

**ADALBERTO FAZZIO**

é professor titular do Departamento de Física dos Materiais do Instituto de Física da USP e presidente da Sociedade Brasileira de Física.

ADALBERTO FAZZIO

# Um nano da nano

e, por alguma catástrofe, todo o conhecimento científico fosse destruído, e somente uma única sentença pudesse ser transmitida para a próxima geração de criaturas, qual seria a frase que conteria mais informações com poucas palavras?” Com esta indagação, o físico Richard Feynman, talvez o físico mais importante do período pós-guerra, inicia seu livro *Lecture on Physics*. A resposta do eminente pesquisador foi: “Todas as coisas são feitas de átomos!”.

Não precisa ser nenhum cientista para saber que todo material é feito de átomos. Os químicos, muito antes dos físicos, já utilizavam o conceito atômico. O químico e físico inglês John Dalton formulou uma teoria quantitativa baseada nos feitos de Lavoisier. Os estudos completos de Dalton, *New System of Chemical Philosophy*, foram publicados em duas partes: a primeira em 1808 e a segunda parte em 1810. Ele acreditava que os gases eram formados por partículas da matéria (átomos) e que todos os elementos consistiam de átomos minúsculos e indestrutíveis. Os conceitos de elemento, composto e mistura aparecem pela primeira vez. Em um elemento, todos os átomos são iguais, em um composto, há átomos diferentes que são reunidos em moléculas iguais e, finalmente, na mistura, há moléculas diferentes.

É importante observar que, para Dalton, o conceito de átomo dizia respeito puramente ao peso do elemento. Pouco mais de meio século após o trabalho de Dalton, o químico russo Dmitri Ivanovich Mendeleiev organizou os átomos em uma forma padrão dentro de uma tabela, denominada Tabela Periódica dos Elementos. Todos os elementos químicos foram dispostos em ordem crescente de seu peso atômico, de forma que elementos com propriedades químicas muito semelhantes estivessem dispostos nas mesmas colunas identificadas como períodos. Na tabela publicada por Mendeleiev havia espaços vazios que, de acordo com ele, seriam preenchidos com elementos a serem descobertos. E foi o que aconteceu com os átomos de gálio, germânio e outros. Durante o século XIX muito se aprendeu sobre a combinação dos elementos atômicos para a formação de compostos.

No início do século XX, a maioria dos pesquisadores acreditava que os materiais eram formados por átomos, as menores “partículas” que, combinadas, forneciam as propriedades das moléculas e sólidos. Entretanto, um pequeno grupo de importantes cientistas positivistas não aceitava a teoria atomística. Argumentavam que átomos nunca poderiam ser vistos e, conseqüentemente, sempre permaneceriam como hipótese de “construção”. Podemos citar alguns exemplos, como: Wilhelm

Ostwald, importante químico que, por seus trabalhos na pesquisa sobre taxa de reações químicas e em catálise, recebeu o Prêmio Nobel em 1909; Jacobus van't Hoff, que foi aluno de Ostwald, recebeu o Prêmio Nobel em 1901 por sua descoberta das leis da dinâmica química e pressão osmótica; Ernst Mach, importante físico; Henry Poincaré, matemático com importantes trabalhos na área de mecânica celeste.

Na época, o elétron e a radioatividade já haviam sido descobertos e a polêmica permanecia. Nesse período, é importante salientar que Albert Einstein apresentava sua tese de doutoramento sobre as dimensões das moléculas, o que o caracteriza como um atomista convicto. Mas foi somente em 1911, com o experimento de Ernest Rutherford, que surgiu o modelo nuclear do átomo. Dois anos depois, Niels Bohr apresentava a estrutura dos átomos baseada nos resultados experimentais de Rutherford. E, finalmente, na segunda metade dos anos 20, nascia a maior revolução do pensamento científico: a física quântica, com os trabalhos de Heisenberg, Schroedinger, Bohr, Dirac, Born, Pauli e outros.

