

IDEIAS QUE MUDAM O MUNDO

CIÊNCIA
DOS MATERIAIS

OS

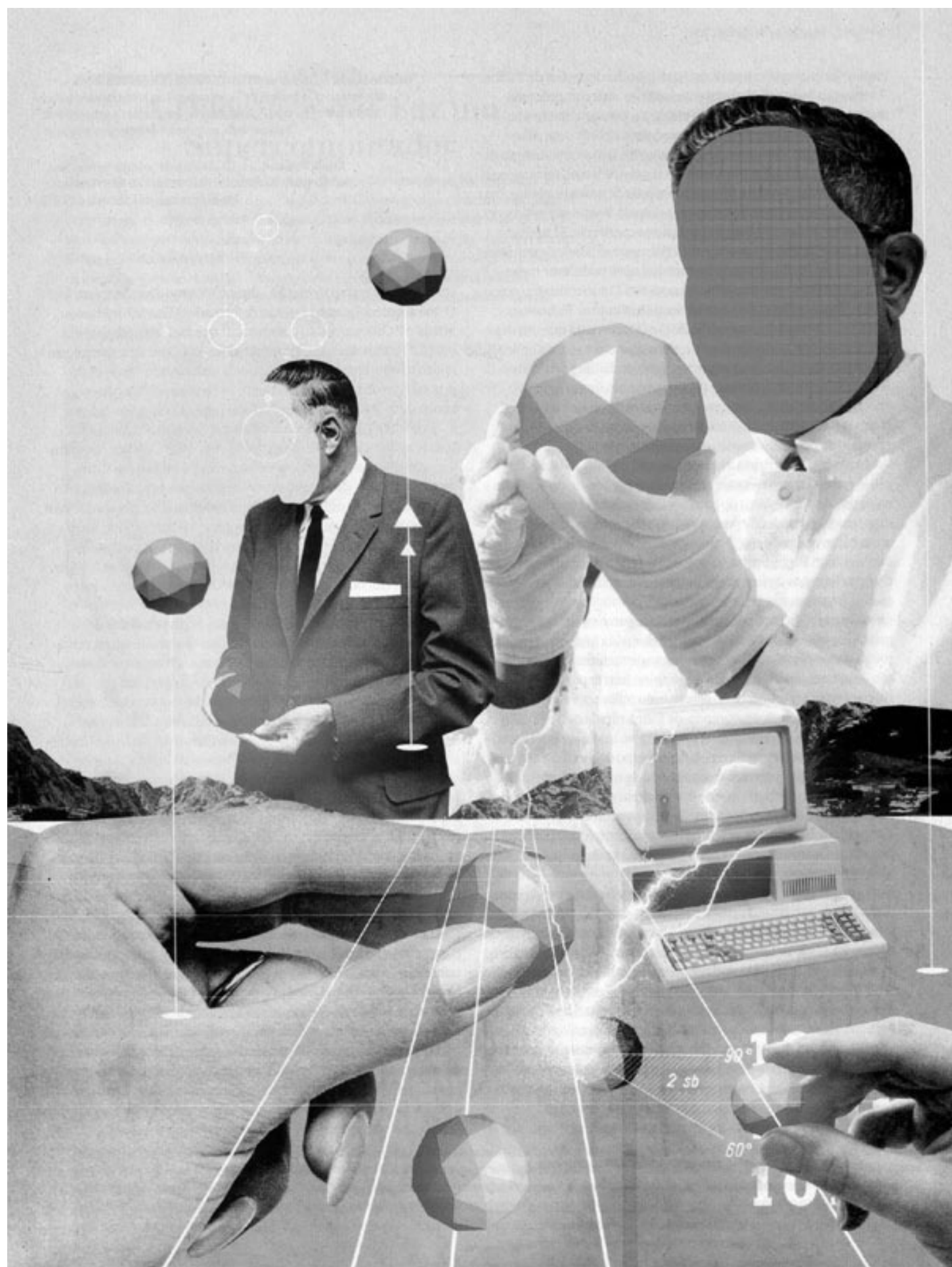
MATERIAIS DOS SONHOS

Com supercomputadores
e equações da mecânica
quântica cientistas estão
desenvolvendo novos
materiais, átomo por
átomo, antes mesmo de
um experimento

