

## **Pesquisadores simulam formação de serpentinas de carbono**

### **Física**

Enviado por:

Postado em:02/07/2013

São Paulo – Um grupo de pesquisadores do Instituto de Física Gleb Wataghin (IFGW) da Universidade Estadual de Campinas (Unicamp), em colaboração com colegas das universidades federais de Roraima e de Minas Gerais e do Instituto Weizmann, de Israel, conseguiu simular e desenvolver um modelo de formação de serpentinas de nanotubos de carbono. Os resultados do estudo, que fazem parte de um trabalho de doutorado feito com Bolsa da FAPESP, ganharam destaque na capa da edição de março da revista *Physical Review Letters*. A formação de serpentinas poderá permitir a utilização de nanotubos de carbono na produção de nanocircuitos eletrônicos e em nanocircuitos. Apesar de terem sido descobertos há décadas e despertarem interesse por suas propriedades únicas, sejam elas mecânicas, eletrônicas, ópticas ou térmicas, os nanotubos de carbono ainda apresentam desafios para serem aplicados em áreas como a nanoeletrônica. Isso porque ainda é possível controlar a formação de grandes quantidades dessas estruturas cilíndricas em escala nanométrica (bilionésima parte do metro), ocas como canudos, leves, condutoras e dezenas de vezes mais resistentes do que o aço, de modo que tenham o mesmo diâmetro, comprimento e propriedades elétricas. Uma alternativa explorada por alguns grupos de pesquisa no mundo é o desenvolvimento de um único nanotubo muito longo, na forma de uma serpentina, com vários microns de comprimento (milionésima parte do metro) e segmentos paralelos, com as mesmas propriedades elétricas ao longo de toda sua extensão. No entanto, até agora, não se sabia como esse material é formado. “Só se tinha uma vaga ideia do mecanismo de formação das serpentinas de nanotubos de carbono, mas o grupo do professor Ernesto Joselevich, do Instituto Weizmann, que foi pioneiro no desenvolvimento desse material, buscava um modelo realmente físico para entender melhor esse sistema de modo que seja possível controlá-lo”, disse Leonardo Dantas Machado, primeiro autor do trabalho, à Agência FAPESP. “Em contato com o grupo de Joselevich e de outros físicos experimentais, começamos a reproduzir o processo de formação dessas estruturas e ver como elas surgem”, disse Machado. Utilizando placas gráficas de alto desempenho, os pesquisadores simularam em computador como é feita a síntese de serpentinas de nanotubos de carbono em que, experimentalmente, partículas catalisadoras são colocadas sobre substratos de quartzo com degraus – como degraus em uma escada –, que são inseridos dentro de um forno em um tubo de quartzo cristalino com controle automatizado de temperatura e de fluxo dos gases argônio, etileno e hidrogênio. Os nanotubos são crescidos e se autoarranjam em serpentinas durante esse procedimento, que não pode ser visualizado diretamente. Por isso era importante simulá-lo. Os cientistas demonstraram por meio das simulações que, ao colocar nanotubos de carbono longos (com aproximadamente 1 micron de comprimento) na superfície desses substratos de quartzo com degraus e aplicar uma força – como um leve empurrão durante um curto intervalo de tempo no topo da “escada” –, os nanotubos caem ao longo dos degraus apresentando movimentos oscilatórios, como fios de espaguete deslizando sobre a superfície de um escorredor de macarrão. Enquanto a parte do nanotubo em contato com os degraus do substrato forma estruturas como uma serpentina, a parte suspensa exibe movimentos aleatórios, como a cabeça de uma serpente. “Conseguimos ver, por meio das simulações que

envolveram vários milhões de átomos, como as serpentinas de nanotubos de carbono se formam, tal como os físicos experimentais previam”, disse o professor Douglas Soares Galvão, do Grupo de Sólidos Orgânicos e Novos Materiais do Departamento de Física Aplicada do IFGW. “Apesar de os detalhes não serem exatamente iguais aos que o grupo israelense [os físicos experimentais] imaginava, pudemos verificar na simulação que a hipótese que eles tinham, que era a de um espaguete caindo em uma escada, estava correta”, disse Galvão, orientador da pesquisa de doutorado de Machado. Outras descobertas feitas nas simulações realizadas pelo grupo dão conta de que o fluxo de gás e a colocação de nanopartícula na extremidade do substrato são importantes na formação da serpentina por ajudarem a diminuir as oscilações e, conseqüentemente, contribuir para a formação de serpentinas mais uniformes. Os pesquisadores também observaram que os degraus são muito mais importantes do que o tipo de material que compõe o substrato para a formação das serpentinas. “Fizemos um teste com grafite, por exemplo, e verificamos que, mesmo sendo um substrato bastante liso, desde que tenha degraus ele pode ser utilizado para formar serpentinas de nanotubos de carbono”, contou Machado. Aplicações De acordo com os pesquisadores, uma aplicação imediata das serpentinas de nanotubos de carbono seria na produção de nanocircuitos eletrônicos, com mais precisão e comportamento próximo do esperado. Como podem ser transferidos facilmente de um substrato para outro – porque têm estabilidade mecânica suficiente e são nanotubos únicos, com todos os segmentos paralelos e as mesmas propriedades ao longo de toda a sua extensão –, é possível utilizá-los para construir nanocircuitos. “Com as serpentinas podemos fazer um circuito em que todos os segmentos paralelos têm as mesmas propriedades eletrônicas, uma vez que os segmentos são feitos do mesmo tubo”, explicou Machado. Atualmente, o grupo brasileiro simula estruturas de carbono em outros tipos de substratos e com geometrias diferentes das serpentinas. “Para nós, sempre que tiver um sistema novo de nanotubo de carbono ordenado em um substrato com fluxo de gases, podemos tentar entender melhor como foi a formação desse sistema e, com isso, controlar melhor suas propriedades”, afirmou Machado. Esta notícia foi publicada no dia 02/07/2013 no site <http://exame.abril.com.br>. Todas as informações contidas são responsabilidade do autor.