

Influencias del tamaño y composición sobre las propiedades estructurales y termodinámicas de nanopartículas bimetálicas de AlFe via simulaciones atomísticas

Resumen

Las nanopartículas (NPs) o *clusters* son agregados de átomos que constan desde decenas hasta millones de partículas de uno o varios elementos químicos a escala nanométrica (1-100 nm). El interés para estudiar estos sistemas es debido a que sus propiedades son sensibles a la variación de la composición, tamaño, temperatura, presión, entre otros factores a diferencia de su contraparte *bulk* [1,2]. Sin embargo, las NPs binarias y ternarias (nanoaleaciones) actualmente están siendo estudiadas para determinar su estabilidad y sus propiedades físico-químicas mediante simulaciones de dinámica molecular (DM) [3,4]. En particular, las NPs binarias poseen diversas aplicaciones en campos como la catálisis, medicina, electrónica, óptica y remediación ambiental [1,5]. En este Encuentro de Invierno (ECI-2020), se presenta un estudio sistemático de las influencias del tamaño y composición sobre las propiedades estructurales y termodinámicas de las NPs binarias de $(Al_{100-n}Fe_n)_N$ (n y N son la composición y el tamaño), empleado simulaciones de DM. Los resultados muestran que el incremento del tamaño y composición aumentan los valores de la temperatura de fusión. Las NPs obtenidas a 300 K presentan mezcla de estructuras como BCC, HCP, ICO, FCC y en el límite de composición solo BCC (para Fe) y FCC (para Al). Finalmente, hemos notado que las NPs bimetálicas $(AlFe)_N$ también son gobernadas por las leyes de escalamiento que rigen para las NPs monometálicas [2].

Descriptor: Nanoaleación, aluminio, hierro, dinámica molecular.

Abstract

Nanoparticles (NPs) or clusters are aggregates of atoms consisting of tens to millions of particles of one or more chemical elements at nanoscale (1-100 nm). The interest in studying these systems is due to that their properties are sensitive to variation in composition, size, temperature, pressure, etc, unlike their bulk counterpart [1,2]. However, binary and ternary NPs (nanoalloys) are currently being studied to determine their stability and their physical and chemical properties using molecular dynamics simulations (MD) [3,4]. In particular, binary NPs have diverse applications in fields such as catalysis, medicine, electronics, optics, and environmental remediation [1,5]. In this talk, a systematic study of the influences of size and composition on the structural and thermodynamic properties of binary NPs of $(Al_{100-n}Fe_n)_N$ (n and N are composition and size) is presented, using MD simulations. The results show that the increase in size and composition increase the melting temperature values. The NPs obtained at 300 K present a mixture of structures such as BCC, HCP, ICO, FCC and in the composition limit only BCC (for Fe) and FCC (for Al). Finally, we have noted that bimetallic NPs (AlFe) are also governed by the scaling laws that apply to monometallic NPs [2].

Keywords: Nanoalloy, aluminum, iron, molecular dynamics.

Referencias:

- [1] R. Ferrando, J. Jellinek, R. L. Johnston. *Chem. Rev.*, **108**(3):845–910, 2008.
- [2] J. J. Torres, L. R. Medrano, C. V. Landauro, J. Rojas-Tapia. *Physica B.*, **436**:74–79, 2014.
- [3] A. K. Garip. *Molecular Simulation*, **45**(13):1004–1013, 2019.
- [4] S. Taran. *Comp. Theor. Chem.*, **1166**:112576, 2019.
- [5] Wu-Jun Liu, Ting-Ting Qian, Hong Jiang. *Chem. Engin. J.*, **236**:448–463, 2014.

Ciencias de materiales

Ciencia de materiales

Ciencias de la Salud

Energía y medio ambiente

Author: CUBA-SUPANTA, Gustavo (Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos)

Co-authors: Prof. ROJAS TAPIA, Justo (Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos); Prof. LANDAURO, Carlos V. (Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos); Dr GUERRERO SANCHEZ, Jonathan (Centro de Nanociencia y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México); Prof. TAKEUCHI, Noboru (Centro de Nanociencia y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México)

Presenter: CUBA-SUPANTA, Gustavo (Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos)