



VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

Estructuras tetragonales en supercristales de nanopartículas: ¿Cuándo y por qué se forman?

Missoni, Leandro¹, Tagliacruzchi, Mario^{1,2}.

¹ Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina.

² CONICET – Universidad de Buenos Aires, Instituto de Química Física de los Materiales, Medio Ambiente y Energía (INQUIMAE), Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina.
missoni@qi.fcen.uba.ar

La formación de estructuras ordenadas de nanopartículas, conocidas como supercristales (SCNPs), ha surgido en las últimas décadas como estrategia para el diseño de nuevos materiales. En este trabajo, se propuso estudiar los motivos que influyen en la formación de SCNPs de baja simetría, en particular el caso tetragonal centrado en el cuerpo (TCC).

Los SCNPs suelen cristalizar en estructuras cúbicas centradas en las caras, lo cual es esperable para un sistema de esferas rígidas. Sin embargo, experimentalmente suelen encontrarse estructuras no compactas. El caso de estructuras tetragonales es de particular interés, debido a ser raramente encontrado en partículas micrométricas. Las asimetrías presentes en el sistema suelen relacionarse con la estabilidad de estructuras TCC. En este trabajo, dos hipótesis que explican dicha estabilidad son puestas a prueba: i) La influencia del sustrato sobre el cual se depositan las NPs y ii) La presencia de NPs facetadas, y su posible influencia en el grado de cubrimiento por ligandos. Se utilizó una herramienta teórica recientemente desarrollada, basada en mecánica estadística, conocida como teoría molecular. Esta herramienta nos permite considerar de forma explícita la morfología y distribución de ligandos superficiales en las NPs, el arreglo espacial de NPs en las distintas fases cristalinas, y el contenido de solvente en la misma. De esta manera, se logra obtener información sobre propiedades estructurales y de energía libre de cada sistema estudiado. Así, fue posible construir diagramas de fase para distintos tipos de SCNPs. Mediante esta metodología encontramos que la presencia de sustrato en SCs de NPs esféricas estabiliza estructuras TCC en una pequeña región del diagrama de fases. Por otro lado, las NPs facetadas muestran tener una fuerte influencia en la estabilización de estructuras TCC.

Bibliografía:

Missoni, L., *Nanoscale*, **2021**, Advance Article

Missoni, L., *ACS Nano*, **2020**, 14, 5, 5649–5658

