

## Irradiação por Laser e Feixe de Elétrons em Haletos de Prata

Estudo computacional desenvolvido por pesquisadores do IFGW sobre a irradiação por laser e feixe de elétrons em semicondutores compostos por prata foi capa principal da revista *Nano Letters*, volume 24.

Por Prof. Edison Z. da Silva: [zacarias@ifi.unicamp.br](mailto:zacarias@ifi.unicamp.br), e Dr. Luís A. Cabral: [lcabral@ifi.unicamp.br](mailto:lcabral@ifi.unicamp.br)

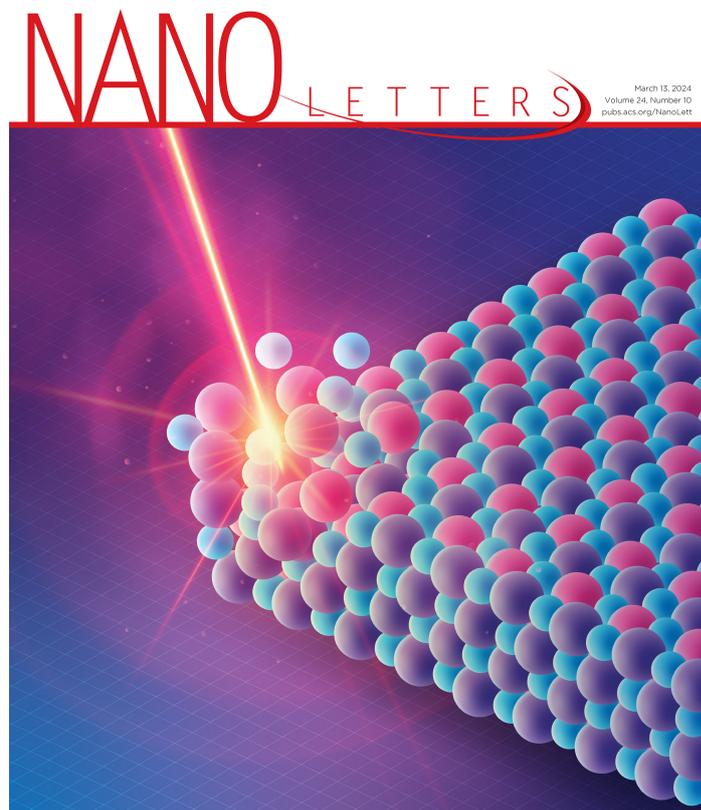
Os efeitos da incidência por laser e feixe de elétrons nas propriedades estruturais e eletrônicas de diferentes polimorfos de haletos de prata são investigados usando uma abordagem por primeiros princípios.

Nos últimos anos, a irradiação a laser (LI) e a irradiação eletrônica (EI) em materiais tornaram-se ferramentas poderosas e inovadoras para modificação de materiais em escala nano/atômica, e inspiram pesquisas fundamentais focadas em potenciais aplicações tecnológicas. Tanto a LI quanto a EI oferecem capacidades únicas para energizar materiais com alta eficiência e respeito ao meio ambiente. Especificamente, a LI fornece a energia necessária para induzir excitações eletrônicas que podem modificar significativamente as propriedades do material irradiado. Por outro lado, a EI pode ser condensada em nanômetros através de componentes ópticos, enquanto a energia pode ser transferida para a área alvo através do espalhamento inelástico de elétrons incidentes. Nestes processos, os elétrons são excitados rapidamente (algumas dezenas de femtossegundos) em comparação com o tempo de difusão do calor. Posteriormente, a energia eletrônica se dissipa na rede.

No presente trabalho, estudamos a mudança das propriedades estruturais e eletrônicas e os mecanismos envolvidos ao longo da LI e EI nos polimorfos AgX ( $X = \text{Cl}, \text{Br}$  e  $\text{I}$ ). O modelo de duas-temperaturas (TTM) foi selecionado para simular o efeito da LI, que adota a teoria do funcional da densidade de temperatura finita (FT-DFT) e a temperatura eletrônica ( $T_e$ ) para descrever a excitação de elétrons. Esta estratégia computacional foi empregada com sucesso para investigar os efeitos da LI em semicondutores [1], enquanto as modificações induzidas por EI são investigadas pela adição de elétrons ( $N_e$ ) nos polimorfos AgX. Posteriormente, simulações de dinâmica molecular *ab initio* (AIMD) foram realizadas para analisar a evolução temporal dessas propriedades sob excitações eletrônicas e adição de elétrons. Selecionamos o AgCl e o AgBr em fases rock-salt e blenda de zinco, enquanto o polimorfo AgI foi adicionalmente considerado em fase wurzita.

Os resultados atuais possuem o potencial de beneficiar diversas comunidades científicas nas áreas de ciência de materiais, física, química e engenharia, oferecendo conhecimentos abrangentes sobre procedimentos assistidos por LI/EI, permitindo projetar a próxima geração de materiais eletrônicos, contribuindo com a indústria de semicondutores e nanotecnologia. “Nos últimos anos, a irradiação por laser e elétrons (LI/EI) tornaram-se ferramentas poderosas e inovadoras para modificar materiais semicondutores em escalas nano/atômicas. Isto requer uma compreensão detalhada da evolução estrutural de processos fora do equilíbrio iniciados por essas irradiações”, explica o Prof. Edison Z. da Silva. Este trabalho continua como uma linha de pesquisa ativa no grupo [2] e faz parte de uma colaboração com pesquisadores do CDMF e da UJ-1.

Este tema de pesquisa desenvolvido pelos pesquisadores do IFGW tem atraído a atenção da comunidade científica, pois o alto custo computacional e a complexidade das simulações envolvendo a incidência de lasers são barreiras que devem ser vencidas. Nesse sentido, os pesquisadores do IFGW tem ganhado distinções acadêmicas, como a menção honrosa pelo artigo publicado na revista *PhysChem* em 2022 [1], sendo um dos papers mais acessados daquele período. E este ano, a pesquisa foi destaque como capa



ACS Publications  
Most Trusted. Most Cited. Most Read.

[www.acs.org](http://www.acs.org)

Figura 1: Artigo capa da revista *Nano Letters*, volume 24.

principal (Figura 1) da revista *Nano Letters* no volume 24, fascículo 10 [2]. Essas méritos ilustram a importância desse tema de pesquisa e as contribuições científicas dos pesquisadores do IFGW.

### FINANCIAMENTO

Esta pesquisa teve apoio da FAPESP: 2018/20729-9, 2021/09187-2 (LC); 2013/07296-2, 2016/23891-6 (EZS, MSM and EL), 2017/26105-4 (EZS, MSM).

### Referências

- [1] Luis Cabral, Juan Andrés, Elson Longo, Miguel A. San-Miguel, and Edison Z. da Silva *Formation of Metallic Ag on AgBr by Femtosecond Laser Irradiation*. *Physchem* **2**, 179(2022). <https://doi.org/10.3390/physchem2020013>.
- [2] Luis Cabral, Edson R. Leite, Elson Longo, Miguel A. San-Miguel, Edison Z. Silva, Juan Andrés *Disentangling the Effects of Laser and Electron Irradiation on AgX (X = Cl, Br, and I): Insights from Quantum Chemical Calculations*. *Nano Lett.* **24**(10), 3021(2024). <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.3c04130>.