

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
CAMPUS A. C. SIMÕES
INSTITUTO DE FÍSICA
CURSO DE LICENCIATURA EM FÍSICA

JOSÉ DIEGO MONTEIRO DE AQUINO

SIMONKOLLEITE E SUAS APLICAÇÕES: UMA REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Maceió-AL
2023

JOSÉ DIEGO MONTEIRO DE AQUINO

SIMONKOLLEITE E SUAS APLICAÇÕES: UMA REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado ao Curso de Licenciatura
em Física do Instituto de Física da
Universidade Federal de Alagoas, como
requisito parcial à obtenção do título de
Licenciado em Física.

Orientadora: Profa. Dra. Anielle Christine
Almeida Silva

Maceió-AL

2023

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico
Bibliotecária: Girlaine da Silva Santos – CRB-4 – 1127

A657s Aquino, José Diego Monteiro de.

Simonkolleite e suas aplicações: uma revisão bibliográfica / José Diego Monteiro de Aquino. – 2023.

22 f. : il. color.

Orientadora: Anielle Christine Almeida Silva.

Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso em Física: Licenciatura) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2023.

Bibliografia: f. 19-22.

1. Simonkolleite (Nanocristal). 2. Nanopartículas. 3. Semicondutores dopados. I. Título.

CDU: 661.847.2

RESUMO

O avanço da nanotecnologia tem se buscado novos materiais com propriedades que atendam às aplicações pretendidas ou que otimizem determinadas características do próprio ou de outros materiais. Dessa maneira, o simonkolleite é abordado na literatura científica como material promissor para aplicações médicas, sanitárias, ambientais, entre outras. Isso se deve à sua estrutura baseada em zinco, cujo óxido é frequentemente analisado na produção de estudos. Alguns artigos mencionam como um material que surge em trabalhos com ZnO. Neste trabalho, buscou-se por publicações que têm o simonkolleite como objeto de estudo e que se referem aos seus potenciais usos. Foram encontradas aplicações para: citotoxicidade em células cancerígenas; melhoria de cicatrização da pele de ratos; tecnologia com encapsulamento para medicamentos voltados para regeneração óssea e possivelmente pós-operatório de cirurgia ortopédica; otimização da produção de biogás; controle bacteriológico em culturas de plantações; e adsorção e degradação de agentes químicos em soluções aquosas. Cabe destacar ainda seu potencial para aplicações em decomposição térmica e em células fotovoltaicas, bem como na detecção de gás e na fabricação de supercondutores. Muitos desses estudos sugerem o potencial de aplicação e recomendam aprofundamento na perspectiva de melhor entendimento do mecanismo de ação e comportamento do simonkolleite que levaram aos seus resultados.

Palavras-chave: simonkolleite; nanopartículas; dopado.

ABSTRACT

The advancement of nanotechnology, new materials with properties that meet the desired applications or that optimize certain properties of the material itself or of other materials have been sought. In the scientific literature, simonkolleite is discussed as a promising material for medical, health, and environmental applications, among others. This is because of its zinc-based structure, the oxide of which is extensively researched. It is mentioned in some articles as a material that appears in work with ZnO. In this study, we looked for publications that discussed simokolleite and its potential applications. Applications include cytotoxicity in cancer cells, improved rat skin healing, encapsulation technology for medicines aimed at bone regeneration and possibly post-operative orthopaedic surgery, biogas production optimization, bacteriological control in crop cultures, adsorption and degradation of chemical agents in aqueous solutions, potential application for photovoltaic cell. Many of these studies indicate the potential for application and suggest additional research to better understand the mechanism of action and behavior of simonkolleite that led to their findings.

Keywords: simonkolleite; nanoparticles; doped.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Vistas da célula unitária do simonkolleite criada no <i>software</i> VESTA: (a) eixo “a”; (b) eixo “b”; (c) eixo “c”; (d) em perspectiva.....	7
Figura 2 – Distribuição de publicações sobre a aplicação do simonkolleite por países.....	10
Figura 3 – Fluxo geral da pesquisa sobre a aplicação do simonkolleite	11
Quadro 1 – Critérios de busca	9
Quadro 2 – Resumo de aplicações do simonkolleite	10
Quadro 3 – Exemplos de aplicações do simonkolleite em associação com outros materiais.....	11

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	7
2	METODOLOGIA.....	9
3	RESULTADOS E DISCUSSÃO	10
3.1	Associação com outros materiais e dopagem	11
3.2	Aplicações em ciências da saúde.....	12
3.3	Aplicações químicas e ambientais	13
3.4	Aplicações de engenharia	15
4	CONSIDERAÇÕES FINAIS	18
	REFERÊNCIAS	19