*Por Gerbrand Ceder
e Kristin Persson*

Em 1878 Thomas Edison se propôs a reinventar a iluminação elétrica. Para desenvolver lâmpadas pequenas, adequadas para uso interno, ele tinha de encontrar um elemento de iluminação de longa vida, baixo consumo de energia e pouco aquecimento. Guiado em grande parte pela intuição ele começou a testar milhares de materiais de carbono — buxos, um gênero botânico da família *Buxaceae*, casca de coco e pelos de barba de seu assistente. Após 14 meses ele patenteou uma lâmpada que utilizava um filamento de algodão carbonizado. A imprensa anunciou o objeto como “o triunfo do grande inventor em iluminação elétrica”. Mas havia materiais melhores para filamentos. Na virada do século, outro inventor americano aperfeiçoou o filamento de tungstênio usado em lâmpadas incandescentes. O fio de algodão de Edison virou história.

A ciência de materiais, área que estuda processos de transformação de matéria em formas



novas e úteis, percorreu um longo caminho desde os dias de Edison. A mecânica quântica ofereceu aos cientistas uma compreensão profunda do comportamento da matéria e, conseqüentemente, ampliou a capacidade de planejar pesquisas a partir de análises teóricas no lugar de suposições. Ainda assim, o desenvolvimento de materiais continua um processo extremamente longo, meticuloso e caro. Empresas investem bilhões na criação de novos materiais, mas os resultados positivos são poucos e pontuais. Pesquisadores concebem novas ideias com base na intuição e experiência. Sintetizar e testar essas hipóteses envolve uma enorme quantidade de tentativas e erros. A avaliação de um único material novo pode levar meses e, na maioria das vezes, o resultado é negativo. Como constatou nosso colega Thomas Eagar, do Massachusetts Institute of Technology (MIT), são necessários em média de 15 a 20 anos para que um material bem-sucedido tramite dos testes em laboratório para a aplicação comercial. Quando a Sony anunciou a comercialização da bateria de íons de lítio, em 1991, por exemplo, pareceu um avanço súbito e enorme; na realidade, centenas ou milhares de pesquisadores de baterias passaram quase duas décadas tropeçando e paralisando o processo de desenvolvimento para chegar a esse ponto.

Ainda assim, a ciência de materiais está próxima de uma revolução. Agora podemos nos valer de um século de progresso em física e computação para ir além do processo edisoniano. O crescimento exponencial do poder de processamento dos computadores, aliado ao trabalho realizado nas décadas de 60 e 70 por Walter Kohn e pelo falecido John Pople, tornaram possível o design de novos materiais. Os dois cientistas desenvolveram soluções simplificadas, mas exatas, para as equações da mecânica quântica e possibilitaram a síntese de novos materiais a partir do zero, usando supercomputadores e os princípios básicos da física. A técnica é chamada *high-throughput computational materials design* (projeto de materiais por computação de alto rendimento) e a ideia é simples: usar supercomputadores para estudar virtualmente centenas ou milhares de compostos químicos de cada vez, procurando, de forma rápida e eficiente, os melhores blocos de construção para um novo material: um eletrodo de bateria, uma liga metálica ou um novo tipo de semicondutor.

