

SIMULAÇÕES DE AGREGADOS ATÓMICOS E NANOTECNOLOGIA

Carlos Fiolhais

Centro de Física Computacional
Departamento de Física da Universidade de Coimbra, P-3000 Coimbra
tcarlos@teor.fis.uc.pt

O mundo é feito de átomos. Esta é, segundo o físico Richard Feynman, a verdade mais essencial do nosso corpo de ciência. As moléculas, nos líquidos e nos gases, são conjuntos de átomos ligados. Os sólidos são conjuntos imensos de átomos ordenados numa rede cristalina.

Nos últimos anos, tem-se desenvolvido muito a investigação, teórica, computacional e experimental, sobre *agregados atómicos*, que são conjuntos de átomos com tamanho intermediário entre o das moléculas pequenas e o dos sólidos extensos. Por exemplo, pode ter-se um só átomo de sódio, uma molécula de 2 átomos de sódio (ou dímero), um agregado de 20 átomos de sódio ou ainda o metal sódio, com propriedades macroscópicas. A preparação de agregados no laboratório consegue-se por meio de vaporização laser e pelo transporte dos agregados em feixes moleculares para instrumentos (como espectrómetros de massa, por exemplo) onde são analisados.

Do ponto de vista teórico, levantam-se muitas questões interessantes. Como se passa das propriedades de um só átomo para as propriedades de um sólido? Qual é, para uma dada substância, o número mínimo de átomos para se poder falar de rede cristalina? Quais são os agregados mais estáveis e porquê? As simulações computacionais são uma ferramenta insubstituível para procurar e obter resposta a estas questões. As experiências com agregados isolados, cada vez mais sofisticadas e esclarecedoras, têm vindo a confirmar os resultados de simulações. O domínio da Física de Agregados, no qual entroncam tanto a Física Atómica e Molecular como a Física do Estado Sólido e a Química Quântica é uma nova área da Física.

São apresentadas algumas das investigações computacionais sobre agregados atómicos realizadas recentemente no Centro de Física Computacional da Universidade de Coimbra. Focam-se, em particular, a cisão de agregados atómicos e a optimização da estrutura de agregados tanto neutros como carregados.

As aplicações dos agregados são promissoras: catálise, aerossóis, filmes finos. Existe até uma nova disciplina técnica, a *nanotecnologia*, que trata os objectos cuja ordem de grandeza são alguns nanómetros ($1 \text{ nm} = 0,000\ 000\ 001 \text{ m}$), precisamente o tamanho típico dos agregados. Em princípio, podem construir-se máquinas minúsculas com base em átomos, moléculas e agregados. Feynman afirmou numa palestra nos anos 50 que "há muito espaço lá em baixo", querendo com isso dizer que, à escala atómica e molecular, havia muito espaço para ser explorado pelos físicos. O passado recente deu-lhe razão. O futuro próximo dar-lhe-á concerteza ainda mais razão. O Sr. Feynman não estava a brincar!