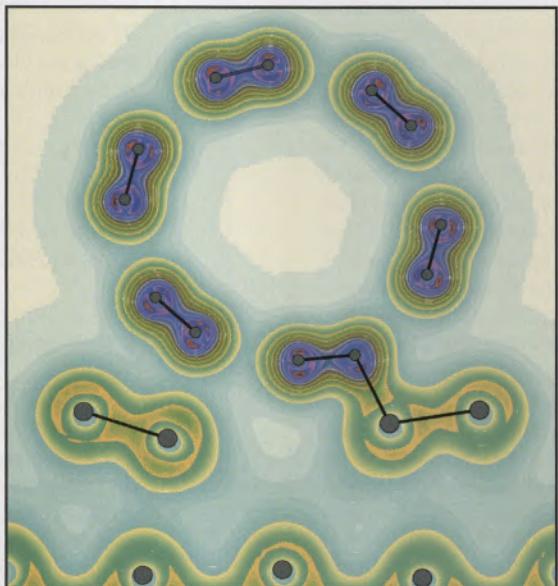


# Entre topos e vales

Modelo teórico determina o arranjo geométrico que permitiria o uso de nanotubos

**E**m 1991 o físico japonês Sumio Iijima descobriu os cilindros microscópicos compostos por algumas dezenas de átomos de carbono, o mesmo elemento químico da grafite dos lápis. De lá para cá, não parou de crescer o interesse por esses tubos cuja espessura é milhares de vezes menor que a de um fio de cabelo: têm alguns bilionésimos de metro ou nanômetros, daí o nome nanotubo. Devido à rigidez e à condutibilidade elétrica, os nanotubos são vistos como um material alternativo de uma nova geração de chips (circuitos integrados) e conectores – fios capazes de unir componentes eletrônicos que tendem a encolher mais de cem vezes, inviabilizando assim o uso dos dispositivos atuais, feitos de ouro com silício.

Mas na prática ainda não se conseguiu que os nanofios preservem a capacidade de transportar eletricidade quando depositados sobre uma superfície, propriedade fundamental para tornar seu uso possível. A solução para esse problema parece mais próxima. Adalberto Fazzio e Walter Orellana, da Universidade de São Paulo (USP), e Roberto Hiroki Miwa, da Universidade Federal de Uberlândia (UFU), identificaram os fatores fundamentais para um nanofio fazer um bom contato elétrico: a orientação do nanotubo em relação ao arranjo geométrico dos átomos da superfície de silício (e a distância entre o tubo e a superfície). Em simulações de computador, eles aproximaram pouco a pouco um nanotubo de 72 átomos de carbono de uma lâmina de algumas centenas de átomos de silício, que ao microscópio eletrônico lembra uma sucessão de



Elétrons circulam entre o carbono (*lilás*) e o silício

longas cadeias paralelas de montanhas intercaladas por vales ou trincheiras.

Estudando a interação entre os átomos do nanotubo e os da superfície, os físicos notaram que ocorre uma ligação química entre o silício e o carbono quando o cilindro de carbono se encaixa em um desses vales, paralelo a duas cadeias de montanhas formadas pelos

átomos de silício. Nessa região em que o tubo quase toca a placa de silício – na realidade, os átomos de carbono e silício permanecem a 0,211 nanômetro um do outro –, acumulam-se elétrons. Como a água de um rio, esses elétrons podem fluir livremente ao longo de toda a extensão do nanotubo. Esse canal permite a passagem de corrente elétrica, como mostram os físicos brasileiros em um estudo publicado na *Physical Review Letters*, de 17 de outubro. “O canal de elétrons aumentou a propriedade de conduzir eletricidade dos nanotubos que já apresentam essa característica”, diz Fazzio. “São resultados que indicam a possibilidade de usar nanotubos de carbono como fios.”

Um pouco antes, Peter Albrecht e Joseph Lyding, da Universidade de Illinois, Estados Unidos, com o auxílio de um microscópio de força atômica, conseguiram colocar um nanotubo sobre uma placa de silício extremamente pura, sem a presença de indesejados átomos de hidrogênio. Falta agora superar outro desafio: separar os nanotubos condutores elétricos dos que se portam como semicondutores, características determinadas aleatoriamente pela forma como os átomos de carbono se associam quando se aplica uma descarga elétrica em vapor de carbono. “Caso se consiga uma forma eficaz de diferenciar esses dois tipos de nanotubos”, diz Orellana, “será possível integrá-los a uma placa de silício e construir chips e nanofios.”

## O PROJETO

*Simulação Computacional de Materiais Nanocomputacionais*

### MODALIDADE

Projeto Temático

### COORDENADOR

ADALBERTO FAZZIO - IF/USP

### INVESTIMENTO

R\$ 913.029,43