A maioria dos materiais é constituída de muitos compostos químicos [e recebem o nome de compósitos quando suas propriedades diferem das propriedades dos componentes individuais]. Eletrodos de baterias, compósitos bastante complexos, são bons exemplos. Outros são muito mais simples. O grafeno, que tem sido alardeado como o futuro da eletrônica, consiste em uma folha de carbono da espessura de um átomo. Independentemente da complexidade de um material, uma característica persiste: suas propriedades — densidade, resistência (dureza), brilho, condutividade eletrônica — são determinadas pelas características quânticas dos átomos de que é feito. Portanto, o primeiro passo no design de alto rendimento de materiais é virtualmente “criar” novos materiais ao efetuar milhares de cálculos de mecânica quântica. Um supercomputador organiza átomos virtuais em centenas ou milhares de estruturas de cristais virtuais. Em seguida, calculamos as propriedades desses compostos virtuais. Qual o aspecto das estruturas de

Gerbrand Ceder é professor de ciência dos materiais e engenharia no Massachusetts Institute of Technology (MIT). Em parceria com Kristin Persson ele é um cofundador do Projeto de Materiais que põe à disposição da comunidade de pesquisa dados proprietários de materiais computados.

Kristin Persson é cientista da equipe do Lawrence Berkeley National Laboratory. Ela obteve seu Ph.D. em física teórica no Real Instituto de Tecnologia em Estocolmo, na Suécia

cristais? Qual o grau de rigidez (dureza)? Como elas absorvem luz? O que acontece quando elas são deformadas? Elas são metais ou isolantes? Ordenamos ao computador que faça uma triagem em busca de compostos com propriedades específicas desejáveis e, em pouco tempo, compostos promissores se destacam. No final do processo, os dados gerados durante a pesquisa voltam para um banco de dados que os pesquisadores podem acessar no futuro.

Desde 2011 lideramos uma colaboração entre pesquisadores para acelerar a revolução de materiais impulsionada por computador, que chamamos o Projeto de Materiais. A meta é construir bancos de dados gratuitos de livre acesso (*open-access databases*, em inglês) com as propriedades fundamentais da termodinâmica e eletrônica de todos os compostos inorgânicos conhecidos. Até o momento calculamos as propriedades básicas (a disposição da estrutura cristalina, se é condutor ou isolante, como ele se comporta com a incidência de luz, e assim por diante) de quase todos os aproximadamente 35 mil materiais inorgânicos que sabemos existir na Natureza. Também calculamos as propriedades de alguns outros milhares que só existem em teoria. Até agora, cerca de 5 mil cientistas se registraram para acessar o banco de dados que contém essas informações e eles as têm usado para projetar novos materiais para células solares, baterias e outras tecnologias.

Não somos os únicos a seguir essa abordagem. Um consórcio de pesquisadores liderados por Stefano Curtarolo, da Duke University, calculou dezenas de milhares de sistemas de ligas. Suas pesquisas podem resultar em carrocerias de carros mais leves e resistentes, vigas estruturais para arranha-céus e revestimentos de aviões, entre outros. O Quantum Materials Informatics Project (QMIP), que reúne pesquisadores do Laboratório Nacional Argonne, da Stanford University e da Universidade Técnica da Dinamarca, tem utilizado a computação de alto rendimento para estudar processos catalíticos em superfícies metálicas, o que é particularmente útil na pesquisa energética.

Em um futuro muito próximo, cientistas de materiais usarão a computação de alto rendimento para projetar quase tudo. Acreditamos que isso levará a tecnologias que remodelarão o mundo — avanços que vão transformar a computação, eliminar a poluição, gerar abundância de energia limpa e melhorar nossas vidas de maneira praticamente inconcebível neste momento.

