



B1

ISSN: 2595-1661

ARTIGO ORIGINAL

Listas de conteúdos disponíveis em [Portal de Periódicos CAPES](#)

# Revista JRG de Estudos Acadêmicos

Página da revista:

<https://revistajrg.com/index.php/jrg>

ISSN: 2595-1661

Revista JRG de  
Estudos Acadêmicos

## Nitrato de Ouro em Nanoescala: Um estudo de Suas Propriedades

Gold Nitrate at Nanoscale: A Study of Its Properties

DOI: 10.55892/jrg.v7i14.995

ARK: 57118/JRG.v7i14.995

Recebido:02/02/2024 | Aceito: 19/04/2024 | Publicado on-line: 22/04/2024

### Iury Thiago Dias Botelho<sup>1</sup>

<https://orcid.org/0009-0009-0486-0968>

<http://lattes.cnpq.br/4655891825085202>

Universidade Estadual do Maranhão, MA, Brasil

E-mail: iurythiago58@gmail.com

### Maria Leticia da Cruz Almeida<sup>2</sup>

<https://orcid.org/0009-0008-5935-9399>

<http://lattes.cnpq.br/6293038824789467>

Universidade Estadual do Maranhão, MA, Brasil

E-mail: marialeticia1950@icloud.com

### João Vítor Melonio Silva<sup>3</sup>

<https://orcid.org/0009-0009-7450-2103>

<http://lattes.cnpq.br/4056301821891530>

Universidade Estadual do Maranhão, MA, Brasil

E-mail: vitormelonio319@gmail.com

### Suelen Rocha Botão Ferreira<sup>4</sup>

<https://orcid.org/0000-0001-7781-6532>

<http://lattes.cnpq.br/1272233351902347>

Centro Universitário Estácio de São Luís, CESPI, MA, Brasil

E-mail: suelen.rocha@gmail.com

### Welberth Santos Ferreira<sup>5</sup>

<https://orcid.org/0000-0001-7141-9501>

<http://lattes.cnpq.br/2273476262901351>

Universidade Estadual do Maranhão, MA, Brasil

E-mail: welberthsf@gmail.com



## Resumo

A transição da mecânica clássica para a teoria quântica marcou um ponto de inflexão na história da física, impulsionando avanços notáveis e abrindo caminho para a nanociência e nanotecnologia. Com esses materiais podemos encontrar propriedades exclusivas de acordo com o tamanho dos nanomateriais. Este estudo visa encontrar as propriedades ópticas e estruturais das nanopartículas de nitrato de ouro, utilizando modelagem computacional avançada com o módulo CASTEP e baseando-se na teoria funcional da densidade (DFT). Pretendemos contribuir para a compreensão dessas nanopartículas, com implicações em tecnologias inovadoras e no avanço da

<sup>1</sup> Graduado em física pela Universidade Estadual do Maranhão - UEMA.

<sup>2</sup> Graduanda em física pela Universidade Estadual do Maranhão - UEMA.

<sup>3</sup> Graduando em física pela Universidade Estadual do Maranhão - UEMA.

<sup>4</sup> Graduado em física pela Universidade Federal do Maranhão - UFMA; Mestre(a) em física pela Universidade Federal do Ceará - UFC; Doutor(a) em física pela Universidade do Porto, U.PORTO, Portugal.

<sup>5</sup> Graduado em física pela Universidade Federal do Maranhão - UFMA; Mestre(a) em física pela Universidade Federal do Ceará - UFC; Doutor(a) em física pela Universidade do Porto, U.PORTO, Portugal.

ciência dos materiais. Espera-se que este estudo enriqueça o conhecimento existente e promova inovações em diversos campos científicos.

