



FUSIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE PLATINO

Jesús Emmanuel Pinto Preciado¹, Juan Andrés Reyes Nava²

^{1,2}Instituto de Ciencias Básicas y Aplicadas, Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Energías Renovables, Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas, 1ª Sur Poniente No. 1460 Col. Centro C. P. 29000, México.

¹jesus.epintop@gmail.com, ²jareyesn@gmail.com

Las propiedades de los cúmulos proporcionan un puente entre las propiedades de los átomos aislados y materia condensada, debido a eso, pueden mostrar un comportamiento físico y químico inusual. Un uso importante de las nanopartículas de platino es como un catalizador o co-catalizador, donde el conocimiento de su estructura atómica es el punto de partida para la comprensión de las características peculiares de un clúster. Es bien conocido que las agrupaciones de tamaño nanométrico pueden tener tanto una estructura fcc estructuras cristalinas y no cristalinas. Estos últimos son muy comunes en tamaños pequeños y en el caso de los metales nobles y de transición, estos toman la forma de icosaédrica (1).

En el estudio propuesto se investiga una de sus propiedades fundamentales, de fusión. Para modelar las interacciones interatómicas se empleó el potencial de Gupta (2). El uso de dinámica molecular hará posible predecir con mucha precisión el comportamiento de movimiento de las partículas, se describirán las nanopartículas de fusión compuestas de 309 y 923 átomos en términos de su curva de calorías y su calor específico. Estas partículas se someten a un proceso de templado para encontrar una estructura de candidato de energía más cohesiva, la cual resultó ser una estructura decaédrica. Las características que se encuentran a partir de la fusión serán explicados en términos de la estructura atómica de sus configuraciones de equilibrio mecánico.

Referencias:

(1) Martin, T. Shells Of Atoms. *Physics Reports* 1996, 273, 199-241.

(2) Baletto, F.; Ferrando, R.; Fortunelli, A.; Montalenti, F.; Mottet, C. Crossover Among Structural Motifs In Transition And Noble-Metal Clusters. *The Journal of Chemical Physics* 2002, 116, 3856.