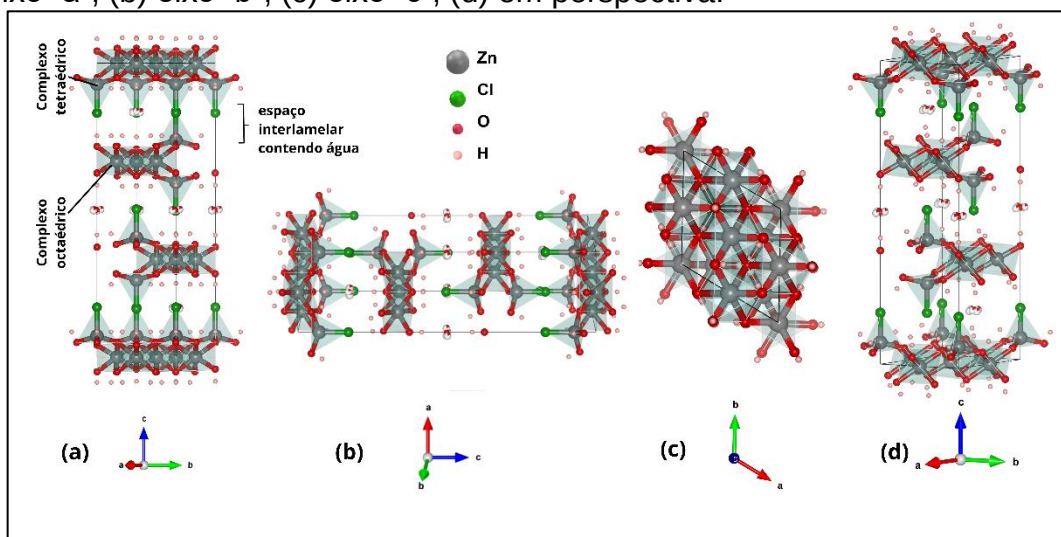
1 INTRODUÇÃO

Materiais em escala nanométrica baseados em zinco, como o óxido de zinco (ZnO), têm sido intensamente estudados em razão da gama de aplicações possíveis para suas conhecidas propriedades. Nesse contexto, sais de hidróxido de zinco (Zn(OH)_2) são precursores promissores para a preparação de óxido de zinco, e também possuem uma ampla variedade de aplicação. Nos últimos anos, tem crescido o interesse no simonkolleite (SK) (Rostas *et al.*, 2020).

O simonkolleite, cuja fórmula química é $\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$, pertencem a uma família de compostos conhecidos como HSL (hidroxissais lamelares), estes se assemelham a categoria HDL (Hidróxidos duplos lamelares) em termos de algumas características e propriedades semelhantes (Agra, 2021). Esse material pode ser encontrado como produto da decomposição de resíduos e de outros minérios contendo zinco e da corrosão de metais e de objetos metálicos contendo zinco. Do ponto de vista da estrutura, este mineral cristaliza-se num sistema hexagonal (Zagórska; Kowalska, 2021).

O cristal apresentado na Figura 1 é constituído por uma pilha de camadas planas ao longo do eixo “c”, sendo essas camadas compostas por complexos octaédricos de hidroxilas centrados no zinco (representado pelo cinza) e por tetraedros do complexo ZnO_3Cl (representado pelo cinza, vermelho e verde) (Qu *et al.*, 2023).

Figura 1 – Vistas da célula unitária do simonkolleite criada no *software* VESTA: (a) eixo “a”; (b) eixo “b”; (c) eixo “c”; (d) em perspectiva.



Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

A estrutura é completada com moléculas de água entre camadas e átomos de Cl preferencialmente direcionados para o mesmo espaço entre camadas (Qu *et al.*, 2023). Além disso, o simonkolleite é considerado um material semicondutor com intervalo de separação semelhante ao do ZnO (cerca de 3,3 eV) (Canto-Aguilar *et al.*, 2022).

Os sítios eletroquimicamente ativos encontrados nos simonkolleites são essenciais para um melhor armazenamento de cargas. Uma vez que o SK, tal como o ZnO, tem vacâncias de oxigênio na sua superfície, ele é química e eletricamente ativo. A condutividade do material pode então ser aumentada por essas vacâncias que atuam como doadores do tipo “n”. A superfície necessária para os contatos iônicos durante o funcionamento do supercapacitor é provavelmente fornecida pela abundância de uma rede interativa das microplaquetas hexagonais da sua estrutura (Momodu *et al.*, 2015).

Em razão da sua menor área de superfície, da sua baixa condutividade elétrica e da sua propensão para o empilhamento, a pseudocapacitância do SK puro para armazenamento de energia ainda é baixa quando comparada com a de outros óxidos e hidróxidos metálicos. Estudos anteriores tentaram resolver essas limitações utilizando materiais à base de carbono, como o grafeno, ou de surfactantes, para diminuir o empilhamento e aumentar a espessura da folha. Essas melhorias aumentariam a área de superfície e os sítios porosos ativos para o transporte e armazenamento de cargas (Momodu *et al.*, 2015).

2 METODOLOGIA

A revisão sistemática consiste numa metodologia de investigação que obedece normas específicas e que tem como objetivo compreender e dar alguma lógica a um grande acervo documental, particularmente confirmando o que pode ou não funcionar num determinado contexto. Nesse sentido, esse tipo de revisão foca na reprodutibilidade por outros pesquisadores, bem como apresenta claramente as fontes de dados bibliográficos consultadas, as estratégias de pesquisa aplicadas em cada base, o processo de escolha das publicações científicas, os critérios de inclusão e exclusão de cada artigo e o processo de análise de cada artigo (Galvão; Ricarte, 2019).

No presente estudo foram buscados trabalhos científicos em português ou inglês, publicados nos últimos 13 anos, que tenham em seus títulos e objeto de estudo as aplicações e propriedades físicas do simonkolleite, particularmente de suas nanoestruturas, na base de dados do Google Acadêmico, em razão da indexação de várias bases de dados científicas.