**Palavras-chave:** DFT. Nanociência. Ouro.

### **Abstract**

*The transition from classical mechanics to quantum theory marked a turning point in the history of physics, driving notable advancements and paving the way for nanoscience and nanotechnology. With these materials, we can find unique properties depending on the size of the nanomaterials. This study aims to explore the optical and structural properties of gold nitrate nanoparticles using advanced computational modeling with the CASTEP module and based on density functional theory (DFT). We aim to contribute to the understanding of these nanoparticles, with implications for innovative technologies and the advancement of materials science. It is expected that this study will enrich existing knowledge and foster innovations in various scientific fields.*

**Keywords:** DFT. Nanoscience. Gold.

## **1. Introdução**

A nanociência é um campo multidisciplinar entre física, química, biologia e engenharia que está revolucionando nossa compreensão e capacidade de manipular a matéria em escala nanométrica. A palavra "nano" é derivada do grego "nanos" que significa "anão" e refere-se à escala em que ocorrem os fenômenos neste campo, sendo as dimensões típicas a nanoescala ( $10^{-9}$  m) (ENGELMANN, 2022). Em escalas tão minúsculas, as propriedades da matéria muitas vezes se desviam significativamente daquelas observadas em escalas macroscópicas, abrindo caminho para muitos novos fenômenos e aplicações.

Dessa forma, a nanociência compreende o estudo de nanomateriais, que são as estruturas que possuem ao menos uma de suas dimensões na escala nanométrica (1-100 nm) (SANFELICE *et al.*, 2022). Desde o seu surgimento nas últimas décadas, a nanociência impulsionou uma explosão de investigação e desenvolvimento em campos tão diversos como materiais, eletrônica, medicina, energia e ambiente.

A capacidade de manipular e controlar materiais em nível atômico e molecular permite a criação de estruturas e dispositivos com propriedades customizadas. Principalmente porque materiais nanoestruturados apresentam propriedades ópticas, magnéticas, mecânicas e elétricas únicas, abrindo portas para uma variedade de aplicações que vão desde dispositivos eletrônicos ultra eficientes até usos aplicados na nanomedicina (BOTELHO; FERREIRA; FERREIRA, 2024).

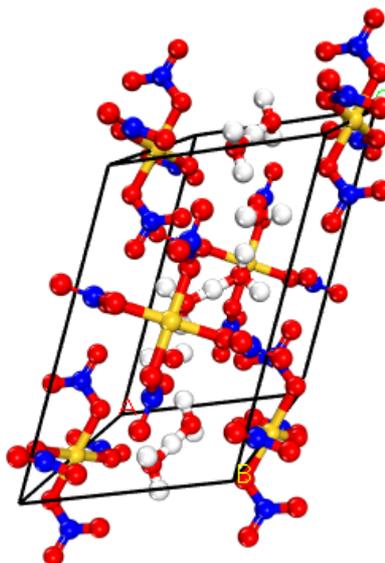
Dentre as diversas nanopartículas, as de nitrato de ouro se destacam como uma área de intensa pesquisa e aplicação pois é um material em ascensão. O ouro (Au) é um metal nobre, de número atômico 79, massa atômica 179 u.a, historicamente valorizado por sua estabilidade química e propriedades ópticas únicas, quando reduzido à escala nanométrica, exhibe fenômenos ainda mais intrigantes. A maior vantagem de nanomateriais metálicos em relação aos de outros componentes encontra-se em suas propriedades ópticas diferenciadas, principalmente quando se fala sobre a interação com a radiação eletromagnética (CORREA, 2023).

Como nanopartículas, o ouro é preferível por suas propriedades físico-químicas que envolvem a facilidade de síntese e modificação da superfície, sua biocompatibilidade e não toxicidade permitindo suas diversas utilidades, principalmente porque o comportamento óptico de nanopartículas metálicas tem

fascinado a humanidade há vários séculos através de obras de arte, mesmo antes que a palavra nanotecnologia fosse utilizada, um dos exemplos mais conhecidos é a Taça de Lycurgus (século 4 d.C), que usa nanopartículas de ouro e prata para modificar a cor de acordo com incidência de luz (SANTOS, 2016).

