



Universidad Nacional Mayor de San Marcos

Universidad del Perú. Decana de América

Facultad de Ciencias Físicas

Unidad de Posgrado

**Influencia del desorden sobre la estructura atómica y
las propiedades electrónicas de nano-partículas mono-
metálicas de Cu y Ag**

TESIS

Para optar el Grado Académico de Magíster en Física con
mención en Física del Estado Sólido

AUTOR

Leonardo Rafael MEDRANO SANDONAS

ASESOR

Carlos Vladimir LANDAURO SÁENZ

Lima, Perú

2012

Resumen

En el presente trabajo se estudia la influencia del desorden químico y estructural sobre la estructura atómica y las propiedades electrónicas de un conjunto de nano-partículas mono-metálicas de plata y cobre con un número de átomos constituyentes especiales (números mágicos icosaedrales) que varía de 13 a 5083 átomos. Las nano-partículas son formadas mediante simulaciones de dinámica molecular usando un potencial de Johnson, basado en el método del átomo incrustado, para el cobre y un potencial *tight-binding* para la plata. Además, se estudia el efecto del desorden químico en las nano-partículas haciendo variar la energía de sitio del Hamiltoniano electrónico tipo *tight-binding* según una distribución uniforme. El desorden estructural fue producido aumentando la velocidad de enfriamiento durante el proceso de formación de la nano-partícula.

Los resultados muestran que las nano-partículas mono-metálicas de plata y cobre pasan de tener un carácter metálico a uno aislante a medida que aumenta el grado de desorden químico. Asimismo, de manera similar que en los sistemas tri-dimensionales, se encontró un grado de desorden crítico que evidencia la existencia de la transición de Anderson en estos sistemas. Sin embargo, la magnitud de este grado de desorden crítico es diferente del correspondiente al modelo tri-dimensional de Anderson y al de una red cuasiperiódica (modelo de Amman-Kramer), lo cual evidencia una dependencia de la estructura atómica. Por otro lado, se obtuvo que la velocidad de enfriamiento afecta considerablemente a las propiedades estructurales pero no a las electrónicas de las nano-partículas. Mediante la implementación de un método alternativo al usado de manera estándar (diagrama Tiempo-Temperatura-Transformación) se determinaron las velocidades de enfriamiento críticas para las nano-partículas de plata y cobre, cuyas magnitudes son cercanas a los valores que corresponden a microestructuras de estos elementos.

Abstract

In the present work I study the influence of chemical and structural disorder on the atomic structure and electronic properties of a set of silver and copper monometallic nanoparticles, which contain a special number of atoms (icosahedral magic numbers) ranging from 13 to 5083. These nanoparticles were obtained by molecular dynamics simulations using a Johnson potential, based on the embedded atom method, for copper and a tight-binding potential for silver. Moreover, the influence of chemical disorder on the nanoparticles is studied by modifying the on-site energy of the tight-binding electronic Hamiltonian considering a box-like distribution. Structural disorder was produced by increasing the cooling rate during the preparation process of the nanoparticles.

The results indicate that silver and copper mono-metallic nanoparticles change their electronic character, from metallic to insulating, after increasing the strength of the chemical disorder. Besides, similar to three-dimensional systems, I found a critical strength of disorder that evidences the existence of the Anderson transition in these systems. However, the magnitude of this critical disorder is different from the corresponding to the three-dimensional Anderson model, and a quasiperiodic lattice (Amman-Kramer model). Thus, there is a dependence of this critical parameter on the atomic structure. On the other hand, it was found that the cooling rate strongly affects the atomic structures but not the electronic properties of the nanoparticles. In this work it has also been implemented an alternative method to the standard one (time-temperature-transformation diagram, TTT-diagram), to determine the critical cooling rate of silver and copper nanoparticles. The magnitudes of this critical parameter for these nanoparticles are close to the values corresponding to microstructures of these elements.