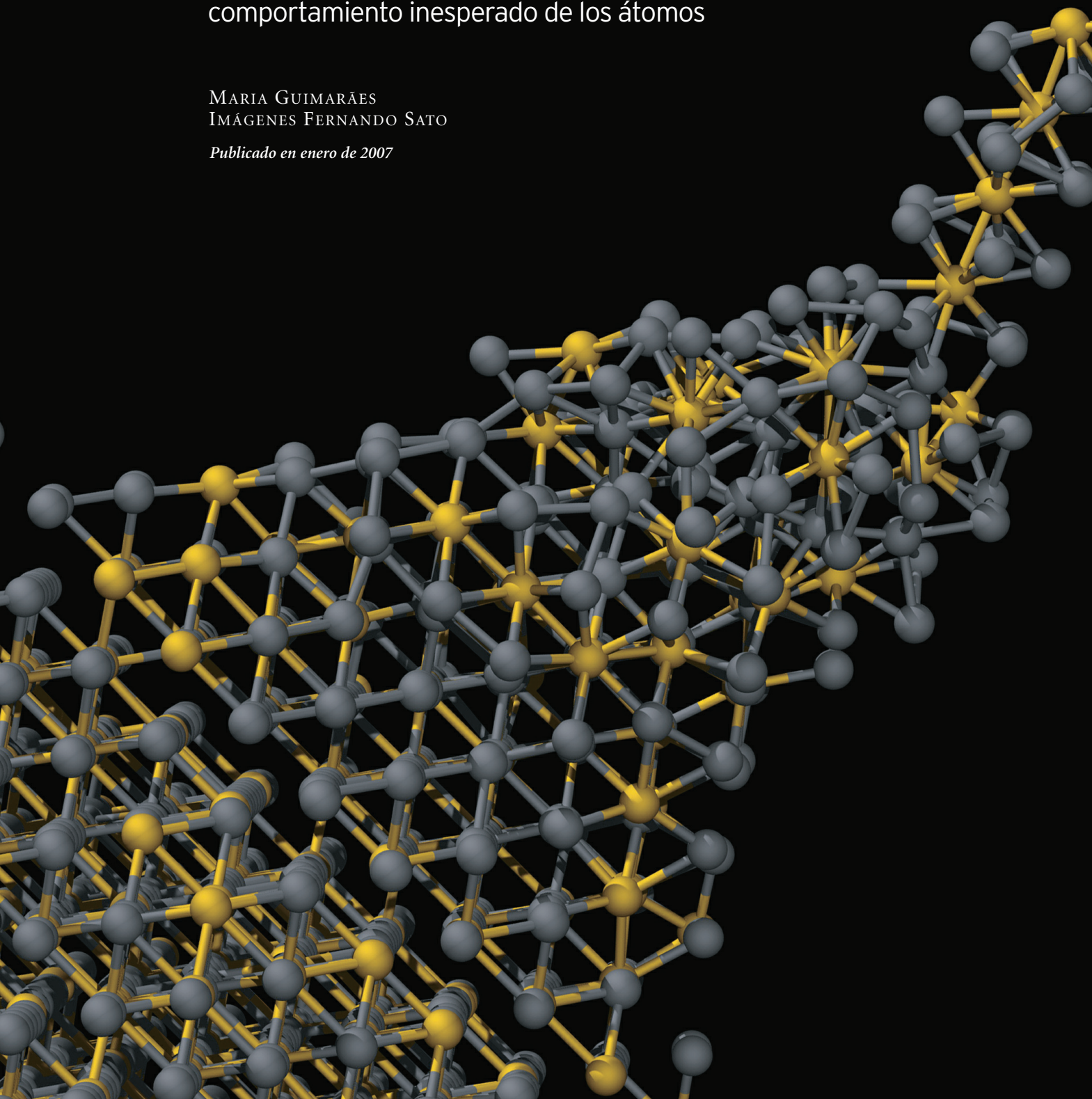
FÍSICA

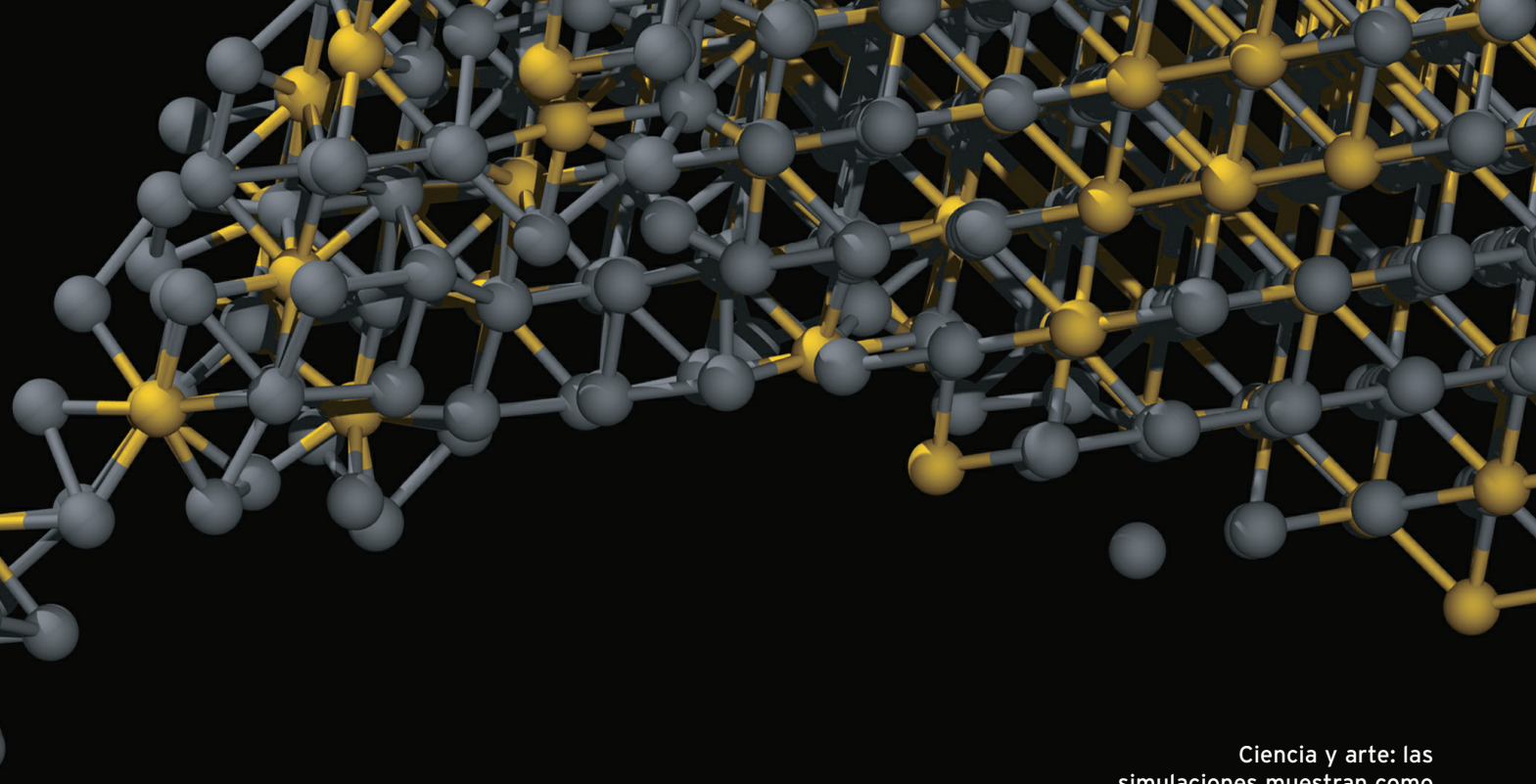
La danza da los metales

Una aleación de oro y plata observada por primera vez en la menor escala posible revela un comportamiento inesperado de los átomos