O procedimento para a busca foi utilizar as palavras-chave, procurando em títulos e resumos, excluídos artigos com idioma diferente do inglês, artigos anteriores a 2010 ou que foram duplicados na pesquisa, ou ainda artigos de revisão. O Quadro 1 demonstra o método utilizado.

Quadro 1 – Critérios de busca

Palavras de busca	“Simonkolleite” e “ $\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ”
Critérios de exclusão	- anos anteriores a 2010; - artigos de revisão; - idiomas diferentes do inglês e do português; - pesquisa em que o simonkolleite aparece como subproduto não desejável ou como impurezas.

Fonte: Elaborado pelo autor (2023).

O objetivo foi apontar as aplicações relevantes do material simonkolleite, a fim de observar as possibilidades de aplicações já conhecidas e de avaliar as propriedades significativas.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Foram selecionados 32 artigos, após a aplicação dos critérios de exclusão explicitados na metodologia.

Quanto à localização geográfica, os dados apontam que o país que mais publicou foi o Brasil, com 10 trabalhos, seguido pela China, com 7, e pela África do Sul, com 6. A Figura 2 ilustra o mapa de distribuição dos países que publicaram, e o Quadro 2 apresenta um resumo dos trabalhos encontrados.

Figura 2 – Distribuição de publicações sobre a aplicação do simonkolleite por países



Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

Quadro 2 – Resumo de aplicações do simonkolleite

Material	Aplicações	Referências
Simonkolleite	Revestimento de superfícies	(Mahmoudian <i>et al.</i> , 2011)
	Fotocélulas	(Chen <i>et al.</i> , 2013)
	Sensores para detecção de gases (H ₂)	(Sithole <i>et al.</i> , 2012)
	Percussor do óxido de zinco	(Li; Zou; Hou, 2011)
	Supercapacitores	(Khamlich <i>et al.</i> , 2016; Song <i>et al.</i> , 2017)
	Fotocatalisador (degradação de ciprofloxacina)	(Nekouei; Nekouei, 2017)

Fonte: Elaborado pelo autor (2023).

Com isso, cabe destacar alguns dos estudos encontrados, seja por sinergia com outros materiais aplicações na área da saúde, aplicações químicas e ambientais, ou ainda em áreas de tecnologia e de engenharias. A Figura 3, a seguir, resume o fluxo geral da pesquisa com a temática de aplicações do mineral simonkolleite.

Figura 3 – Fluxo geral da pesquisa sobre a aplicação do simonkolleite



Fonte: Elaborada pelo autor (2023).

3.1 Associação com outros materiais e dopagem

A associação de materiais com simonkolleite para aprimorar determinadas propriedades é explorada na literatura, conforme mostra o Quadro 3, a seguir:

Quadro 3 – Exemplos de aplicações do simonkolleite em associação com outros materiais

Associação do simonkolleite com outros materiais	Aplicações	Referência
Celulose	Transformação em ZnO	(Fu <i>et al.</i> , 2013)
Grafeno	Supercapacitores	(Khamlich <i>et al.</i> , 2016)
	Aplicações eletroquímicas	(Momodu <i>et al.</i> , 2015)
	Supercapacitores eletroquímicos	(Khamlich <i>et al.</i> , 2013)
TiO ₂	Decomposição de cromo em águas residuais	(Abdel Moniem <i>et al.</i> , 2015)
	Fotocatalisador	(Pal; Bera; Jana, 2015)
	Produção fotocatalítica de H ₂ e simultânea decomposição de corantes	(Badawy <i>et al.</i> , 2015)

Fonte: Elaborado pelo autor (2023).

Outra técnica também bastante utilizada é a dopagem, que já produziu uma revolução na concepção dos semicondutores. Porém, a introdução de dopantes em nanopartículas (NPs) para alcançar as propriedades não presentes em materiais não dopados continua difícil. As características das NPs dopadas são o resultado de várias interações entre o hospedeiro e o dopante. As interações de troca de *spin* entre o dopante e o material dopado, a presença de estados eletrônicos de longa

duração e altamente isolados ou simplesmente uma alta concentração de falhas estruturais são possíveis causas das novas propriedades das NPs dopadas (Kwon *et al.*, 2016).

3.2 Aplicações em ciências da saúde

Num exemplo de sinergia das características de materiais, as propriedades físico-químicas do mineral simonkolleite e do óxido de zinco foram estudadas, bem como a citotoxicidade destes em células cancerígenas relacionadas ao pulmão. A *performance* fotocatalítica do ZnO foi 80% maior, mas o simonkolleite e o nanocompósito não apresentaram esse desempenho. Foi observado também que o simonkolleite possui alto efeito tóxico em células tumorais do tipo MCF-7, embora o mecanismo antitumoral não ocorra predominantemente por meio de espécies reativas de oxigênio (Silva *et al.*, 2021).

O potencial de utilização do simonkolleite também é explorado, em forma de pó, como agente cicatrizante para feridas profundas num meio úmido, utilizando ratos como modelo histológico vivo. Um estudo determinou que após 4 semanas, em comparação com os curativos comerciais, a aplicação de simonkolleite cristalino promoveu uma aceleração na cicatrização de feridas em razão da melhora na formação de colágeno e angiogênese (crescimento de novos vasos sanguíneos a partir daqueles já existentes). Esse resultado foi atribuído aos íons de Zn^{2+} que se desprenderam da nanoestrutura (Yamamoto *et al.*, 2023).