Desse modo, as propriedades das nanopartículas de nitrato de ouro podem ser ajustadas para atender a requisitos específicos de cada aplicação, impulsionando ainda mais sua utilidade e relevância em diversas áreas da ciência e da tecnologia. Já que a mesma é um composto químico que contém ouro em sua estrutura molecular, um sal inorgânico composto por íons de ouro ( $\text{Au}^{+3}$ ) e íons nitrato ( $\text{NO}_3^-$ ). O nitrato de ouro pode ser encontrado na forma sólida, geralmente como um pó ou cristais. O nitrato de ouro ou também conhecido como “gold nitrate” tem sua formula molecular dado em  $\text{AuH}_7\text{N}_4\text{O}_{15}$ , com um peso molecular médio de 500,04, tem diversas propriedades que o tornam interessante e útil em várias aplicações (National Center for Biotechnology Information, 2024). Dessa forma, é visto na Figura 1 o nanocristal de nitrato de ouro com a zona de brilouim e seus vetores de alta simetria.

**Figura 1-** Nanocristal de nitrato de ouro ( $\text{AuH}_7\text{N}_4\text{O}_{15}$ ).



Fonte: Próprios autores, 2024.

Devido à complexidade e à dificuldade de manipulação dessas estruturas em escala nanométrica, o estudo teórico se mostra essencial, fornecendo informações valiosas sobre seu comportamento em nível atômico e molecular. Nesse contexto, a Teoria do Funcional da Densidade (DFT, do inglês Density Functional Theory) emerge como uma ferramenta poderosa e confiável. A DFT é capaz de calcular propriedades eletrônicas, estruturais e ópticas com precisão satisfatória (RODRIGUES, 2019) proporcionando uma compreensão detalhada dos fenômenos que regem o comportamento das nanopartículas de nitrato de ouro. Além disso, a abordagem teórica oferece a vantagem de explorar uma ampla gama de condições e cenários, muitas vezes inacessíveis experimentalmente, sendo explicado a seguir os parâmetros utilizados.

## 2. Metodologia

Realizou-se uma revisão da literatura para identificar estudos anteriores relevantes sobre o material em questão, incluindo suas estruturas moleculares. Esta revisão ajudou a orientar as escolhas dos parâmetros de simulação e a interpretar os resultados dos cálculos.

Os cálculos eletrônicos foram realizados utilizando o software CASTEP (CLARK *et al.*, 2005). Durante a execução, foi monitorado o progresso dos cálculos para garantir sua conclusão bem-sucedida e verificar a convergência dos resultados.

Os arquivos de entrada necessários para os cálculos de DFT foram preparados com base na estrutura cristalina do material de interesse. Parâmetros essenciais, como as configurações de k-points (3x3x3) e a energia de corte (750 eV), foram definidos para garantir a precisão dos cálculos.

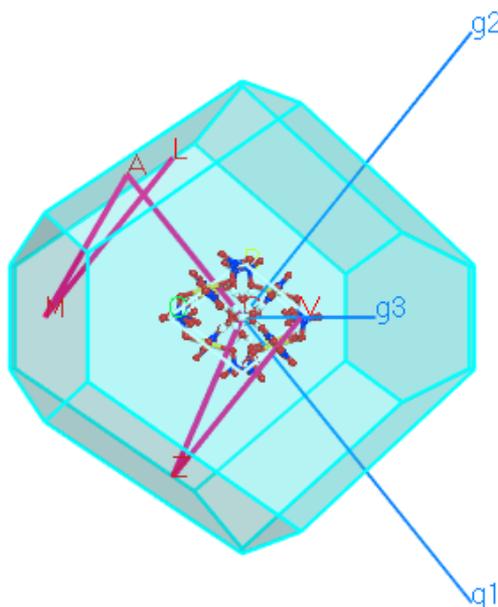
Os dados obtidos dos cálculos de CASTEP foram importados para o software ORIGIN Gráficos para organização e visualização. Gráficos e tabelas foram criados para representar os resultados de forma clara e compreensível, facilitando a interpretação dos dados.

Sendo assim, o estudo do cristal de nitrato de ouro através da simulação computacional permite um estudo as propriedades estruturais e ópticas da nanopartícula usando a teoria funcional da densidade (DFT).

## 3. Resultados e Discussão

Nossos resultados encontrados dizem respeito as propriedades estruturais, e óptica do nanocristal de nitrato de ouro. Após as otimizações foi possível apresentar as propriedades disponíveis do material.

**Figura 2-** Nanocristal de nitrato de ouro ( $\text{AuH}_7\text{N}_4\text{O}_{15}$ ).



Fonte: Próprios autores, 2024.