MARIA GUIMARÃES
IMÁGENES FERNANDO SATO

Publicado en enero de 2007





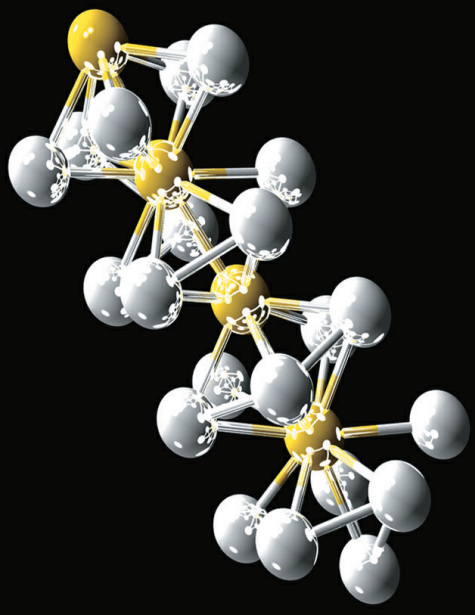
Ciencia y arte: las simulaciones muestran como se forman y si rompen las uniones entre los átomos

Una finísima lámina de oro y plata halada por las puntas se estira y afina en el medio, hasta que no tiene más como estrecharse y se rompe. Observada en un microscopio electrónico, esta imagen en movimiento, que recuerda el queso derretido que se estira entre la mordida y el bocadillo, no tiene nada de banal, pues revela lo que sucede con la lámina al nivel de los átomos, las unidades que componen la materia. A medida que la lámina se estira, las uniones entre los átomos se rompen y otras se forman, en una danza serpenteante, hasta que queda un hilo de solamente un átomo de espesor. Esos átomos alineados uno a uno parecen un collar de perlas –un collar efímero y minúsculo, formado por tres átomos, que dura sólo tres segundos.

Daniel Ugarte, físico experimental de la Universidad Estadual de Campinas (Unicamp) y del Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón (LNLS), en Campinas, es uno de los pocos que ya tuvieron el privilegio de observar un fenómeno tan raro y fugaz. Su colaboración con el grupo de físicos teóricos liderado por Douglas Galvão, también de la Unicamp, es responsable de grandes avances en el estudio de cómo los metales se comportan en escala nanométrica, de una millonésima de milímetro. Sólo después de comprendido el funcionamiento de los materiales en esa escala es que será posible utilizarlos para fines tecnológicos.

Ugarte y Galvão ya sabían que oro y plata en su estado puro se comportan de forma diferente poco antes de romperse. Ambos pueden formar el hilo con la espesura de un átomo – o cadenas atómicas suspendidas – cuando son halados en direcciones diferentes, específicas para cada metal. Recientemente, Galvão y su estudiante de doctorado Fernando Sato, en colaboración con Pablo Coura y Sócrates Dantas, de la Universidad Federal de Juiz de Fora, exploraron nuevas fronteras al simular en una computadora el comportamiento de aleaciones de oro y plata, con proporciones variadas de los dos metales. Al ver los resultados, Ugarte percibió algo intrigante: en buena parte de los casos, la liga se comportaba como el oro puro. El equipo teórico volvió entonces a analizar sus animaciones y vio que los átomos de oro emigran para la región cada vez más fina del metal estirado, en vez de mantenerse diseminados de forma homogénea por la hoja metálica. La cadena atómica suspendida, por lo tanto, casi sólo contiene oro. "Sólo cuando constituye por lo menos 80% de la liga es que la plata comienza a expresar sus propiedades", dice Ugarte, que con sus colegas relató esos resultados inesperados en la edición de diciembre de la revista científica *Nature Nanotechnology*.

Teoría y práctica - La colaboración entre Ugarte y Galvão comenzó en 2001 e involucra la rara conjunción de mentes teóricas y experimentales, además de herramientas que permiten una investigación completa, como simulaciones en computadora, microscopia, cristalografía y medición del transporte de corriente eléctrica. Cada una de esas técnicas permite in-



Moléculas en detalles: la computadora revela lo que escapa al microscopio

vestigar un aspecto diferente de esas estructuras tan pequeñas: la imagen en el microscopio muestra los átomos en movimiento, pero no distingue con seguridad los del oro de los de la plata; la cristalografía describe la conformación espacial de los átomos, pero no informa nada sobre las propiedades del transporte eléctrico del material. Es la concordancia entre los resultados obtenidos por las áreas e instrumentos diferentes que da fuerza a los descubrimientos del equipo y desvenda aquello que una mirada aislado no consigue distinguir.