Seguindo na dimensão de aplicações nas áreas da saúde, outro estudo explorou a aplicação de SK como nova fonte de zinco, sendo a espécie revestida com poliaminoácidos (PAA), por meio de uma solução de suspensão do pó de PAA em diferentes concentrações de cloreto de zinco. Foi observada constante liberação de íons de zinco a partir do revestimento, e esse fenômeno apresentou uma dependência da concentração da solução de ZnCl_2 e do tipo de solução utilizada (Li, S., *et al.*, 2019).

A introdução do simonkolleite melhorou a *performance* do Zn-PAA em promover a proliferação, diferenciação e mineralização das células estromais da medula óssea (BMCS). Esse efeito foi máximo quando $\text{PAA} = 0,05 \text{ M}$. Já a concentração de $\text{PAA} = 0,1 \text{ M}$ apresentou ligeira citotoxicidade, o que impediu a diferenciação e reduziu a mineralização. Além disso, a aplicação do revestimento de

SK melhorou a eficácia do Zn-PAA na supressão osteoclastogênese *in vitro*, proporcionando vantagens nas fases iniciais da regeneração óssea. Outro efeito observado foi a propriedade antibactericida contra *Escherichia coli* e *Staphylococcus aureus*, que é importante na prevenção de infecção pós-operatória (Li, S., et al., 2019).

Em outro trabalho, foi sintetizada, com sucesso, uma molécula híbrida mediante a combinação de sal de hidróxido de zinco em camadas com timol. Por meio de técnicas de caracterização, como a difração de raios-X, espectros de infravermelhos e Raman, e imagens de microscopia eletrônica de varredura, foi confirmada a presença da estrutura simonkolleite no composto em camadas. O material mostrou estabilidade térmica até 200 °C; acima dessa temperatura ocorreu a degradação do timol. A cinética de adsorção foi analisada, sendo observado um ajuste forte entre o modelo e os dados experimentais. A concentração de timol foi determinada por medição da espectroscopia UV-Vis. Foi posto que o timol pode ser eficazmente liberado numa solução tamponada com fosfato em aproximadamente 4 horas (Velázquez-Carriles et al., 2022).

Desse modo, o nano híbrido mostrou atividade antioxidante sinérgica, sendo eficazmente utilizado contra bactérias Gram-positivas como *Staphylococcus aureus*, sugerindo eficácia antibacteriana relevante. Além disso, o material híbrido suprimiu a produção de biofilmes por *Pseudomonas aeruginosa* em comparação com os mesmos materiais separados. Esses resultados mostram o potencial do nanohíbrido como agente descolonizador e preventivo em diferentes áreas, tais como ciência alimentar, medicina, odontologia e ambientes clínicos, contribuindo para a saúde pública (Velázquez-Carriles et al., 2022).

3.3 Aplicações químicas e ambientais

A utilização de SK pode ser explorada também para otimização do processo de biometanização. Os cristais de $\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ foram sintetizados em biogel. Enquanto o grupo sem a adição dos nanocristais demorou 4 dias para o início do desprendimento de metano, observou-se produção de biogás (CH_4) iniciando no primeiro dia, com a máxima sendo alcançada com uma dosagem de cerca 0,4 g de SK. Nessa quantidade, a produção de gás se iniciou já no primeiro dia de observação, atingindo um máximo de produção em volume de 320 ml por 16 dias.

Para doses maiores de S, percebeu-se um efeito letal dos íons de Zn^{2+} nos microrganismos responsáveis pela conversação da matéria orgânica em metano (Shivaraju *et al.*, 2021).

Uma aplicação promissora no controle de pragas para o SK puro e dopados com prata (SK:0,1Ag) e cobre (SK:1Cu) determinou que nanopartículas de SK:0,1Ag, SK:1Cu e SK puro inibiram o crescimento de *Xanthomonas hortorum* pv. *gardneri*, após um período de 5 horas. Além disso, a presença da bactéria nas sementes de tomate foi reduzida, ao mesmo tempo que a germinação das sementes não foi afetada. A aplicação de SK:0,1Ag a $2,5 \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$ e SK puro a $5 \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$ antes da inoculação e de SK:0,1Ag, SK:1Cu e SK puro a $5 \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$ após o tratamento mitigou os danos da mancha-bacteriana causada por patógenos nas culturas de tomates analisadas. Quando usadas como medida preventiva, as SK-NPs diminuíram a severidade da doença (Oliveira; Silva; Tebaldi, 2023).

Em outro reporte é descrito o sucesso em sintetizar nanopartículas esféricas de simonkolleite com média de 189 nm, usando rodizonato de sódio como precipitador. O objetivo foi utilizar as NPs para promover a decomposição térmica de perclorato de amônio. Observou-se também uma diminuição de temperatura de decomposição em $145,52 \text{ }^{\circ}\text{C}$ com um incremento de 113% de liberação de calor pela amostra com 2% de SK. Então, percebeu-se que a catalização das n-SK vem do óxido de zinco gerado pela amostra *in situ* (Spasov; Tzvetkov; Lyutov, 2020).