O mundo moderno está construído sobre o sucesso da ciência dos materiais. O advento do vidro transparente e condutivo levou

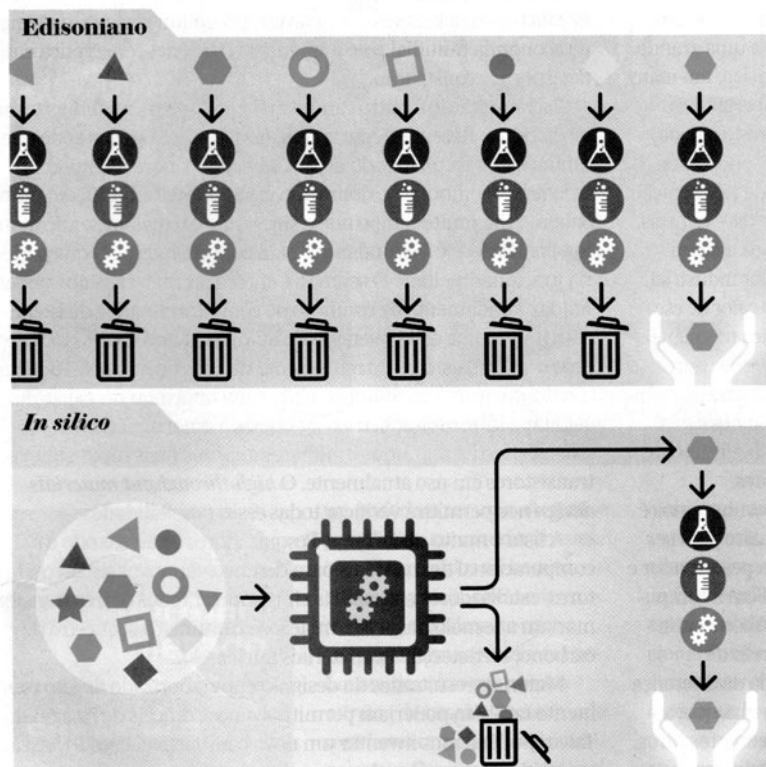
EM SÍNTESE

Materiais criados por engenharia, como diminutos chips de silício e vidros de fibra óptica, sustentam o mundo moderno. Mas o desenvolvimento de novos materiais envolve historicamente uma quantidade frustrante e ineficiente de suposições.

Versões simplificadas de equações da mecânica quântica, juntamente com supercomputadores que usando essas equações virtualmente testam milhares de materiais de cada vez, estão eliminando grande parte dessas hipóteses.

Pesquisadores estão usando esse método, chamado *high-throughput computational materials design*, para desenvolver novas baterias, células solares, células de combustível, chips de computadores e outras tecnologias.

Falando de modo geral, o método edisoniano de *design* de materiais consiste em testar tudo o que se pode imaginar e descartar o que não funciona. Com o *high-throughput materials design* (o design de alto rendimento de materiais), pesquisadores podem triar rapidamente candidatos *in silico* — virtualmente em gigantescos bancos de dados de supercomputação — economizando tempo e dinheiro e evitando frustrações. Depois de o computador testar centenas ou milhares de materiais, e produzir uma lista dos cerca de dez candidatos principais, pesquisadores começam a sintetizar amostras físicas e testá-las com métodos laboratoriais convencionais.



Foi nosso trabalho com baterias que nos levou ao design de materiais *high-throughput* em primeiro lugar. Havíamos passado nossas carreiras fazendo design computacional de materiais, mas até uma conversa com executivos da Procter & Gamble (P&G), em 2005, não tínhamos pensado sobre os possíveis resultados de um trabalho sério de computação nos supercomputadores mais poderosos do mundo. Os executivos da P&G queriam encontrar um material catódico melhor para as pilhas alcalinas produzidas por sua divisão Duracell. Eles nos fizeram uma pergunta surpreendente: seria possível fazer uma triagem computadorizada de todos os

Não demorou e tiramos a palavra "genoma" do nome do projeto para distingui-lo de uma iniciativa que o Escritório de Política Científica e Tecnológica da Casa Branca estava lançando. Além disso, por uma questão de justiça, as propriedades de compostos químicos não são "genes", eles não são bits de informações hereditárias