Como las aleaciones metálicas no se comportan como metales puros (*vea* Pesquisa FAPESP *nº 72*), estudiar las mezclas trae novedades que podrán, en el futuro, ayudar a hacer realidad la electrónica en la escala molecular. El mayor desafío a la producción de aleaciones es impuesto por las propiedades atómicas de los materiales, que si fueran muy diferentes impiden un encaje harmonioso entre los átomos. Sato explica que la buena relación entre metales depende de la distancia entre dos átomos en el metal puro, que es específica para cada elemento. Como los átomos del oro y de la plata se organizan con distancias parecidas, la aleación que une esos dos metales es estable y más fácil de crear, y en algunas proporciones – como tres átomos de oro para uno de plata – puede hasta existir espontáneamente en la naturaleza.

Otra observación inesperada en las simulaciones de Galvão y Sato fue la estructura que aparece en las imágenes de estas páginas. Si la aleación contiene menos del 10% de oro, los átomos de plata se organizan en pentágonos alrededor de los de oro, formando un hilo de oro encapado por plata que funcionaría como un hilo eléctrico común, en una escala millones de veces menor. Por ser mejor conductor de electricidad que el cobre de los hilos comunes, el oro es usado en hilos cuando es necesario un transporte eléctrico de alta calidad.

Por ofrecer mayor resistencia al transporte de electrones, la plata funcionaría como aislante en la estructura descubierta por los físicos teóricos. Por el momento esa estructura es apenas teórica, pues surgió en las simulaciones en computadora y aún no fue observada en la realidad, pero Galvão es optimista. "Como hasta ahora los resultados experimentales han confirmado las suposiciones teóricas, las oportunidades de que la estructura en pentágonos exista de hecho es del 95%." Si el descubrimiento se confirma, podrá ser un hallazgo importante para la electrónica molecular.

Experimentos anteriores ya habían investigado el comportamiento de los componentes atómicos de aleaciones metálicas, pero Jefferson Bettini, del LNLS, fue uno de los primeros en observarlo en el microscopio en tiempo real. Otro avance es que los experimentos fueron hechos a la temperatura ambiente, lo que sólo se hizo posible en los últimos diez años, cuando el alumno de maestría Varlei Rodrigues desarrolló un aparato que, por ultra-alto vacío, crea condiciones ultralimpias en el ambiente donde se producen roturas en las placas finísimas de metal. El vacío es importante porque el ambiente tiene que estar perfectamente limpio, ya que cualquier átomo intruso puede alterar la composición del material estudiado. En general ese grado de limpieza es alcanzado al realizar experimentos a temperaturas entre menos 260º y menos 270º Celsius, que, según Ugarte, no conducen a resultados satisfactorios porque la temperatura también afecta las propiedades del metal. "En temperaturas tan bajas los materiales parecen todos iguales", explica. Vídeos que registran la ruptura del metal a temperatura ambiente y en nitrógeno líquido muestran que el metal frío no rehace sus aleaciones de forma tan dinámica como a la temperatura ambiente. En esas condiciones, el proceso es más lento, menos fluido y menos representativo que lo cotidiano. "Si un teléfono celular fuera hecho con nanohilos, tendrá que funcionar en temperatura ambiente", argumenta.

El caso de los nanohilos metálicos es un buen ejemplo de cómo la nanociencia está aún en una fase exploratoria, pues la emigración de los átomos de oro hasta el punto de ruptura y las estructuras en pentágono que protegen el hilo de oro fueron reacciones completamente inesperadas. Además de eso, Ugarte explica, "en la escala atómica los objetos son pegajosos". Un nanohilo sufre una atracción espontánea por el substrato en que está apoyado, como una fuerza de gravedad exacerbada, lo que hace muy difícil la manipulación. Pero la alumna de doctorado Denise Nakabayashi desarrolló un aparato que permite manipular hilos de 1 micrón (una milésima de milímetro).