Seguindo no contexto ambiental, cabe mencionar a preparação da película fotocatalítica composta, conhecida como nano-ZnO *regenerated cellulose* (NZRC), que envolve a conversão de $Zn_5(OH)_8Cl_2 \cdot H_2O$ em ZnO sob condições hidrotérmicas controladas a uma temperatura relativamente baixa. A película NZRC-0,5, que foi feita com duração de tratamento hidrotérmico de 0,5 horas e contém uma pequena quantidade de $Zn_5(OH)_8Cl_2 \cdot H_2O$, teve uma atividade fotocatalítica superior. Isto foi evidenciado pela degradação completa de $1,53 \cdot 10^{-5} \text{ mol}$ de alaranjado de metila durante um período de 40 minutos, utilizando 1 g de NZRC-0,5 (Li, X., *et al.*, 2019).

As nanofolhas hexagonais homogêneas de ZnO sofreram transição do seu estado inicial para nanobastões à medida que a duração do tratamento hidrotérmico aumentou de 0,5 para 1 h. As películas NZRC-1 e NZRC-4 apresentaram diminuição da atividade quando sujeitas ao alaranjado de metila. Desse modo, as películas NZRC pré-preparadas demonstram um potencial promissor para aplicação na degradação em águas residuais de corantes orgânicos (Li, X., *et al.*, 2019).

Em um novo exemplo da coesão das propriedades fotocatalíticas dos nanocristais de simonkolleite e de seu nanocompósito com nanocristais de óxido de zinco, foram avaliadas as propriedades sinérgicas destes materiais na fotodegradação do fármaco sulfanilamida sob radiação no espectro do ultravioleta. A produção de espécies oxidativas foi avaliada por meio da técnica de caracterização espectroscopia de absorção no UV-Vis. Os achados mostraram que o nanocompósito SK/ZnO apresentou maior eficiência, neste caso, na decomposição da sulfanilamida. (Silva, 2022).

Outra pesquisa desenvolveu um sensor eletroquímico para o agrotóxico glifosato, visando aliar baixo custo, fácil preparação e sensibilidade. O glifosato não apresenta sinal eletroquímico, portanto, sua detecção foi realizada indiretamente, avaliando-se sua interação com dopamina utilizando algumas técnicas eletroquímicas e técnicas de caracterizações como espectroscopia Ultravioleta-Visível, e no infravermelho. Foram utilizadas técnicas de voltametria cíclica e de pulso diferencial nas determinações eletroquímicas, com eletrodo de carbono vítreo modificado com nanotubo de carbono de paredes múltiplas. O melhor meio para análise foi avaliado no estudo foi com tampões de acetato (pH 4,5), fosfato (pH 7) e borato (pH 10). O método permitiu a detecção da presença do agrotóxico glifosato em amostra de solo, com concentração de 6,894 ppb(partes por bilhão). Esse resultado demonstra o potencial do sensor como uma proposta promissora custo menor e fabricação simplificada para avaliação de glifosato no ambiente (Nascimento, 2022).

3.4 Aplicações de engenharia

No contexto de aplicações em materiais para engenharia elétrica, a literatura também aponta potencial de utilização para o desenvolvimento de células solares em dispositivos portáteis e leves que podem ser implementados em substratos flexíveis. O SK pode ser submetido a um tratamento térmico a uma temperatura relativamente baixa de 250 °C, resultando na conversão da sua estrutura em ZnO cristalino e mesoporoso. Por meio de uma técnica de eletrodeposição foi possível fabricar películas macroporosas constituídas por SK, sabidamente semicondutor, em substratos de vidro revestido com óxido de estanho dopado com flúor (FTO) (Canto-Aguilar *et al.*, 2022).

A morfologia da amostra obtida apresentou como característica ter plaquetas hexagonais lisas de tamanho da ordem de microns. Além disso, ainda por meio da técnica, é possível produzir películas espessas, com 6 μm , num período curto de 15 minutos. As plaquetas hexagonais mantêm sua macroestrutura, mas sofrem mesoporosidade como resultado da remoção de água e da eliminação de produtos de reação contendo íons Cl^- . Durante o estudo, foram construídas células solares sensibilizadas por corantes utilizando películas de SK e ZnO, empregando o fotossensibilizador completamente orgânico à base de benzotiadiazol MG-207. A solução eletrolítica utilizou o par redox I^-/I_3^- ou o par redox $\text{Co}(\text{bpy})_3^{2+/3+}$. Uma configuração de célula solar constituída por $\text{ZnO}/\text{MG-207}/\text{Co}(\text{bpy})_3^{2+/3+}$ alcançou eficiência de 1,74% (Canto-Aguilar *et al.*, 2022).

Outro trabalho também explorou a fabricação *in situ*, dessa vez de um eletrodo de supercapacitor, utilizando baterias de Zn-C usadas como precursor. Para a obtenção de supercapacitores eficazes, econômicos e leves, os óxidos metálicos podem ser considerados em razão da sua maior capacidade de armazenamento de carga. Nos padrões de difração de raios-X (DRX) do pó de bateria usado, os picos de difração mostram principalmente a presença das fases ZnMn_2O_4 (hetaerolite) e $\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (simonkolleite). Com essa premissa, autores como Hassan, Farzana e Sahajwalla (2019) sugeriram a fabricação *in situ* de NPs de ZnO como película ultrafina sobre um substrato de silício poroso (P-Si) a partir de pilhas de Zn-C gastas a 900 °C no forno tubular horizontal sob atmosfera de argônio.

