



## ESTUDIO TEORICO-EXPERIMENTAL DE LA TRANSFERENCIA DE CARGA ENTRE NANO-SUPERFICIES DE ORO Y PLATA MODELADAS CON LA TEORÍA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD (DFT)

Maira Ramos<sup>1</sup>, Carlos Quintanar <sup>1</sup>, Reyna Caballero<sup>1</sup>, Francisco Espinoza<sup>2</sup>, Héctor Cruz-  
Manjarrez <sup>3</sup> y Luis Flores<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ciencias, UNAM; México <sup>2</sup> CIMAV-CHIHUAHUA, UNAM; México <sup>3</sup> Instituto de  
Física, UNAM; México

e-mail: fi.bajasae.mairaramos@gmail.com

El presente trabajo explora las características de sistemas con defectos (sistemas no ideales), en particular cúmulos de oro, plata, aluminio, plata-aluminio y oro-plata. Para ello, las superficies de oro, plata y una película delgada de aluminio se prepararon por el método de sputtering. La presencia de Al, Ag y Au se confirmó con Espectrometría de Dispersión de Energía de rayos X (EDS). Usando Microscopia Electrónica de Transmisión de Alta Resolución (HRTEM) se tomaron micrografías de las muestras Al, Au y Ag.

Para el oro y la plata elegimos 25 átomos de partículas encontradas en las micrografías de HRTEM y para estos átomos obtuvimos las coordenadas usando el software ImageJ; con esas coordenadas hicimos estudios detallados de la densidad de carga empleando la teoría del funcional de la densidad. De los 25 átomos se escogieron dieciocho y se modeló el cúmulo Au<sub>18</sub>-Ag<sub>18</sub>, de este cúmulo se analizó la transferencia de carga entre la superficie de oro y la de plata.

También estudiamos un cúmulo de ocho átomos de oro casi plano Au<sub>8</sub>, el cual fue obtenido por un análisis de dinámica molecular usando la Teoría del Funcional de la Densidad.

El cúmulo Au<sub>8</sub>, se colocó sobre el Ag<sub>18</sub>, y se determinó la transferencia de carga entre oro y plata, mediante el análisis de la diferencia de la densidad de carga. Todos los cálculos de DFT se realizaron con el funcional PBE para el intercambio y correlación implementada en el código deMon2K.

Agradecimientos: Proyecto PAPIIT-UNAM IN111816