Esses tipos de correlações são a base da ciência dos materiais. Um exemplo simples disso: sabemos que é possível “calibrar”, ou harmonizar, a cor de minerais ao introduzirmos defeitos direcionados em sua estrutura de cristais. Considere o rubi. Sua tonalidade de vermelha resulta de uma substituição accidental de 1% do alumínio no corindão [corindo ou corundum, mineral à base de óxido de alumínio] do mineral comum (Al_2O_3) por íon de cromo (Cr^{3+}). Quando o Cr^{3+} é forçado a entrar nesse ambiente seus estados eletrônicos ficam alterados, o que muda a forma como o material absorve e emite luz. Uma vez identificada a origem — o descritor fundamental — de uma propriedade (nesse caso, o tom vermelho do rubi) podemos atingi-la com métodos sintéticos. Ao ajustarmos

esses defeitos químicos podemos criar novos rubis sintéticos com cores perfeitamente harmonizadas.

As equações da mecânica quântica podem nos dizer como fazer esse “ajuste” —, que elementos usar e como organizá-los. Mas as equações são tão complexas que só podem ser resolvidas por computador. Digamos que você queira fazer a triagem de um grupo de centenas de compostos para saber quais têm as propriedades desejadas. Resolver essas equações envolve uma quantidade incrível de poder de computação. Até recentemente isso era impossível, razão pela qual uma parte tão grande da ciência dos materiais historicamente procedeu pelo método de tentativa e erro. Agora, com o poder de computação, podemos aproveitar o pleno potencial preditivo da mecânica quântica.

Suponha que estejamos pesquisando materiais termoeletrônicos, que geram uma corrente elétrica quando submetidos a uma grande variação de temperatura. (O inverso também é verdadeiro: um material termoeletrônico pode manter uma diferença de temperatura se você passar uma corrente através dele; pense em um resfriamento instantâneo.) A sociedade desperdiça uma quantidade enorme de calor pela combustão, do processamento industrial e da refrigeração. Se tivéssemos materiais termoeletrônicos eficientes, baratos e estáveis, poderíamos captar esse calor e reutilizá-lo como energia elétrica. Dispositivos termoeletrônicos poderiam transformar calor industrial descartado em eletricidade para alimentar fábricas. O calor de escapamentos de automóveis poderia alimentar a eletrônica nos painéis dos veículos. A termoeletricidade também poderia fornecer refrigeradores em estado sólido capazes de proporcionar resfriamento sob demanda: pequenos dispositivos que integrariamos em nossas roupas que, com o simples acionar de um interruptor nos refrescassem, sem a necessidade de ventiladores ou compressores.

Um dos melhores compostos termoeletrônicos que conhecemos é o telureto de chumbo, que é excessivamente tóxico e caro para ser utilizado comercialmente. Suponha que você seja um pesquisador e está procurando um material termoeletrônico melhor. Sem a computação de alto rendimento o processo seria assim: você começaria procurando compostos conhecidos que, como o telureto de chumbo, têm um elevado coeficiente Seebeck (medida da diferença de potencial em função da variação de temperatura), mas que, ao contrário de telureto de chumbo, não são feitos de elementos raros, tóxicos ou caros. Você se debruçaria sobre tabelas e compararia números. Se tivesse sorte, encontraria alguns compostos químicos candidatos que, em teoria, poderiam funcionar. Então você produziria esses compostos em um laboratório. Sintetizar materiais fisicamente é um trabalho caro, demorado e difícil. Em geral, ao começar você nem ao menos tem ideia se o novo material será estável. Se for, você só poderá medir suas propriedades depois de ter sintetizado o composto e de repetir o processo até obter uma amostra bastante pura. Esse processo pode levar meses para cada composto.

Nossa capacidade de acessar, procurar, triar e comparar dados de materiais de forma automatizada está em sua infância. O que ela poderá produzir? Arriscamos alguns palpites.