Durante a variação crescente de temperatura da zona fria para a zona quente, a fase simonkolleite ($\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$) do pó de bateria usado perdeu apenas 1 mol de água. Submetido a uma temperatura mais elevada (900 °C) e a um aquecimento prolongado, o $\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2$ decompôs-se em ZnO, e a fase hetareolite (ZnMn_2O_4) do pó de bateria usado também começou a mudar suas fases para ZnO e MnO. As partículas formadas tinham um tamanho de cerca de 45 nm e uma morfologia semiesférica e apresentavam distribuição uniforme em todo o substrato como uma película ultrafina discreta (Hassan; Farzana; Sahajwalla, 2019).

A película ultrafina de ZnO era constituída basicamente por várias camadas de película de ZnO que se empilhavam periodicamente umas sobre as outras e formavam uma camada fina de ~ 390 nm, sendo a camada única de ~ 45 nm. A formação de NPs de ZnO foi detectada pela análise de DRX, espectroscopia de energia dispersiva (EDS) e espectroscopia de fotoelétrons e raios-X (XPS).

Utilizando a voltametria cíclica e a espectroscopia de impedância em KOH 0,6 M como eletrólito, foram também examinadas as propriedades eletroquímicas dos eletrodos desenvolvidos e do supercapacitor. O eletrodo ZnO/P-Si demonstrou um valor mais elevado de capacitância específica de $547 \text{ F}\cdot\text{g}^{-1}$ a uma velocidade de varrimento de $5 \text{ mV}\cdot\text{s}^{-1}$ (Hassan; Farzana; Sahajwalla, 2019).

Partindo para a engenharia eletrônica e com utilidade para engenharia química, um sensor Pd-ZnO, com camada de material nanoporoso fotocatalisador, ZnO/Zn₅(OH)₈Cl₂·H₂O (SK), cultivado *in situ*, produz uma detecção sintonizável e seletiva com uma sensibilidade de cerca de 23% por ppm para o CH₄ e de 93% por ppm para o CO, com um desvio mínimo da linha de base inferior a 3% após 100 ciclos. Se a nanopartícula estiver em excitação dupla em vez de excitação simples, a resposta aumenta drasticamente em baixa potência (Anjitha; Basu, 2023).

O papel desse fotocatalisador cultivado *in situ* é reforçado quando se compara os resultados da detecção com a caracterização do material, principalmente espectroscopia de fotoluminescência (PL) e XPS, resultados da detecção. Além do mais, a dessorção de oxigênio da superfície do sensor é melhorada, e o tempo de reposição é significativamente reduzido, quando o sensor ativado termicamente é submetido à luz ultravioleta após cada ciclo de exposição. As aplicações que envolvem a detecção de gás em concentrações são as mais adequadas para o sensor proposto. As informações recolhidas facilitaram a criação de um modelo confiável de fabricação de sensores de gás. A qualidade do sensor é reforçada pela extrema sensibilidade, estabilidade e seletividade das técnicas experimentais (Anjitha; Basu, 2023).

4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Simonkolleite tem se mostrado um material com uma aplicação bem diversa na saúde desde combate a células cancerígenas, melhoria de cicatrização, ou como fonte alternativa de zinco para os ossos até em controle ambiental de microrganismos como fungos e bactérias. Diversas metodologias de sínteses são conhecidas, e, recentemente, têm surgido outras técnicas.

Outro ponto de destaque desse material é seu potencial em aplicações químicas/ambientais na degradação de produtos químicos, corantes orgânicos em água contaminada. Também atua como otimizador de materiais para equipamentos como células solares e detecção de gases, supercapacitores e melhora na decomposição térmica de materiais. Embora tenha se mostrado versátil para as aplicações, são necessários mais estudos, visto que a literatura disponível tem se mostrado ainda limitada.

REFERÊNCIAS

- ABDEL MONIEM, S. M. *et al.* Detoxification of hexavalent chromium in wastewater containing organic substances using simonkolleite-TiO₂ photocatalyst. **Process Safety and Environmental Protection**, [Amsterdam], v. 95, p. 247-254, May 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.psep.2015.03.010>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0957582015000580>. Acesso em: 28 nov. 2023.
- AGRA, I. M. **Síntese e caracterização de compósitos hidrocarvão/simonkolleite e seus precursores para aplicação na remoção adsortiva do antibiótico Rifampacina em solução aquosa**. 2021. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Centro de Tecnologia, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2021. Disponível em: <https://www.repositorio.ufal.br/handle/123456789/8709/>. Acesso em: 28 nov. 2023.
- ANJITHA, R. G.; BASU, P. K. Dual activation and photocatalyst-induced selective detection in defect tuned Pd-ZnO thin films for low ppm detection of CH₄ and CO. **IEEE Sensors Journal**, [Piscataway, NJ], v. 23, n. 1, p. 143-153, 1 Jan. 2023. DOI: <https://doi.org/10.1109/JSEN.2022.3223797>. Disponível em: <https://ieeexplore.ieee.org/document/9966504>. Acesso em: 28 nov. 2023.
- BADAWY, M. I. *et al.* Mesoporous simonkolleite-TiO₂ nanostructured composite for simultaneous photocatalytic hydrogen production and dye decontamination. **Process Safety and Environmental Protection**, [Amsterdam], v. 94, p. 11-17, Mar. 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.psep.2014.12.001>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0957582014001839>. Acesso em: 28 nov. 2023.
- CANTO-AGUILAR, E. J. *et al.* Electrodeposition of simonkolleite as a low-temperature route to crystalline ZnO films for dye-sensitized solar cells. **Journal of the Electrochemical Society**, [Bristol, UK], v. 169, n. 4, article 042504, Apr. 2022. DOI: <https://doi.org/10.1149/1945-7111/ac62c8>. Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1149/1945-7111/ac62c8>. Acesso em: 28 nov. 2023.
- CHEN, H. *et al.* Zn₅(OH)₈Cl₂·H₂O-based quantum dots-sensitized solar cells: a common corrosion product enhances the performance of photoelectrochemical cells. **Electrochimica Acta**, [Lausanne], v. 105, p. 289-298, 30 Aug. 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2013.04.175>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0013468613008906>. Acesso em: 28 nov. 2023.
- FU, L.-H. *et al.* Zn₅(OH)₈Cl₂·H₂O sheets formed using cellulose as matrix via microwave-assisted method and its transformation to ZnO. **Materials Letters**, [Amsterdam], v. 92, p. 136-138, 1 Feb. 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2012.10.103>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0167577X12015364>. Acesso em: 28 nov. 2023.
- GALVÃO, M. C. B.; RICARTE, I. L. M. Revisão sistemática da literatura: conceituação, produção e publicação. **Logeion: Filosofia da Informação**, Rio de Janeiro, v. 6, n. 1, p. 57-73, 15 set. 2019. DOI: <https://doi.org/10.21728/logeion>.