Neste tópico, é visto as propriedades do cristal de nitrato de ouro, revelando a complexa interação entre a estrutura atômica e as características desse material. A estrutura cristalina do nitrato de ouro é composta por 46 átomos em sua célula primitiva, como pode ser verificado na Figura 1, além de ter uma estrutura primária

com simetria monoclinica, grupo pontual 2/m e espacial C2/c, respectivamente, também é importante ressaltar que a densidade do nitrato de ouro encontrada é de 2.734 g/cm<sup>3</sup>.

Ademais, é possível determinar as coordenadas atômicas internas (u, v, w) que são utilizadas para descrever a posição dos átomos dentro de uma célula unitária ou célula primitiva de um cristal. No contexto do nitrato de ouro, essas coordenadas são usadas para especificar a posição dos átomos de nitrogênio, oxigênio e ouro dentro da estrutura cristalina, no qual é determinado na Tabela 1.

**Tabela 1-** Coordenadas atômicas internas (u, v e w) para a célula primitiva de nitrato de ouro.

Elemento	N° do Átomo	Coordenadas fracionárias de átomos		
		u	v	w
H	1	-0.137	1.046	0.108
H	2	-0.247	0.979	0.964
H	3	-0.172	1.308	0.263
H	4	-1.046	0.137	0.391
H	5	-0.979	0.247	-0.464
H	6	-1.308	0.172	0.236
H	7	0.137	-1.046	-0.108
H	8	0.247	-0.979	-0.964
H	9	0.172	-1.308	-0.263
H	10	1.046	-0.137	0.608
H	11	0.979	-0.247	1.464
H	12	1.308	-0.172	0.763
H	13	0.000	0.000	0.000
H	14	0.000	0.000	0.500
N	1	0.525	0.586	0.403
N	2	-0.588	1.024	0.258
N	3	-0.586	-0.525	0.096
N	4	-1.024	0.588	0.241
N	5	-0.525	-0.586	-0.403
N	6	0.588	-1.024	-0.258
N	7	0.586	0.525	0.903
N	8	1.024	-0.588	0.758
O	1	-0.544	1.443	0.345
O	2	-0.302	1.589	0.456
O	3	-0.609	0.757	0.406
O	4	-0.542	1.027	0.172
O	5	0.248	1.044	0.261
O	6	0.567	0.996	0.354
O	7	0.878	0.968	0.026
O	8	-1.443	0.544	0.154
O	9	-1.589	0.302	0.043
O	10	-0.757	0.609	0.093
O	11	-1.027	0.542	0.327
O	12	-1.044	-0.248	0.238

O	13	-0.996	-0.567	0.145
O	14	-0.968	-0.878	0.473
O	15	0.544	-1.443	-0.345
O	16	0.302	-1.589	-0.456
O	17	0.609	-0.757	-0.406
O	18	0.542	-1.027	-0.172
O	19	-0.248	-1.044	-0.261
O	20	-0.567	-0.996	-0.354
O	21	-0.878	-0.998	-0.026
O	22	1.443	-0.544	0.845
O	23	1.589	-0.302	0.956
O	24	0.757	-0.609	0.906
O	25	1.027	-0.542	0.672
O	26	1.044	0.248	0.761
O	27	0.996	0.567	0.854
O	28	0.968	0.878	0.526
O	29	-0.173	1.173	0.250
O	30	0.173	-1.173	-0.250
Au	1	0.500	1.000	0.500
Au	2	-1.000	-0.500	-0.000

Fonte: Próprios autores, 2024.

A estrutura do nitrato de ouro é composta por átomos de ouro, nitrogênio e oxigênio organizados em uma grade cristalina. As coordenadas ( $u$ ,  $v$ ,  $w$ ) descrevem a posição dos átomos dentro dessa grade em relação aos vetores de base da célula unitária com suas distâncias respectivamente.

Para cada átomo na célula unitária, você precisa de três coordenadas ( $u$ ,  $v$ ,  $w$ ) para especificar sua posição tridimensional. Estas coordenadas representam frações dos vetores de base da célula unitária.