A equação de Schroedinger tornava-se a principal ferramenta para a compreensão dos materiais na escala atômica. Agora poderíamos entender, por exemplo, a condutividade elétrica dos materiais, por que uns são isolantes e outros metálicos. Por que alguns materiais são transparentes e outros opacos? As propriedades magnéticas dos sólidos só foram desvendadas em nível microscópico com a nova teoria. Os

espectros óticos de moléculas e átomos que os químicos já utilizavam para identificar as substâncias também foram explicados. A mecânica quântica mostrava que todo material é feito de átomos e como eles se comportam. Aprendemos que tudo é feito de átomos. *Na nanociência a pergunta é: o que nós podemos fazer com os átomos?*

Em dezembro de 1959, em um encontro da American Physical Society, Feynman apresentou uma palestra intitulada “Há Muito Espaço lá Embaixo”. Foi uma palestra visionária em tons proféticos. Especulou sobre a possibilidade de criarmos os nossos materiais e não nos contentarmos com o que a natureza nos forneceu. Falou da necessidade de investigar as dimensões atômicas. E ainda: “Os princípios da física, pelo que eu posso perceber, não falam contra a possibilidade de manipular as coisas átomo a átomo. Não seria uma violação das leis da física, é algo que teoricamente pode ser feito, mas que na prática nunca foi levado a cabo porque somos grandes demais”. Hoje, essa palestra é considerada o marco inicial da nanociência/nanotecnologia.

Entretanto, o avanço decisivo nessa área ocorreu vinte anos depois. Isso foi devido à grande evolução nas técnicas experimentais, ocorrida na década de 80, por exemplo, a invenção do microscópio de tunelamento (STM), por Gerd Binnig e Heirich Rohrer em 1981. Por esse trabalho, receberam o Prêmio Nobel de Física em 1986, juntamente com o inventor do microscópio eletrônico, Ernst Roska. Equipamentos esses importantíssimos no desenvolvimento da ciência dos materiais. Foi em um artigo publicado na revista *Nature*, em 1990, que os pesquisadores Eigler e Schweizer mostraram que o átomo poderia ser manipulado em um material de forma controlada – o desejo de Feynman foi realizado!

Nessa área do conhecimento não há nenhuma quebra de paradigmas no que diz respeito a mudanças nas leis da física ou a descobertas de novas partículas. A mecânica quântica é o “instrumento” fundamental na compreensão dos novos fenômenos. A grande revolução deverá ser tecnológica e os avanços acontecerão em vários setores

industriais, como: química, farmacêutica, eletrônica, energia, defesa, etc.

Uma das ferramentas que têm contribuído muito no entendimento das propriedades de materiais nanoestruturados é a simulação computacional. As técnicas para a solução da equação de Schroedinger vêm sendo empregadas em todos os ramos da nanociência. Gostaria aqui de exemplificar a atuação da física teórica/computacional no campo da nanoeletrônica.

Dentre as invenções ocorridas no século XX, não há dúvida de que a protagonizada por Bardeen, Brattain e Schockley, em 1948, foi a que mais influenciou a nossa maneira de viver: a invenção do transistor. Esse trabalho, que lhes conferiu o Prêmio Nobel de Física, foi realizado no laboratório da Bell Telephone Company e não teve uma patente registrada. Após a invenção do transistor seguiram-se importantes trabalhos de engenharia em seu aprimoramento, culminando no transistor de efeito de campo Mosfet (*metal-oxide-semiconductor field effect transistor*). Esse novo tipo de transistor poderia ser mais facilmente incorporado na produção dos *chips*.

Há mais de três décadas, o engenheiro Gordon Moore previu que a densidade de transistores em um *chip* duplicaria a cada 18 meses. Essa fantástica taxa de crescimento vem ocorrendo e é conhecida como Lei de Moore. O principal fator para o aumento na velocidade com que um computador executa uma operação é a redução no tamanho do transistor! Entretanto, sua miniaturização alcançará os limites impostos pelas leis da física. E isso deve ocorrer, no máximo, em duas décadas. Ou seja, diminuindo-se as dimensões dos materiais que compõem o transistor, suas propriedades físicas mudam e, conseqüentemente, suas funções no dispositivo serão alteradas. Enfim, sabemos que dentro do paradigma da atual arquitetura os *chips*, em breve, não mais evoluirão e a Lei de Moore será esquecida – “O fim da estrada do silício”.