2019v6n1.p57-73. Disponível em: <https://revista.ibict.br/fiinf/article/view/4835>. Acesso em: 28 nov. 2023.

HASSAN, K.; FARZANA, R.; SAHAJWALLA, V. In-situ fabrication of ZnO thin film electrode using spent Zn-C battery and its electrochemical performance for supercapacitance. **SN Applied Sciences**, [Berlin], v. 1, article 302, 5 Mar. 2019. DOI: <https://doi.org/10.1007/S42452-019-0302-1>. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/s42452-019-0302-1>. Acesso em: 28 nov. 2023.

KHAMLICH, S. *et al.* Hydrothermal synthesis of simonkolleite microplatelets on nickel foam-graphene for electrochemical supercapacitors. **Journal of Solid State Electrochemistry**, [Berlin], v. 17, n. 11, p. 2879-2886, Nov. 2013. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10008-013-2206-0>. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10008-013-2206-0>. Acesso em: 28 nov. 2023.

KHAMLICH, S. *et al.* Microwave synthesis of simonkolleite nanoplatelets on 3D nickel foam-graphene for supercapacitor applications. **Energy Procedia**, [Oxford, UK], v. 88, p. 614-618, June 2016. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2016.06.087>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1876610216301515>. Acesso em: 28 nov. 2023.

KWON, S. G. *et al.* Oxidation induced doping of nanoparticles revealed by *in situ* X-ray absorption studies. **Nano Letters**, [Washington, DC], v. 16, n. 6, p. 3738-3747, 6 May. 2016. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b01072>. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.nanolett.6b01072>. Acesso em: 28 nov. 2023.

LI, S. *et al.* Simonkolleite coating on poly(amino acids) to improve osteogenesis and suppress osteoclast formation *in vitro*. **Polymers**, [Basel], v. 11, n. 9, article 1505, 16 Sept. 2019. DOI: <https://doi.org/10.3390/polym11091505>. Disponível em: <https://www.mdpi.com/2073-4360/11/9/1505>. Acesso em: 28 nov. 2023.

LI, X. *et al.* Nano-ZnO/regenerated cellulose films prepared by low-temperature hydrothermal decomposition of $\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ from cellulose- ZnCl_2 aqueous solution. **Materials Letters**, [Amsterdam], v. 245, p. 82-85, 15 June 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2019.02.092>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0167577X19303337>. Acesso em: 28 nov. 2023.

LI, Y.; ZOU, Y.; HOU, Y. Synthesis and characterization of simonkolleite nanodisks and their conversion into ZnO nanostructures. **Crystal Research and Technology**, [Berlin], v. 46, n. 3, p. 305-308, Mar. 2011. DOI: <https://doi.org/10.1002/crat.201000673>. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/crat.201000673>. Acesso em: 28 nov. 2023.

MAHMOUDIAN, M. R. *et al.* Facile fabrication of $\text{Zn}/\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ flower-like nanostructure on the surface of Zn coated with poly (N-methyl pyrrole). **Applied Surface Science**, [Amsterdam], v. 257, n. 24, p. 10539-10544, 1 Oct. 2011. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2011.07.046>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0169433211011019>. Acesso em: 28 nov. 2023.

MOMODU, D. Y. *et al.* Simonkolleite-graphene foam composites and their superior electrochemical performance. **Electrochimica Acta**, [Lausanne], v. 151, p. 591-598, 1 Jan. 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2014.11.015>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0013468614021926>. Acesso em: 28 nov. 2023.

NASCIMENTO, S. S. **Desenvolvimento de método eletroquímico para determinação de glifosato em presença de simonkolleite e dopamina**. 2022. Tese (Doutorado em Ciências) – Instituto de Química e Biotecnologia, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2022. Disponível em: <http://www.repositorio.ufal.br/jspui/handle/123456789/8821>. Acesso em: 28 nov. 2023.

NEKOU EI, F.; NEKOU EI, S. Comparative study of photocatalytic activities of $\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ and ZnO nanostructures in ciprofloxacin degradation: response surface methodology and kinetic studies. **Science of the Total Environment**, [Amsterdam], v. 601-602, p. 508-517, 1 Dec. 2017. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.05.117>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0048969717312172>. Acesso em: 28 nov. 2023.