Muitas tecnologias promissoras de energia limpa estão apenas aguardando que materiais avançados se tornem viáveis. Compostos fotocatalíticos, como o dióxido de titânio, podem ser usados para fazer com que a luz solar clive as moléculas de água em oxigênio e hidrogênio, que então podem ser transformados em combustíveis líquidos. Outros fotocatalisadores podem promover transformações do dióxido de carbono. O objetivo, aqui, é chegar a uma “folha vegetal artificial” capaz de transformar luz solar e ar em combustíveis líquidos artificiais parecidos com metanol que poderíamos queimar

em carros e aviões [ver “A Reinvenção da Folha Vegetal”, por Antônio Regalado, **Scientific American Brasil**, Ed. 102, novembro de 2010]. Pesquisadores do Centro Conjunto para Fotossíntese Artificial, uma unidade de pesquisa do Departamento de Energia dos Estados Unidos, estão empregando métodos *high-throughput* em busca de materiais que possam tornar essa tecnologia viável.

E quanto a encontrar novas ligas metálicas para usar nesses carros e aviões? Reduzir o peso de um veículo em 10% pode melhorar sua economia de combustível de 6% a 8%. A indústria americana já injeta bilhões de dólares todos os anos em pesquisa e desenvolvimento para a produção de metais e ligas metálicas. O design de materiais guiado por computador poderia multiplicar esse investimento. Avanços significativos no desenvolvimento de ligas de alta resistência, leves e recicláveis teriam um impacto enorme na economia mundial pelo aumento da eficiência energética em transporte e construção.

A computação é outro campo que necessita de materiais transformadores. Recentemente vimos muitas previsões sérias de que estamos nos aproximando do fim da Lei de Moore, segundo a qual o poder de computação dobra aproximadamente a cada dois anos. Sabemos há muito tempo que o silício não é o melhor semicondutor. Por acaso, ele é abundante e bem compreendido. O que poderia funcionar melhor? O segredo é encontrar materiais que podem mudar rapidamente de condição de condutores para a de isolantes. Uma equipe da University of California, Los Angeles (UCLA), produziu transistores extremamente rápidos de grafeno. Paralelamente, um grupo da Stanford University informou ser capaz de acionar o interruptor elétrico liga/desliga em magnetita em um trilionésimo de segundo — milhares de vezes mais rápido que os transistores em uso atualmente. O *high-throughput materials design* nos permitirá verificar todas essas possibilidades.

A lista é muito mais longa. Pesquisadores estão usando o *design* computacional de materiais para desenvolver novos supercondutores, catalisadores e materiais cintiladores. Todos os três transformariam a tecnologia da informação, a captura e o sequestro de carbono, e a detecção de materiais nucleares.

Materiais resultantes do design computadorizado de alto rendimento também poderiam permitir avanços difíceis de imaginar. Talvez pudéssemos inventar um novo combustível líquido baseado em silício, em vez de carbono, que forneceria mais energia que a gasolina e produziria subprodutos ambientalmente benéficos, como areia e água. As pessoas têm falado sobre a ideia há décadas, mas ninguém descobriu uma fórmula viável. O design de materiais de alto rendimento poderia, pelo menos nos dizer se isso é possível, ou se devemos concentrar nossos esforços em outro lugar.

É por isso tudo que acreditamos estar entrando em uma era dourada do design de materiais. O capacidade massiva de computação deu aos humanos o maior poder de transformar matéria bruta em tecnologias úteis que já tiveram até agora. Isso também é positivo. Para nos ajudar a lidar com os desafios de um planeta cada vez mais quente e populoso, essa era dourada não poderia ser mais bem-vinda que agora. ■

PARA CONHECER MAIS

The materials project: a materials genome approach to accelerating materials innovation. Gerbrand Ceder et al. em *APL Materials*, vol. 1, nº 1; julho de 2013.

Opportunities and challenges for first-principles materials design and applications to Li battery materials. Gerbrand Ceder em *MRS Bulletin*, vol. 35, nº 1; págs. 693-701, setembro de 2010.