

Do metal ao carbono, da Unicamp a Cambridge



Pedro Alves da Silva Autreto (à dir.), autor da tese, com o professor Douglas Soares Galvão, orientador: ferramentas teóricas

Jovem físico do IFGW ganha projeção internacional com pesquisas na área de nanoestruturas

CARMO GALLO NETTO
carmo@reitoria.unicamp.br

Não é fácil tornar palatável ao leitor não especialista assuntos que envolvam tratamentos computacionais. Neste terreno, talvez, os temas referentes às nanotecnologias sejam os que ofereçam maiores dificuldades. Em vista dessa recorrência, surpreende encontrar pesquisadores da área que consigam apresentar seus trabalhos de forma inteligível e didática para outros profissionais e até mesmo para leigos. A surpresa é maior quando se depara com um estudioso que, além de realizar trabalhos de ponta em grupo de prestígio internacional, tem significativo número de publicações em periódicos de primeira linha e participação constante em congressos de prestígio internacional. E que, além de tudo, revela-se um especialista antenado com seu tempo, ligado a atividades extracurriculares, preocupado com o desenvolvimento social e as relações humanas, orgulhoso de seu grupo de pesquisa e que vê como altamente amigáveis e fundamentais as relações com seus pares, professores e pesquisadores brasileiros e estrangeiros. Essa é a imagem que se tem do jovem físico Pedro Alves da Silva Autreto, do grupo orientado pelo professor Douglas Soares Galvão, do Departamento de Física Aplicada, do Instituto de Física Gleb Wataghin (IFGW) da Unicamp.

Logo no início da tese – em que sugere novas nanoestruturas e caracteriza suas propriedades –, Autreto lembra que a nanotecnologia teve seu início simbólico em palestra proferida em 1959 pelo físico Richard Feynman, que ganharia o Prêmio Nobel em 1965. Sob o tema “Há muito espaço lá embaixo”, Feynman destacava a possibilidade de criação de novos materiais, desenhados especialmente com o objetivo de apresentar determinadas propriedades eletrônicas.

Desde então, grandes avanços têm sido feitos e começaram a ser produzidas estruturas antes nunca imaginadas ou tidas como altamente improváveis. As propriedades dessas estruturas suscitaram uma grande gama de aplicações em que assume particular interesse a utilização da condutância quantizada, ou seja, a condução que não ocorre de forma contínua, mas se dá segundo determinados platôs energéticos, os *quanta*. A busca por estruturas com propriedades únicas e desejadas se tornaram incessantes, ampliando-lhes a presença no cotidiano. Esse avanço tem exigido cada vez mais o

emprego de ferramentas teóricas que possam ajudar na previsão da forma de obtê-las e das condições de formação e, também, na determinação da geometria, da condutância e das demais características eletrônicas que lhe estão associadas e que determinam seus usos.

Neste contexto, as simulações computacionais ganham destaque no estudo teórico das nanoestruturas, facilitadas pelo poder cada vez maior dos computadores e pelo fato de envolver sistemas, em geral, constituídos de poucos átomos. O pesquisador focou então seu trabalho no estudo e sugestões de novas estruturas nanométricas compostas de metal ou de carbono. Ele explica: “Fiz simulações que possibilitaram a reprodução, por processos computacionais, de nanoestruturas já obtidas experimentalmente: nanofios de platina, prata e ouro; nanotubos de metais e de carbono; e ainda do grafeno – que constituem as estruturas mais importantes da nanotecnologia atualmente. Depois de simular as estruturas já conhecidas, propus outras possibilidades de materiais a partir delas”. Mais ainda: várias das simulações possibilitaram respostas a problemas que os experimentalistas não tinham condições de dar.

Assim é que, por exemplo, nos nanofios, os experimentadores obtêm imagens e condutâncias, mas não conseguem estabelecer experimentalmente que imagem observada corresponde a que condutância medida, problema que a simulação resolveu. Outro exemplo está ligado a cadeias atômicas lineares. Estas se formam puxando um fio metálico até obter um segmento constituído de átomos alinhados em uma carreira única, composta de no máximo três ou quatro deles. Verificou-se nas imagens que a distância entre dois dos átomos de ouro era maior que as que separavam os demais átomos da cadeia. Várias possibilidades foram aventadas para explicar a observação, mas nenhuma verificável ao microscópio.

Autreto conseguiu mostrar através da simulação que esses dois átomos de ouro mais distanciados aprisionavam entre si um átomo de carbono. Encerrava-se uma discussão de anos na literatura. O estudo rendeu um artigo publicado na *Nanotechnology*, revista de grande impacto. As cadeias atômicas lineares assumem particular importância no desenvolvimento da mecânica quântica básica. Nesses trabalhos, enfatiza Autreto, teve o privilégio de trabalhar em estreito contato com o grupo experimental, referência na área, do professor Daniel Ugarte (IFGW), mais especificamente com o então doutorando Maureen Lagos.

O principal objetivo do estudo foi o de mostrar que variadas nanoestruturas de metais ou carbono podem ser empregadas para finalidades afins ou diferentes e evidenciar o amplo espectro de utilização desses materiais. Além disso, o trabalho procura elucidar como as estruturas se formam, que tensões suportam, como se rasgam e como ocorre o transporte eletrônico a partir delas, pois são os patamares de condutância que possibilitam aplicações em transistores e outros dispositivos eletrônicos.

Percurso

Depois do mestrado também na Unicamp, Autreto realizou doutorado sanduíche

permanecendo um ano na Universidade de Cambridge, na Inglaterra, um dos mais importantes centros de física, que deu origem a 26 prêmios Nobel e berço de grande parte da física do século XIX. Lá trabalhou com o professor Emilio Artacho, que desenvolve um método inovador para estudos de nanoestruturas, “embora o meu trabalho fosse desenvolvido aqui, pois nossa estrutura nos permite competir internacionalmente no nível teórico”, diz.