A compreensão das coordenadas atômicas internas é crucial para estabelecer relações estrutura-propriedade em materiais cristalinos. Por exemplo, mudanças na estrutura cristalina devido a variações nas coordenadas atômicas podem levar a alterações nas propriedades ópticas de materiais como a refletividade.

### Refletividade óptica

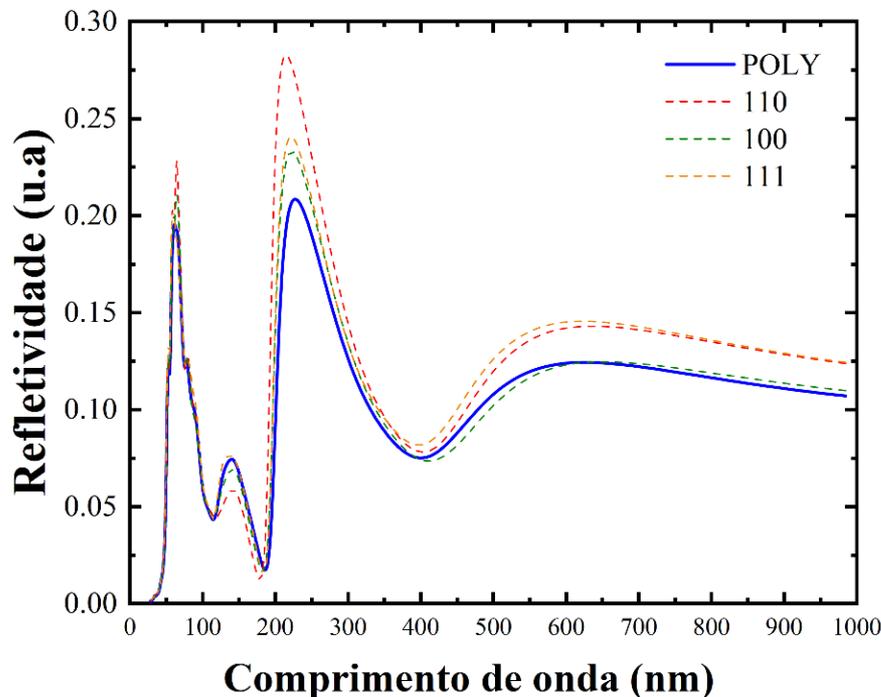
A compreensão da refletividade em materiais sólidos cristalinos está intrinsecamente ligada ao índice de refração complexo. Este último é um parâmetro crucial que influencia diretamente a capacidade de um material refletir a luz incidente. A refletividade  $R$  pode ser expressa através do índice de refração complexo, proporcionando uma visão abrangente das propriedades ópticas do material. A relação matemática que descreve essa interconexão é dada pela Equação 1:

$$R = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2} \quad (1)$$

onde  $n$  representa a parte real do índice de refração, e  $k$  é a parte imaginária. Este cálculo fornece uma medida da eficiência com que o material reflete a luz, levando em consideração tanto a contribuição refrativa  $n$  quanto a absorção  $k$ .

Dessa forma, exploraremos em detalhes a refletividade do cristal de nitrato de ouro vistos na Figura 3.

**Figura 3-** Refletividade óptica nas várias direções cristalinas em função do comprimento de onda para o cristal de nitrato de ouro na aproximação GGA-PBE.



Fonte: Próprios autores, 2024.

É observado na figura usando a aproximação GGA ao longo de diferentes planos cristalinos ([100], [110] e [111]) e para uma amostra policristalina (POLY), os comportamentos de reflexão, observando que os mesmos planos tem valores próximos a análise será feita para a amostra policristalina, sendo o pico mais alto do gráfico em torno de 200 nm a 300 nm com refletividade média de 0.23 u.a no qual são para o ultravioleta, o picos médio se encontram na região do visível 400 nm a 700 nm com uma taxa de absorção média de 0.12 u.a, mas, depois vão diminuindo, no qual também reflete próximo no comprimento infravermelho (>700 nm).

### Função dielétrica

A função dielétrica, muitas vezes denotada como  $\epsilon$  (epsilon), é uma grandeza que descreve a resposta de um material à presença de um campo elétrico externo, sendo fundamental para entender o comportamento elétrico e óptico dos materiais.

