

PROPUESTA PARA AUXILIAR DE INVESTIGACIÓN

Nombre del NACT: División Polímeros Nanoestructurados (INTEMA)

Director del NACT: Cristina Hoppe

Tutor del auxiliar: Cristina Hoppe

Co-Tutor del auxiliar: Cristian Balbuena

Proyecto de investigación en el que se enmarca la propuesta:

Proyecto UNMdP 15/G595: MATERIALES INTELIGENTES CON COMPONENTES ORGÁNICOS E INORGÁNICOS.

Descripción de las tareas a realizar (máximo 1 página):

Modelado multi-escala del proceso de formación de nanopartículas de plata estabilizadas con poli-vinil-pirrolidona.

Una de las características fundamentales que controlan las propiedades físicas y químicas de las nanopartículas (NPs) es su tamaño. El uso de agentes estabilizantes durante el proceso de síntesis permite controlar la forma y tamaño de las mismas, así como eventuales procesos de agregación[1]. En el presente plan se plantea el desarrollo de un modelo cinético basado en un balance de población para representar los procesos de nucleación, crecimiento y coalescencia que ocurren durante la síntesis de NPs de plata funcionalizadas con poli-vinil-pirrolidona (PVP). Se ha observado experimentalmente que con concentraciones bajas de PVP se favorece la formación de estructuras filamentosas de diversas topologías (lineales, ramificadas, entrecruzadas), que parecen formarse a partir de la agregación y coalescencia de partículas más pequeñas[2], [3]. Se considerarán diferentes mecanismos físicos posibles, y se analizará su capacidad de representar resultados experimentales. Esto se complementará con simulaciones de dinámica molecular para determinar la mecanística a escala atómica (trabajo en curso), y resultados experimentales. El efecto protector de la PVP se incorporará, en principio, como una dependencia de las constantes cinéticas de crecimiento/coalescencia con el tamaño de la partícula y la concentración de la PVP. Se pretende que a partir de los resultados del modelo puedan plantearse las estrategias y condiciones de síntesis en función de la distribución de tamaños de partículas deseada.

Tareas a desarrollar: Se formulará un modelo general de coagulación, basado en la ecuación de Smoluchowsky[4]. Se considerarán diferentes formulaciones del modelo, pudiendo incluir procesos de fisión de partículas, nucleación, y otros efectos. Las ecuaciones diferenciales se implementarán y resolverán en el software de cálculo SciLab®, se realizará un análisis paramétrico del modelo estudiando como varía la distribución de tamaños y el tiempo de proceso en función de las constantes de velocidad los procesos involucrados.

Referencias

- [1] P. V. Danckwerts, "Surface Capping Agents and Their Roles in Shape-Controlled Synthesis of Colloidal Metal Nanocrystals," *Angew. Chemie*, 2019.
- [2] C. E. Hoppe, M. Lazzari, I. Pardiñas-Blanco, and M. A. López-Quintela, "One-step synthesis of gold and silver hydrosols using poly(N-vinyl-2-pyrrolidone) as a reducing agent," *Langmuir*, vol. 22, no. 16, pp. 7027–7034, 2006.
- [3] I. Pardiñas-Blanco, C. E. Hoppe, Y. Piñeiro-Redondo, M. A. López-Quintela, and J. Rivas, "Formation of gold branched plates in diluted solutions of poly(vinylpyrrolidone) and their use for the fabrication of near-infrared-absorbing films and coatings.," *Langmuir*, vol. 24, no. 3, pp. 983–990, Feb. 2008.
- [4] D. R. Handwerk, P. D. Shipman, C. B. Whitehead, S. Özkar, and R. G. Finke, "Mechanism-Enabled Population Balance Modeling of Particle Formation en Route to Particle Average Size and Size Distribution Understanding and Control," *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 141, no. 40, pp. 15827–15839, 2019.



Firma del Tutor
del Asistente



Firma del Co-Tutor
del Asistente



Firma del Director
del NACT