Na fase final do doutorado, o pesquisador participou de concurso internacional para preenchimento de uma vaga de pós-doutorado no Laboratório Internacional de Nanotecnologia (INL), mantido com cooperação internacional, concorrendo com mais de 50 candidatos do mundo. Foi o selecionado para um pós-doutorado de três anos. Ele credits o sucesso ao pioneirismo da Unicamp na sua área de atuação: “Certamente, os selecionadores levaram em conta, além do meu percurso acadêmico, o trabalho desenvolvido aqui em nosso grupo”. Problemas familiares o levaram a desistir do INL. Pesou também na decisão o fato de fazer parte de um grupo considerado de referência na área. Ele vivencia esse prestígio ao participar de congressos internacionais para os quais membros do grupo são sempre convidados para apresentações orais. Destaca sua participação, nos últimos quatro anos, nas reuniões promovidas pela Material Research Society (MRS), sociedade que organiza dois dos maiores eventos de física e materiais do mundo, realizados anualmente na primavera e outono, respectivamente, em Boston e São Francisco. Por tudo isso, Autreto se considera totalmente compensado com a permanência no grupo da Unicamp para o pós-doutorado.

Segundo ele, a excelência do trabalho realizado na Unicamp se deve ao fato de o professor Douglas Soares Galvão manter-se atento aos materiais que se revelam importantes, além de sua contínua e ativa participação em congressos, quando estabelece contatos com profissionais de vários níveis de atuação, de técnicos a pesquisadores de ponta. Destaca ainda o significativo e contínuo contato com grupos experimentais da Unicamp, em especial o do professor Daniel Ugarte, referência em sua área. Considera a sua evolução consequência dessa atuação: “Comecei a trabalhar com nanoestruturas metálicas, que eram o que havia de mais importante na época. Mas à medida que as coisas foram avançando o professor Douglas percebeu que o grafeno revelava-se um material extremamente promissor. Para seu estudo adaptamos então os mesmos métodos que utilizávamos para metais”.

Autreto atribui à multidisciplinaridade inerente ao seu trabalho o desenvolvimento de linguagens que possam ser entendidas por profissionais de outras áreas de atuação como engenheiros, químicos, biólogos, etc. Mas ao afirmar, nas conclusões da tese, que “apenas a pesquisa não forma um doutor em ciências e por isso busquei sempre participar de atividades disponibilizadas neste centro de excelência, que é o Instituto de Física”, ele destaca outros fatores que pesaram em sua formação. No Instituto foi durante quatro anos editor-geral da revista *Physicae* – que lhe permitiu acesso a dezenas de artigos; presidente da Associação

de Pós-graduação em Física – quando desenvolveu relações humanas; e participou da organização de três Encontros de Jovens Pesquisadores – que lhe possibilitaram conhecer pesquisas e pesquisadores brasileiros e de outros países.

Propostas

A simulação computacional é hoje uma ferramenta frequentemente utilizada por conduzir a resultados confiáveis e possibilitar o estabelecimento de correlações e de previsões possíveis em escala nanométrica. Utilizando esse recurso, o autor sugere no trabalho desenvolvido novas nanoestruturas de metal ou carbono. Buscou inicialmente verificar a influência de alguns fatores, dentre eles a orientação cristalográfica dos grãos na formação do mais fino fio de platina. Depois, dedicou-se a localizar os possíveis contaminantes responsáveis por distâncias anômalas observadas entre átomos de ouro nas cadeias lineares do metal. Na sequência, determinou as correlações entre estruturas e condutâncias de nanofios de ouro e prata e estudou a formação de cadeias lineares em ligas de ouro e prata. A seguir dedicou-se a uma das estruturas de maior destaque descobertas na atualidade: o menor nanotubo composto por prata e que apresenta uma seção transversal quadrada. Os avanços aí conseguidos foram publicados na *Physical Review Letters*. Com base nesses tubos ele propôs uma nova estrutura similar formada por carbonos. O trabalho foi publicado no *The Journal of Chemical Physics*. Passou depois para um estudo teórico do grafeno, publicado na *Nanotechnology* e que, em decorrência das citações, passou a ser referência no estudo desse material. A seguir ele desenvolveu simulações do grafeno e fluorografeno, obtidos, respectivamente, a partir da hidrogenação e da fluoração de membranas de grafeno. Em decorrência, simulou o processo para a obtenção de uma nova nanoestrutura obtida a partir do grafeno pela adição de hidrogênio e flúor.

Autreto esclarece, também, que cada capítulo da tese apresenta um avanço no estudo das novas estruturas e está baseado ao menos em um artigo publicado ou submetido. Nos últimos quatro anos ele tem participado com pôsteres e apresentações orais principalmente em congressos internacionais. Em 2010 chegou a fazer apresentação na seção principal do MRS presidida pelo físico Konstantin Novoselov, Prêmio Nobel daquele ano, que o tinha abordado anteriormente em Cambridge, por ocasião da apresentação de um pôster envolvendo um trabalho por ele já divulgado.

Nas conclusões da tese ele afirma: “Ao final de quatro anos de profundas transformações chego à conclusão de que quanto mais leio, mais converso, mais estudo, mais novas e incríveis estruturas e temas aparecem como se aquele espaço referido por Feynman fosse infinito”.

Publicação

Tese: “Do metal ao carbono: propriedades estruturais e de transporte de novas nanoestruturas”
Autor: Pedro Alves da Silva Autreto
Orientador: Douglas Soares Galvão
Unidade: Instituto de Física Gleb Wataghin (IFGW)