Hoje, as grandes empresas de componentes eletrônicos abrem seus laboratórios para as pesquisas em caminhos alternativos – e uma delas é a nanoeletrônica molecular.

A eletrônica molecular tem por objetivo a fabricação de dispositivos cujas funções sejam determinadas por uma única molécula. A perspectiva de um dispositivo eletrônico em dimensões nanométricas ( $10^{-9}$  m), capaz de substituir o atual transistor, vem sendo o campo de pesquisa de químicos, engenheiros e físicos. A interdisciplinaridade do tema une pesquisadores das mais diversas áreas à procura de maior compreensão de todas as etapas envolvidas no processo. A tecnologia da eletrônica molecular ainda está em um estágio embrionário; encontra-se dentro dos laboratórios de pesquisa.

Trabalhar com materiais funcionalizados (dispositivos) de dimensões nanométricas implica obrigatoriamente um entendimento completo dos processos quânticos. Nesse caso, o modelamento teórico para as interpretações das medidas experimentais e com capacidade preditiva ocupa lugar de destaque na área da nanotecnologia. Temos que resolver a equação de Schroedinger para o dispositivo! Isso significa obter as informações eletrônicas, estruturais e de transporte.

Há inúmeros desafios tecnológicos para a implementação de uma eletrônica molecular. A reprodutibilidade e a estabilidade do sistema são alguns dos pontos que apresentam dificuldades. Algumas questões como: i) processo da dissipação de calor na molécula; ii) influência do acoplamento vibrônico molecular; iii) o transporte balístico de acoplamento forte com o eletrodo, etc., vêm sendo estudadas em nosso grupo teórico no IF-USP. Sabemos que são inúmeros os problemas enfrentados no campo da nanoeletrônica molecular, mas encarar desafios faz parte da rotina dos pesquisadores, o que torna a área mais excitante.

O governo dos EUA, na administração do presidente Bill Clinton, entendeu que uma nova revolução científico-tecnológica estava por vir. Então, há cinco anos, lançou o programa National Nanotechnology Initiative (NNI), com um investimento em pesquisa e desenvolvimento no valor de US\$ 470 milhões. Em seguida, as Comunidades Européia e Japonesa traçaram seus programas de apoio à nanociência. Somente

o programa americano, NNI, é estimado em US\$ 1,2 bilhão para o ano de 2005. Acredita-se que, em todo o mundo, temos 20 mil pesquisadores envolvidos em nanociência/nanotecnologia e, nos próximos quinze anos, serão necessários no mínimo 2 milhões de trabalhadores nas indústrias de nanotecnologia.

Hoje, em todos os países industrializados, quando se referem a desenvolvimento, inovação e pesquisa, a palavra *nano* está presente. No Brasil também há esforços por parte do Ministério da Ciência e Tecnologia (MCT), com ações voltadas para o progresso na área de nanociência/nanotecnologia. O governo federal, em seu Plano Plurianual, coloca a nanotecnologia como um campo prioritário no crescimento industrial do país.

Junto com o apoio governamental vêm as universidades brasileiras, principais agentes no desenvolvimento das pesquisas, as quais devem participar de forma mais abrangente, em especial, na formação de recursos humanos. É imperioso que os nossos estudantes de graduação, pós-graduação em diferentes áreas, como química, física, engenharia, biologia e matemática, tenham em sua formação disciplinas que contemplem os novos avanços da ciência ocorridos na nanociência.

Enquanto na Europa, EUA e Ásia as universidades estão criando em seus programas novos institutos, modificando sua grade curricular, incentivando o doutoramento, etc., objetivando inserir essa revolução na agenda acadêmica, no Brasil, as universidades, em sua grande maioria, ainda não despertaram para os novos horizontes do conhecimento. As ações têm se restringido a pequenos grupos de pesquisadores, sem uma ação maior dos dirigentes universitários. Em uma estrutura arcaica de departamentos, a multidisciplinaridade passa a ser um estorvo.

A mais importante universidade brasileira, a USP, não pode se colocar como uma espectadora da grande transformação que vem ocorrendo na ciência e tecnologia. Temos que participar de forma mais prospectiva, diminuir a retrospectiva e ser um dos protagonistas dessas mudanças.