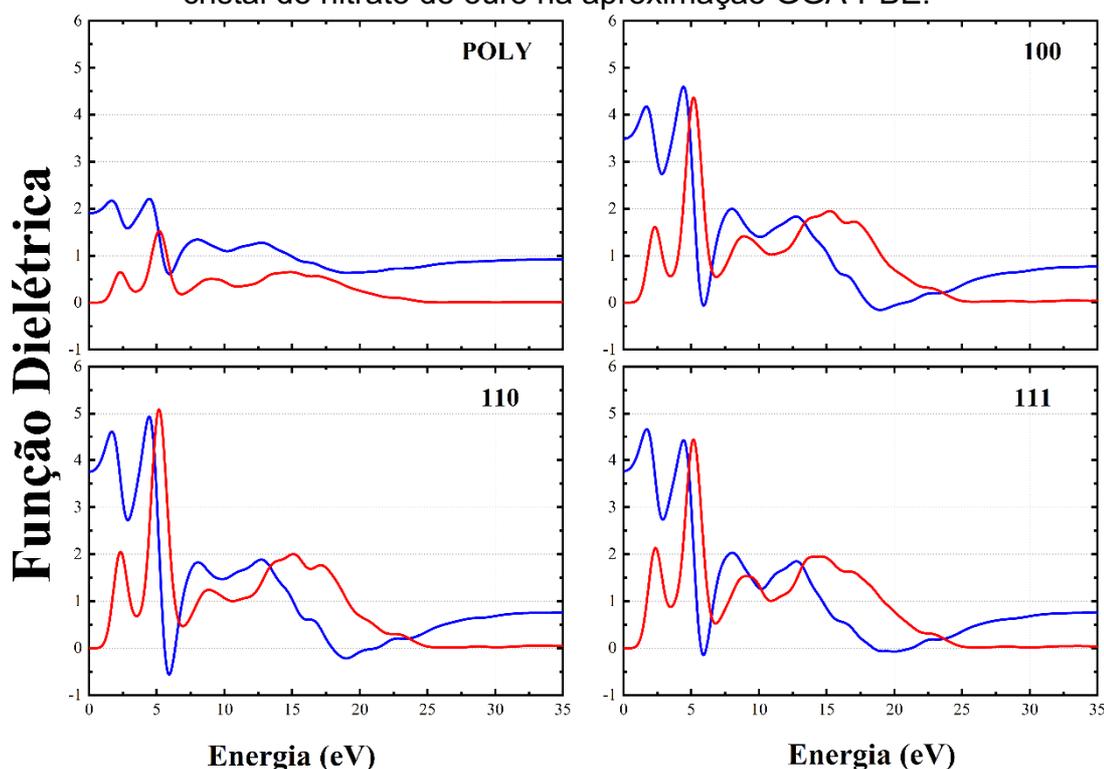
É determinado a seguir as partes real e imaginária da função dielétrica do nitrato de ouro ( $AuH_7N_4O_{15}$ ) calculados pela aproximação GGA-PBE considerando uma energia de corte de 750 eV. A análise da função dielétrica dos cristais foi realizada nas mesmas direções da luz incidente utilizada na análise de reflexão, conforme mostrado na Figura 4. No qual para determinar a função dielétrica é necessária realizar os cálculos que é expressa pela Equação 2:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad (2)$$

onde  $\epsilon_1$  é a parte real e  $\epsilon_2$  é a parte imaginária. A parte imaginária,  $\epsilon_2$ , está diretamente relacionada à absorção da amostra.

A função dielétrica  $\epsilon$  é uma função da frequência ( $\omega$ ) e do vetor de onda ( $k$ ) do campo elétrico. Ela relaciona a permissividade elétrica do material com esses parâmetros, onde a permissividade elétrica é uma medida da capacidade do material de polarizar em resposta a um campo elétrico externo.

**Figura 4-** Função dielétrica calculada via DFT para as várias direções cristalinas do cristal de nitrato de ouro na aproximação GGA-PBE.



Fonte: Próprios autores, 2024.