La mayor parte de las aplicaciones de la nanotecnología aún está por llegar. Según Galvão, 80% de lo que se hace en esa área aún está en fase de entender como los metales funcionan en la escala nanométrica, para en seguida pensar en aplicaciones prácticas. Él cree que aún faltan entre diez y 15 años para que la nanotecnología forme parte de lo cotidiano. Galvão presume que, aunque las cadenas atómicas suspendidas normalmente no duren más que pocos segundos, construir nanohilos estables no será un problema: basta usar otro material como soporte. La dificultad está en construir hilos con composición conocida, de forma eficaz y controlada. Una opción es utilizar moléculas sintéticas como la Lander, construida en 2002 por investigadores dinamarque-

ses y franceses, y así llamada por parecerse a un módulo de exploración lunar.

Ella está compuesta por átomos de carbono y de hidrógeno – un eje largo con proyecciones laterales que funcionan como patas. Galvão y Sato explicaron, con simulaciones publicadas en 2004 en la revista *Nature Materials*, cómo la molécula Lander se pasea por entre átomos sueltos y deja atrás de sí pequeños tramos de nanohilos de cobre. Para construir otros nanomateriales, moléculas bajo medida pueden ser de gran utilidad. Pero Galvão destaca que buena parte de ese tipo de descubrimiento se da por casualidad. "La suerte favorece, pero el que mira tiene que estar preparado para ver."

Pero cuando sean vencidos los obstáculos técnicos y de conocimiento, se llega a eso, los nanocircuitos pueden cambiar bastante la electrónica. No sólo por su tamaño, que permitiría la fabricación de aparatos mucho menores, sino también por sus propiedades. En la escala nanométrica, la conducción de electricidad no sigue las mismas reglas del mundo macroscópico. En los nanohilos la energía viene en paquetes, en vez de ser continua como en los tomacorrientes de una casa. Pero la transmisión es eficiente, a pesar de ser inconstante. Y no disipa energía, según Ugarte, lo que significaría circuitos eléctricos que no se calientan.

A pesar de que se sabe aún relativamente poco sobre el comportamiento atómico de los materiales, el conocimiento que existe, aliado a la imaginación humana, ya permitió crear una gran cantidad de productos que pueden alegrar la Navidad de los aficionados por tecnología. La página en la internet del Proyecto sobre Nanotecnologías Emergentes (www.nanotechproject.org) trae una lista de más de 300 de ellos, que incluyen desde nanotubos de carbono para pantallas planas de monitores hasta nanopartículas de plata que combaten bacterias y hongos en embalajes para alimentos.

La alta tecnología necesaria para estudiar los átomos cuesta caro, y por eso los proyectos de Ugarte tienen presupuestos astronómicos – un microscopio electrónico puede costar de 3 millones a 7 millones de reales. Esos trabajos exigen instalaciones especiales que hicieron necesario un nuevo edificio – y cuya construcción el físico está coordinando en el LNLS. Pero, para él, lo que limita el avance de la nanociencia experimental no son recursos financieros, sino humanos. Es común que sus alumnos tengan que usar la maestría para construir o aprender a usar un equipamiento para, finalmente, aplicarlo a la investigación en el doctorado, como hicieron Varlei Rodrigues y Denise Nakabayashi.

"No se consiguen personas a las que les guste hacer bricolaje; es necesario entender, pensar, tener paciencia, equivocarse en las medidas. Los estudiantes están acostumbrados a encontrar respuestas inmediatas en la internet", observa Ugarte, que hace su parte para cambiar ese cuadro. Los mismos principios que lo orientan en la formación académica de sus alumnos Ugarte los adopta en casa. Sus hijos Pedro y Maia, de 6 y 4 años, hacen macarrón casero, bajan laderas en el carrito de ruedas hecho en casa y ya construyeron un telescopio en alianza con el padre. ■

LOS PROYECTOS

Estudio teórico multiescala de nanoestructuras puras e híbridas

MODALIDAD
Proyecto Temático

COORDINADORA
Marília J. Caldas - USP

INVERSIÓN
85.268,00 dólares y 181.110,54 reales (FAPESP)

Microscopio electrónico de transmisión analítico para la nanocaracterización espectroscópica de materiales

MODALIDAD
Auxilio a la Investigación - Regular

COORDINADOR
Daniel Ugarte - Lnls

INVERSIÓN
2.500.000 dólares (FAPESP)