

Diseño Racional de nanoestructuras bimetálicas

Samuel E. Baltazar^{1,2*}, Javier Rojas-Nunez^{1,2}, Pamela Sepúlveda^{1,2}, Rafael Freire^{2,3}

¹Departamento de Física, Universidad de Santiago de Chile, Chile

² Centro para el desarrollo de la Nanociencia y Nanotecnología CEDENNA, Chile.

³ Instituto de Investigaciones agropecuarias, Centro Regional La Platina, Chile

*samuel.baltazar@usach.cl

Resumen

La síntesis y aplicación de nanopartículas bimetálicas es un tema de gran interés debido a que la relación sinérgica entre ambos componentes puede dar lugar a materiales con morfologías y propiedades fisicoquímicas diferentes de los casos prístinos, según el grado de composición. Estos materiales son interesantes tanto en sus propiedades electrónicas, magnéticas u ópticas y eventualmente ser aplicados en procesos catalíticos, biomedicina, electrónica, entre otros.

En este trabajo se estudia la relación entre morfología, concentración, tamaño y composición de nanopartículas bimetálicas, de tamaños comparables a los sintetizados experimentalmente. Entre estos casos, revisaremos nanopartículas de AgCu, FeCu y FeNi a partir del modelamiento teórico, complementando las simulaciones de dinámica molecular de configuración estructural con evidencia experimental basada en síntesis por reducción química. Se han obteniendo nanopartículas con morfologías preferenciales tipo núcleo-corteza, tipo Janus o aleaciones, según el tamaño y concentración [1].

El modelamiento considera métodos de optimización energética, utilizando potenciales de interacción atómica tipo embedded-atom (EAM) [2], en un proceso de annealing con dinámica molecular. Posteriormente se determinan estructuras estables y metaestables según tamaño y concentración. Diferente grado de acuerdo entre teoría y experimentos es encontrado, lo que se explica según el método de síntesis utilizado, siendo posible proponer morfologías de partículas bimetálicas estables controladas a partir de parámetros de síntesis y de diferentes métodos de minimización energéticas. En el caso de FeCu and AgCu [3], se encontró la preferencia de estructuras tipo núcleo-corteza y tipo Janus para bajas y altas concentraciones de Cu, respectivamente, mientras que en FeNi se obtienen principalmente aleaciones formadas en core-shell. Estos sistemas han sido utilizados para optimizar procesos tales como la remediación de aguas contaminadas y procesos de catálisis, mostrando la utilidad de los resultados para el diseño inteligente de nanopartículas que son aplicadas en diferentes problemáticas.

Agradecemos el financiamiento de proyecto DICYT 042231BR y Fondo basal para centros científicos y tecnológicos AFB180001.

Referencias

- [1] J. Rojas-Nunez et al. (2018). J. Phys. Chem. C 122, 8528-8534.
- [2] Y. Mishin et al. (1999) Phys. Rev. B. 59, 3393
- [3] Freire et al. (2020). Inorganic Chemistry Frontiers, 7(24), 4902-4912