

## Caracterización de Nanosistemas mediante TEM: Desafíos y Modelización de la Coalescencia en Nanopartículas de Oro

Fanjul, Cristian<sup>1,2</sup>; Azcarate, Julio Cesar<sup>2,3</sup>; Zelaya, Eugenia<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, Bariloche, Argentina

<sup>2</sup> Centro Atómico Bariloche - CNEA, Bariloche, Argentina.

<sup>3</sup> CONICET, Bariloche, Argentina.

euge.zelaya@gmail.com

Área temática: C. Propiedades de nanomateriales

La microscopía electrónica de transmisión (TEM) se ha consolidado como una herramienta fundamental e indispensable en el ámbito de la nanotecnología para la caracterización cristalográfica y morfológica de diversos nanosistemas. No obstante, la potencia de esta técnica conlleva un desafío importante: el haz de electrones puede alterar de forma irreversible la morfología o la estructura cristalina original de los sistemas en estudio. Dentro de estos efectos inducidos por el haz, se ha reportado con frecuencia el fenómeno de la coalescencia de nanopartículas (Nps) de oro. Este comportamiento ha sido observado y documentado tanto en microscopía de transmisión convencional (TEM) como en su modalidad de barrido (STEM), abarcando una amplia variedad de soportes y medios [1-3]. Un aspecto crítico de este fenómeno es su dependencia con la escala: la coalescencia se manifiesta de forma predominante en nanopartículas de oro con diámetros del orden de los 3 nm, mientras que tiende a desaparecer o ser insignificante en partículas de mayores dimensiones. A pesar de que existe consenso en que las nanopartículas de oro "desnudas" (sin ligandos protectores) coalescen en diversos entornos —desde el alto vacío hasta medios acuosos— siguiendo un comportamiento estadístico similar en términos de trayectoria y tiempo, la literatura científica actual presenta un vacío notable en cuanto a la modelización física rigurosa de este proceso dinámico.

El presente trabajo se propone cerrar dicha brecha mediante la discusión de dos ejes centrales para la correcta parametrización de las curvas estadísticas que describen la distancia inter-partícula en función del tiempo. En primera instancia, se explora un modelo basado en física clásica, específicamente utilizando el método de imágenes. Este enfoque, a pesar de su relativa sencillez, demuestra una concordancia notable con los datos experimentales obtenidos para partículas de 3 nm de diámetro y, fundamentalmente, ofrece una explicación física coherente sobre por qué este efecto se inhibe al aumentar el tamaño de las Nps. En segunda instancia, se somete a prueba la robustez y validez de dicho modelo. Se analiza con detenimiento su factibilidad ante variaciones en el medio dieléctrico circundante y se discute la viabilidad del estado de carga eléctrica que el modelo presupone.

### REFERENCIAS

1. Azcárate J.C; Fonticelli M.H; Zelaya E. *J. Phys. Chem. C* 121 (2017) 26108 - 26116
2. Zhu C; Liang S; Song E; Zhou Y; Wangand Y; Shan F; Shi Y; Hao C; Yin K; Zhang T; Liu J; Zheng H; Sun L. *Nature Comm.* 9 (2018) 421
3. Gutiérrez-Wing C; Olmos-Asar J. A.; Esparza, R; Mariscal, M. M; Yacamán M. J; *Electrochim. Acta* 101 (2013) 301–307