Dessa forma é observado que a parte real nas direções ([100], [110] e [111]) tem início aproximadamente em  $\epsilon_0 = 3,75 \text{ eV}$  indo de 0 a 25 eV. Para a direção [111] o máximo ocorre aproximadamente em 2,3 eV, já para as outras direções ocorrem em 4,8 eV. Por sua vez o mínimo ocorre em 5,2 eV nas direções ([100], [110] e [111]) alcançando um valor negativo de aproximadamente -0,3 eV. Analisando agora a direção policristalina (POLY) tem início aproximadamente em  $\epsilon_0 = 2,0 \text{ eV}$  sendo seu máximo em 4,8 eV e mínimo em 5,2 eV alcançando um valor positivo de 0,5 eV, apresentando assim comportamentos similares.

#### 4. Considerações Finais

Devemos considerar que a nanociência tem alavancado a tecnologia desde seu primeiro conceito com o físico Richard Feynman. Assim tivemos um avanço significativo dos estudos de nanomateriais desde então, todavia, por se tratar de estruturas menores que um fio de cabelo, o uso do formalismo quântico para o seu desenvolvimento é algo extremamente crucial.

Nesse sentido fomos capazes de reunir uma gama de informações a respeito da nanopartícula de nitrato de ouro e em seguida realizar simulações visando encontrar as propriedades estruturais e ópticas do material.

Dessa forma, foi apresentado um estudo através da teoria do funcional da densidade com o uso do funcional GGA-PBE com k-points 3x3x3 e energia de corte de 750 eV sendo determinado suas informações estruturas as coordenadas atômicas.

Ademais, para a análise da refletividade é visto uma reflexão na região do ultravioleta (200nm a 300nm) com refletividade média de 0.23 u.a, além da infravermelho (700nm) com reflectância média de 0.12 u.a.

No geral, o estudo feito torna-se importante devido as várias disponibilidades para serem empregadas de aplicações, já que o material vem sendo ascendente nas pesquisas atualmente.

## AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o fomento realizado pela Universidade Estadual do Maranhão (UEMA), via Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação – PPG/UEMA – Bolsa de Produtividade (N. 156279/2023), Pró-Reitoria de Extensão e Assuntos Estudantis – PROEXAE/UEMA – Mais Extensão, ao RENOEN e ao PROFEI. Ademais, agradecemos a Fundação de Amparo à Pesquisa e Desenvolvimento Científico o Programa Pesquisa Produtividade ciclo 2024-2025 do Centro Universitário Estácio de São Luís.

## Referências

BOTELHO, I.; FERREIRA, S.; FERREIRA, W. A new era for gold nitrate nanoparticle applications. **Biotechnology Journal International**, v. 28, n. 1, p. 1–8, 2024.

CLARK, S. J.; SEGALL, M. D.; PICKARD, C. J.; HASNIP, P. J.; PROBERT, M. I.; REFSON, K.; PAYNE, M. C. First principles methods using castep. **Zeitschrift für kristallographie crystalline materials**, De Gruyter Oldenbourg, v. 220, n. 5-6, p. 567–570, 2005

CORREA, J. d. S. **Síntese e caracterização de nanopartículas de ouro e seu uso como detectores de cátions**. Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2023.

ENGELMANN, Wilson. **Direitos Humanos e Novas Tecnologias**. São Paulo: Paco Editorial, 2016.

RODRIGUES, Edna da Silva Machado. **Estudo da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) nas propriedades estruturais e ópticas de nanoclusters de ouro**. 2019. Pós-Graduação em Química.

SANTOS, Jacqueline Ferreira Leite *et al.* **Ressonância de plasmon de superfície localizado e aplicação em biossensores e células solares**. *Química nova*, v. 39, p. 1098-1111, 2016.

SANFELICE, R. C.; PAVINATTO, A.; CORRÊA, D. S.; CORREA, D. S. *et al.* **Introdução à nanotecnologia**. In: São Paulo: Blucher, 2022.

National Center for Biotechnology Information. **PubChem Compound Summary for CID 102601521, Gold nitrate**. 2023. Disponível em: <<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Gold-nitrate>>. Acessado: 10 janeiro, 2024.