OLIVEIRA, N. S.; SILVA, A. C. A.; TEBALDI, N. D. Simonkolleite nanoparticles for seed treatment and control of tomato bacterial spot caused by *Xanthomonas hortorum* pv. *gardneri*. **Agricultural Sciences**, Lavras, v. 47, e000623, 14 Apr. 2023. DOI: <https://doi.org/10.1590/1413-7054202347000623>. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/cagro/a/ZRvt6x8n76fnV7ghyfrFvjx/>. Acesso em: 28 nov. 2023.

PAL, M.; BERA, S.; JANA, S. Sol-gel based simonkolleite nanopetals with SnO_2 nanoparticles in graphite-like amorphous carbon as an efficient and reusable photocatalyst. **RSC Advances**, [London], v. 5, n. 92, p. 75062-75074, 20 Aug. 2015. DOI: <https://doi.org/10.1039/c5ra12322d>. Disponível em: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/RA/C5RA12322D>. Acesso em: 28 nov. 2023.

QU, S. *et al.* Controlling simonkolleite crystallisation via metallic Zn oxidation in a betaine hydrochloride solution. **Nanoscale Advances**, [London], v. 5, n. 9, p. 2437-2452, 7 May 2023. DOI: <https://doi.org/10.1039%2Fd3na00108c>. Disponível em: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2023/na/d3na00108c>. Acesso em: 28 nov. 2023.

ROSTAS, A. M. *et al.* Electron paramagnetic resonance and microstructural insights into the thermal behavior of simonkolleite nanoplatelets. **Physical Chemistry Chemical Physics**, [London], v. 22, n. 17, p. 9503-9512, 7 May 2020. DOI: <https://doi.org/10.1039/D0CP00641F>. Disponível em: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2020/CP/D0CP00641F>. Acesso em: 28 nov. 2023.

SHIVARAJU, H. P. *et al.* Facile synthesis and characterization of $\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ nanostructure for the biomethanation process. **Materials Letters**, [Amsterdam], v. 282, article 128808, 1 Jan. 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2020.128808>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0167577X20315159>. Acesso em: 28 nov. 2023.

SILVA, A. C. A. *et al.* Synergistic effect of simonkolleite with zinc oxide: physico-chemical properties and cytotoxicity in breast cancer cells. **Materials Chemistry and Physics**, [Amsterdam], v. 266, article 124548, 1 July 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2021.124548>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S025405842100331X>. Acesso em: 28 nov. 2023.

SILVA, M. V. **Estudo das propriedades fotocatalíticas e elétricas de nanocristais de simonkolleite e seu nanocompósito com nanocristais de óxido de zinco.** 2022. Trabalho de Conclusão de Curso (Licenciatura em Física) – Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2022. Disponível em: <https://www.repositorio.ufal.br/handle/123456789/11456/>. Acesso em: 28 nov. 2023.

SITHOLE, J. *et al.* Simonkolleite nano-platelets: synthesis and temperature effect on hydrogen gas sensing properties. **Applied Surface Science**, [Amsterdam], v. 258, n. 20, p. 7839-7843, 1 Aug. 2012. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2012.04.073>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0169433212007271>. Acesso em: 28 nov. 2023.

SONG, B. *et al.* Controllable growth of monodisperse multilayered three-dimensional simonkolleite and its supercapacitor activity. **Crystal Growth and Design**, [Washington, DC], v. 17, n. 6, p. 3548-3555, 7 June 2017. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.7b00494>. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.cgd.7b00494>. Acesso em: 28 nov. 2023.

SPASSOV, T.; TZVETKOV, G.; LYUTOV, L. Novel spherical simonkolleite nanoparticles and their promotional effect on the thermal decomposition of ammonium perchlorate. **Vacuum**, [Amsterdam], v. 175, article 109285, May 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2020.109285>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0042207X20301226>. Acesso em: 28 nov. 2023.

VELÁZQUEZ-CARRILES, C. *et al.* Nanohybrid of thymol and 2D simonkolleite enhances inhibition of bacterial growth, biofilm formation, and free radicals. **Molecules**, [Basel], v. 27, n. 19, article 6161, 20 Sept. 2022. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules27196161>. Disponível em: <https://www.mdpi.com/1420-3049/27/19/6161>. Acesso em: 28 nov. 2023.

YAMAMOTO, O. *et al.* The significant potential of simonkolleite powder for c under a moist environment: *in vivo* histological evaluation using a rat model. **Bioengineering**, [Basel], v. 10, n. 3, article 375, 19 Mar. 2023. DOI: <https://doi.org/10.3390/bioengineering10030375>. Disponível em: <https://www.mdpi.com/2306-5354/10/3/375>. Acesso em: 28 nov. 2023.

ZAGÓRSKA, U.; KOWALSKA, S. Crystallization of simonkolleite ($\text{Zn}_5\text{Cl}_2(\text{OH})_8 \cdot \text{H}_2\text{O}$) in powder samples prepared for mineral composition analysis by quantitative X-ray diffraction (QXRD). **Nafta-Gaz**, [Kraków], v. 77, n. 5, p. 293-298, May 2021. DOI: <https://doi.org/10.18668/NG.2021.05.02>. Disponível em: https://www.inig.pl/magazyn/nafta-gaz/Nafta-Gaz_2021-05_2.pdf. Acesso em: 28 nov. 2023.