

## Materiais Auto-Organizados

Pesquisa revela os mecanismos físicos presentes em processos de crescimento de mesocristais durante a agregação orientada espontânea de nanocristais de prata metálica.

*Mecanismos de crescimento cristalino, cinética de reação química e evolução de microestruturas possuem papel fundamental na fabricação de materiais com tamanhos e forma controlados. Em particular, a agregação orientada é um processo no qual a auto-organização espontânea de nanocristais adjacentes resulta no crescimento de cristais pela adição de partículas sólidas que compartilham uma orientação cristalográfica comum.*

[Xue et al., 2014] em tradução livre.

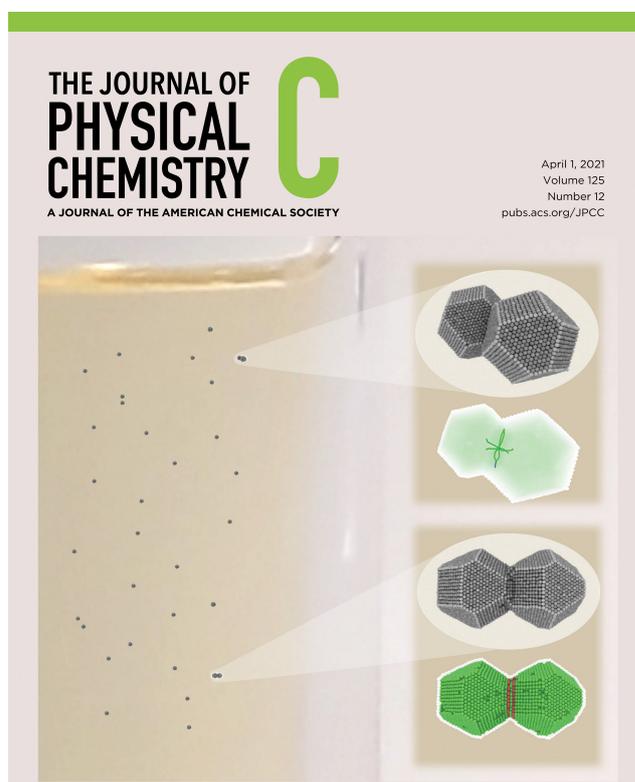
Considere a seguinte experiência: um sal que contém prata é dissolvido em solução aquosa e misturado a um polímero líquido. Em seguida, deixa-se a mistura descansar numa temperatura fixa. Com o passar do tempo surgem pequenos particulados que podem ser filtrados e separados do líquido. A análise destes particulados permite descobrir que são feitos de prata pura, oriunda do sal usado como reagente. Realizam-se então variações deste processo, descobrindo-se que a geometria do particulado se altera em função de parâmetros termodinâmicos presentes durante o processo de reação, possibilitando produtos nanoscópicos com uma variedade de formatos: cilindros, grãos de arroz, esferas e placas 2D. Esta descoberta forneceu uma rota para a síntese de diversos nanomateriais de prata a partir dos mesmos reagentes químicos [Liang et al., 2012].

Ao se observar alguns destes nanomateriais utilizando microscopia eletrônica de transmissão, notou-se a existência de uma organização cristalina atípica, inexistente em materiais convencionais. Nesta organização, defeitos periódicos e padronizados separam domínios cristalinos, fato que pode ser aproveitado para a construção de dispositivos e sensores.

Enquanto estes avanços práticos ocorriam nos laboratórios, algumas questões permaneciam sem resposta:

- Por que estes materiais se formam desta maneira?
- O que são os defeitos peculiares observados?
- Como induzir um resultado desejado?

Para contribuir com as respostas para estas perguntas, o trabalho desenvolvido pelos professores Giovanni M. Faccin (UFGD), Zenner S. Pereira (UFERSA) e Edison Z. da Silva (UNICAMP) empregou a simulação computacional para estudar a interação entre modelos de nanocristais de prata similares aos observados experimentalmente. Foram utilizados 160 ensaios computacionais, equivalentes a experimentos virtuais, operacionalizados em supercomputadores. Após quatro meses de processamento de dados, foram produzidos eventos suficientes para a observação detalhada da formação da interface entre nanocristais de prata, possibilitando descrever a evolução das mesmas até a formação



ACS Publications  
Most Trusted. Most Cited. Most Read.

www.acs.org

dos defeitos cristalinos observados nas experiências de laboratório. O estudo revelou que os fenômenos derivam da emergência e inter-relação de dois processos metalúrgicos: a transformação martensítica e discordâncias parciais de Shockley (destacados na figura), os quais, em ação, coordenam a auto-agregação dos nanocristais estudados rumo às estruturas observadas experimentalmente. O trabalho *How Crystallization Affects the Oriented Attachment of Silver Nanocrystals* encontra-se em destaque na edição de 01 de Abril de 2021 do *The Journal of Physical Chemistry C*, periódico da Sociedade Americana de Química [Faccin et al., 2021].

## Referências

- G. M. Faccin, Z. S. Pereira, and E. Z. da Silva. How crystallization affects the oriented attachment of silver nanocrystals. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2021. URL <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c10321>. Article ASAP.
- H. Liang, H. Zhao, D. Rossouw, W. Wang, H. Xu, G. A. Botton, and D. Ma. Silver nanorice structures: Oriented attachment-dominated growth, high environmental sensitivity, and real-space visualization of multipolar resonances. *Chemistry of Materials*, 24(12):2339–2346, 2012. URL <https://doi.org/10.1021/cm3006875>.
- X. Xue, R. L. Penn, E. R. Leite, F. Huang, and Z. Lin. Crystal growth by oriented attachment: kinetic models and control factors. *CrystEngComm*, 16:1419–1429, 2014. URL <http://dx.doi.org/10.1039/C3CE42129E>.

## Financiamento

Giovani M. Faccin agradece ao IFGW-Unicamp pelo apoio institucional a este trabalho e à UFGD pelo suporte financeiro através do programa de apoio à pesquisa (PAP) - Edital PROPP n° 02/2021. Edison Z. da Silva agradece ao apoio financeiro da FAPESP (2013/07296-2, 2016/23891-6 e 2017/26105-4) e CNPq. Este trabalho utilizou recursos computacionais do Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho em São Paulo (Cenapad-SP), Centro de Computação John David Rogers (CCJDR-Unicamp) e SDumont (LNCC).