrar que, à medida que são esticadas, suas pontas possuem baixa simetria de tal forma que o átomo da ponta está ligado a um só átomo. Nesta condição, a cadeia atômica linear se desenrola da ponta como um fio saindo de um novelo de lã. A cadeia se rompe a partir do momento no qual o átomo da ponta divide suas ligações com três ou mais átomos, tornando-se energeticamente menos favorável acrescentar mais átomos à cadeia atômica

do que quebrar uma ligação desta.

Amorim aponta ainda que outro aspecto relevante investigado em seu trabalho é a inserção de impurezas em nanofios de cobre. Experimentalmente foram observadas distâncias entre átomos de ouro muito maiores do que usualmente é calculada com métodos chamados de primeiros-princípios, que são fundamentados nos princípios da mecânica quântica, sendo considerados como o estado da arte no cálculo das propriedades dos materiais.

Portanto, tanto pesquisadores experimentais quanto teóricos atribuíram estas grandes distâncias à influência de impurezas leves tais como hidrogênio, oxigênio, carbono, entre outras que estariam entre dois átomos de ouro e que não poderiam ser vistas em imagens de microscopia eletrônica. A partir disso, vários trabalhos teóricos buscaram calcular quais seriam as impurezas mais prováveis e a influência delas nas propriedades mecânicas, eletrônicas e de transporte eletrônico nestes nanofios metálicos.

A pesquisa desenvolvida por Amorim mostra que impurezas de N e N₂ em nanofios de cobre tornam a ligação entre átomos tão forte que possibilitam a reconstrução das pontas adicionando mais átomos à cadeia atômica linear, tornando-se um meio mecanoquímico de reconstruir cadeias maiores do que se observa em nanofios puros. Isso sugere a possibilidade de produzir nanocondutores mais longos sintetizados em atmosferas nitrogenadas.

De uma forma geral, disse o físico, todos os resultados apresentados na tese foram observados em laboratório. No entanto, especialmente no que se refere às estruturas helicoidais de ouro, ele garantiu que acrescentou uma interpretação nova a respeito da formação, que é dada por um comportamento intrínseco de se puxar o nanofio nesta direção. Além disso, ele explica a relação direta entre a estrutura helicoidal e a observação de cadeias mais longas do que usualmente é obtido por nanofios de ouro alongados em outras direções. Embora todos os experimentos e cálculos sejam fundamentais no que se refere à ciência de base, do ponto de vista de possíveis aplicações tecnológicas, a deposição de nanofios metálicos em superfícies parece ser potencialmente promissora para se ter, de fato, uma eletrônica em escala nanométrica.

Portanto, uma nova direção interessante para prosseguir com os estudos mostrados neste trabalho, segundo Amorim, seria avaliar a possibilidade da aplicação tecnológica de nanofios depositados em diferentes superfícies, observando o efeito da temperatura e da contaminação por impurezas leves normalmente presentes em condições ambientais típicas as quais estes experimentos são realizados. “E, principalmente, avaliar como e quanto essas condições afetam as propriedades de estrutura eletrônica e de transporte desses sistemas”, concluiu.

Artigo

Amorim, E.P.M and Silva, E.Z.; *Ab initio* study of linear atomic chains in copper nanowires, *Physical Review B* 81, 115463, 2010.

Publicação

Tese de doutorado: “Propriedades Mecânicas e Eletrônicas de Nanofios de Cobre e Ouro”

Autor: Edgard Pacheco Moreira Amorim

Orientador: Edison Zacarias da Silva

Unidade: Instituto de Física “Gleb Wataghin” (IFGW)

Silício no limite. E o ‘transporte’ de fármacos

Atualmente, a aplicação tecnológica da nanociência é fomentada pela indústria da informática e também pela produção de fármacos. Uma das grandes fabricantes de processadores, a Intel, produz atualmente transistores em uma escala de tamanho na faixa de

45 nanômetros, lembrando que um nanômetro equivale a 1 metro dividido por 1 bilhão. Isso possibilita colocar em uma área menor que 26 milímetros quadrados algo em torno de 47 milhões de transistores, tornando-se cada vez mais inegável, de acordo com Amorim, que está muito próximo o limite físico

de toda tecnologia baseada no silício.

Ademais, o desenvolvimento do encapsulamento de fármacos que abrange o esforço de físicos, químicos e biólogos, recentemente levantou a possibilidade de se produzir nanopartículas ou aglomerados atômicos de ouro para este propósito.

Aglomerados com o fármaco poderiam ser transportados pela corrente sanguínea, sendo derretidos por meio de radiação não-invasiva a tecidos biológicos liberando-os com precisão nanométrica, consistindo numa forma eficaz de atacar tumores sem afetar células saudáveis.



UNICAMP – Universidade Estadual de Campinas

Reitor Fernando Ferreira Costa
Coordenador-Geral Edgar Salvadori De Decca
Pró-reitor de Desenvolvimento Universitário Paulo Eduardo Moreira Rodrigues da Silva
Pró-reitor de Extensão e Assuntos Comunitários Mohamed Ezz El Din Mostafa Habib
Pró-reitor de Pesquisa Ronaldo Aloise Pilli
Pró-reitor de Pós-Graduação Euclides de Mesquita Neto
Pró-reitor de Graduação Marcelo Knobel
Chefe de Gabinete José Ranali

Jornal da Unicamp

Elaborado pela Assessoria de Imprensa da Universidade Estadual de Campinas (Unicamp). Periodicidade semanal. **Correspondência e sugestões** Cidade Universitária “Zeferino Vaz”, CEP 13081-970, Campinas-SP. **Telefones** (019) 3521-5108, 3521-5109, 3521-5111. **Site** <http://www.unicamp.br/ju>. **E-mail** leitorju@reitoria.unicamp.br. **Twitter** <http://twitter.com/jornaldaunicamp> **Coordenador de imprensa** Eustáquio Gomes **Assessor** **Chefe** Clayton Levy **Editor** Álvaro Kassab (kassab@reitoria.unicamp.br) **Chefia de reportagem** Raquel do Carmo Santos (kel@unicamp.br) **Reportagem** Isabel Gardenal, Jeverson Barbieri e Maria Alice da Cruz **Editor de fotografia** Antoninho Perri **Fotos** Antoninho Perri e Antonio Scarpinetti **Editor de Arte** Oséas de Magalhães **Vida Acadêmica** Hélio Costa Júnior **Atendimento à imprensa** Nadir Antonia Peinado, Ronei Thezolin e Silvio Anunciação **Serviços técnicos** Dulcinéia Bordignon, Everaldo Silva e Luis Paulo Silva **Impressão** Pigma Gráfica e Editora Ltda: (011) 4223-5911 **Publicidade** JCPR Publicidade e Propaganda: (019) 3232-2210. Assine o jornal on line: www.unicamp.br/assineju