

T709: Modelamiento y simulación de materiales, estructuras y dispositivos nanométricos

Arquitectura a nanoescala: diseño y modelado de nanopartículas bimetálicas para aplicaciones avanzadas

Samuel Baltazar

*Departamento de Física y
CEDENNA, Universidad
de Santiago de Chile,
Santiago, Chile*

Javier Rojas

*Departamento de Física y
CEDENNA, Universidad
de Santiago de Chile,
Santiago, Chile*

Rafael Melo

*Instituto de
Investigaciones
Agropecuarias, Santiago,
Chile*

Pamela Sepúlveda

*Universidad Mayor,
Santiago, Chile*

Las nanopartículas bimetálicas han despertado un creciente interés en el ámbito científico debido a la interacción sinérgica entre los dos componentes, la cual puede dar lugar a características y propiedades distintas a las de los materiales prístinos, dependiendo del grado de composición. Estas nanopartículas son relevantes en diversos campos como la electrónica, la medicina y la catalización, gracias a sus propiedades electrónicas, magnéticas y ópticas. En este trabajo, nos enfocamos en examinar la correlación entre la morfología, concentración, tamaño y composición de nanopartículas bimetálicas, cuyas dimensiones son comparables a las obtenidas por síntesis experimental. En particular, se investigan casos como nanopartículas de AgCu, FeCu y AgCo, entre otros, utilizando modelos teóricos y simulaciones de dinámica molecular para analizar la estructura, comparando y complementando estos resultados con evidencia experimental obtenida por síntesis de reducción química. Se ha observado que las nanopartículas exhiben morfologías preferenciales, como núcleo-corteza, tipo Janus o aleaciones, dependiendo del tamaño y la concentración de las mismas [1]. Nuestro modelado se basa en métodos de optimización energética, empleando potenciales de interacción atómica del tipo embedded-atom (EAM) [2], y un proceso de annealing con dinámica molecular. Posteriormente, identificamos estructuras estables y metaestables en función de la concentración. Aunque hemos encontrado distintos grados de correspondencia entre nuestros modelos teóricos y los resultados experimentales, estas discrepancias pueden explicarse a partir del método de síntesis empleado. Esto nos ha permitido proponer morfologías de nanopartículas bimetálicas que pueden ser controladas mediante la selección de parámetros de síntesis y métodos de minimización energética. En particular, para los casos de FeCu y AgCu, se ha identificado una preferencia por estructuras tipo núcleo-corteza y tipo Janus para concentraciones bajas y altas de Cu, respectivamente [3]. Finalmente, este estudio ha permitido no solo generar un procedimiento sistemático para obtener nanopartículas estables, sino que también ayudar a optimizar procesos como la remediación de aguas contaminadas. Esto demuestra la utilidad de estos estudios para el diseño estratégico de nanopartículas bimetálicas que pueden ser aplicadas en diversas problemáticas.

Agradecimientos

Agradecemos el financiamiento de proyecto DICYT-USACH Regular 042331BR y de Fondo basal para centros científicos y tecnológicos proyecto AFB220001.

Referencias

- [1] Rojas-Nunez J. et al. (2018), doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b11556
- [2] Mishin Y. et al. (1999), doi.org/10.1103/PhysRevB.59.3393
- [3] Freire R. et al. (2020), doi.org/10.1039/d0qi00940g