



## COHESIÓN Y MORFOLOGÍA DE NANOPARTÍCULAS DE AU

Keila Berenice Escobar Gómez<sup>1</sup>, Juan A. Reyes-Nava<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Energías Renovables, Instituto de Ciencias Básicas y Aplicadas, UNICAH, Libramiento Norte Poniente 1150, Col. Lajas Maciel, C.P. 29039, Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; México.  
e-mail: al610115003@unicach.mx

Los experimentos evidencian que las partículas de oro tienen la propiedad de acentuar su cohesión en tres morfologías: decaédricas, icosaédricas y cubo-octaédrica. Sin embargo este hecho no está entendido. La presente investigación tiene el propósito de identificar el origen físico de esta propiedad singular. Para alcanzar este propósito se postuló la hipótesis de trabajo: "La dependencia de la cohesión de una partícula respecto a sus morfologías está determinada por las cohesiones y por las coordinaciones de todos los átomos que la constituyen". Esta hipótesis se evaluó en dos partículas cuyas estructuras han sido determinadas mediante experimentos muy controlados: Au<sub>309</sub> y Au<sub>923</sub>. Su evaluación se implementó completamente con elementos teóricos. Para cada tamaño de partícula se preparó un colectivo de 10 partículas idénticas. Las morfologías de cada tamaño se determinaron templando el colectivo de partículas desde un estado de alta energía de su fase líquida. Para cada partícula, en todas sus morfologías, se determinaron las cohesiones y las coordinaciones de cada uno de sus átomos. Los resultados del templado teórico reproducen las morfologías determinadas por los experimentos.

Además, los resultados evidencian que la cohesión de un átomo con el resto del cúmulo depende en esencia de su coordinación. Se concluye que esta dependencia junto con la distribución de átomos respecto de sus coordinaciones determina la dependencia de la cohesión de una partícula respecto de su morfología. Todos los procesos físicos se implementaron mediante dinámica molecular a energía constante. La interacción atómica se describió con el Modelo del Átomo Embebido. Esta investigación teórica fue realizada por medio de un programa de Dinámica Molecular que se codificó en el lenguaje de CUDA C para GPU'S. Una herramienta relativamente nueva que se usa para investigación teórica.

### Referencias:

- Koga, K.; Ikeshoji, T.; Sugawara, K. *Phys. Rev. Lett.* **2004**, *92*, 115507.  
Plant, S. R.; Lu, C.; Palmer, R. E. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 7559-7562.  
Li, Z. Y.; Young, N. P.; et al. *Nature.* **2008**, *451*, 46-48.  
Cai, J.; Ye, Y.Y. *Phys. Rev. B.* **1996**, *54*, 8398.