

## Modelado del proceso de síntesis de nanopartículas a partir de la ecuación de coagulación de Smoluchowski

Bietti Managó, Bianca; Soule, Ezequiel Rodolfo; Cristian, Balbuena

INTEMA - Instituto de Investigaciones en Ciencia y Tecnología de Materiales, Mar del Plata, Argentina  
Universidad Nacional de Mar del Plata, Mar del Plata, Argentina

biancabiettimanago@gmail.com

Área temática: A. Síntesis de nanomateriales

La síntesis controlada de nanopartículas metálicas constituye un desafío fundamental en la nanotecnología, donde la distribución final de tamaños depende de una compleja interacción de fenómenos cinéticos elementales. En este contexto, la simulación computacional representa una herramienta que permite aislar, analizar y cuantificar la contribución relativa de los distintos mecanismos que gobiernan la evolución del sistema, aportando información difícil de obtener únicamente a partir de observaciones experimentales.

En este trabajo, se presenta un modelo descriptivo de balance de población que integra explícitamente tres procesos físicos competitivos, la reducción química del precursor, la difusión espacial en el medio y la cinética de reacción en la superficie de los agregados<sup>1</sup>. La magnitud relativa de estos mecanismos resulta determinante en la evolución del sistema y en la nanoestructura final obtenida. Este enfoque permite representar la síntesis desde la nucleación primaria hasta la formación de partículas de mayor tamaño. Para la implementación computacional, se desarrolló un algoritmo de malla híbrida lineal-logarítmica que optimiza la resolución numérica de la ecuación de Smoluchowski agrupando partículas en pseudo-especies<sup>2</sup>. Este esquema computacional permite abordar rangos de tamaño mayores a un menor costo computacional.

El modelo contempla la cinética de la formación de nanopartículas a partir de la ecuación de coagulación de Smoluchowski<sup>3</sup>, e incorpora las principales resistencias del sistema mediante la representación de los fenómenos involucrados. En particular, la difusión se modeló a partir de la relación de Stokes-Einstein, la reacción superficial se fundamenta en la teoría de colisiones con dependencia del área superficial y la reducción del precursor se representa mediante una ley cinética de primer orden.

A partir de esto, se realizó un análisis y estudio de los efectos de la variación de los parámetros sobre el crecimiento del sistema. Este análisis permite identificar regímenes dominantes y establecer relaciones entre la competencia de los procesos elementales y la evolución de la distribución de tamaños, constituyendo una base para la futura interpretación y optimización de estrategias de síntesis controlada.

### REFERENCIAS

1. Handwerk, D. R.; Shipman, P. D.; Whitehead, C. B.; Özkar, S.; Finke, R. G. J. *Am. Chem. Soc.* 141 (2019) 15827–15839.
2. Lee, M. H. *Icarus* 143 (2000) 74-86.
3. Ramkrishna, D. *Population Balances. Theory and Applications to Particulate Systems*, Academic Press (2015).