

Nombre del Curso: Nanomateriales

Categoría: Curso Específico para Maestría y Doctorado en Ciencias Químicas. Curso Específico Electivo para el Doctorado en Ciencia de Materiales (ya aprobado).

Directores: Dra. Noelia Bajales Luna (FAMAF, UNC), Dr. Omar E. Linarez Pérez (FCQ, UNC).

Profesores colaboradores: Dra. Gabriela Lacconi (FCQ, UNC), Dra. Mariana Rojas (FCQ, UNC), Dra. Valeria Fuertes (FCQ, UNC), Dra. Diana Arciniegas Jaimes (FCQ, UNC), Dra. Lucrecia Carot (INFIQC-CONICET) y Dr. Martín Broens (FCQ, UNC).

Profesores invitados para seminarios: Dr. Juan Escrig Murua (USACH), Dr. Eduardo Saavedra Díaz (USACH).

Período: 15 de agosto al 4 de noviembre de 2022

Carga horaria: 42 horas teórica-prácticas (3,5 h semanales durante 12 semanas).

Modalidad: virtual.

El presente curso tiene como objetivo familiarizar a los estudiantes con los diferentes tipos de nanomateriales descubiertos en los últimos tiempos, haciendo hincapié en las propiedades físicas y químicas que dependen del tamaño de los mismos. Se introducirán los principales métodos de síntesis y caracterización de materiales en la nanoescala. La impronta del curso es dar un fuerte contenido de los fundamentos, y posteriormente aplicarlos a problemas concretos. El curso también incluirá una revisión de las principales aplicaciones en sectores tecnológicos, de salud y medioambiente.

Objetivos:

- Impartir conocimientos sobre métodos de síntesis y propiedades de materiales en la nanoescala: materiales carbonosos, nanoestructuras metálicas, óxidos nanoestructurados, materiales compósitos.
- Introducir conceptos básicos de simulaciones atomísticas de primeros principios (DFT, Monte Carlo y Dinámica Molecular) para el estudio de sistemas autoensamblados y reacciones químicas superficiales, y de simulaciones micromagnéticas para el estudio de nanomateriales magnéticos.
- Presentar los fundamentos sobre técnicas de caracterización aplicadas a sistemas nanoscópicos, con ejemplos integradores transversales: Teoría-Simulación-Experimento, Métodos de análisis para Nano-materiales (DRX, Raman, STM, SEM, TEM, STEM, AFM, VSM).
- Resolver y exponer los trabajos prácticos propuestos por los docentes del curso.

PROGRAMA DEL CURSO:

Módulo 1: *Introducción a la Nanociencia y Nanotecnología.* (1 clase).

Dra. Noelia Bajales Luna, Dr. Omar E. Linarez Pérez

Generalidades. Métodos de síntesis bottom-up/top-down. Propiedades en la nanoescala: ópticas, mecánicas, térmicas, magnéticas, catalíticas, eléctricas. Análisis de bibliografía.

Módulo 2: *Métodos de estudio teóricos y simulaciones.* (2 clases)

Simulaciones atomísticas de primeros principios: formalismo de la Teoría del Funcional de la Densidad Electrónica (DFT) y DFT dependiente del tiempo. Modelos de simulaciones clásicas aplicados para sistemas nanoestructurados o películas autoensambladas: método de Monte Carlo canónico, micro-canónico y gran canónico. Métodos de modelado de reacciones químicas en sistemas nanoestructurados mediante Monte Carlo Cinético y Dinámica Molecular. **Dra. Mariana Rojas**

Conceptos fundamentales del magnetismo y micromagnetismo. Curvas de histéresis y modos de reversión de la magnetización. Simulaciones micromagnéticas usando el software Object Oriented Micro Magnetic Framework (OOMMF). Ejemplos de aplicación para el estudio de propiedades magnéticas dependientes de la geometría, el tamaño y la composición para nanoestructuras cilíndricas unidimensionales. **Dra. Diana Arciniegas Jaimes**

Módulo 3: *Caracterización de nanomateriales.* (3 clases)

Difracción de rayos X: Fundamentos de la Cristalografía, estructura cristalina, redes de Bravais, simetrías en los sólidos cristalinos, planos cristalinos, distancias interplanares, ley de Bragg, factor de estructura. Difracción de rayos X de monocristales y polvos. Difracción de electrones y neutrones. Dispositivos experimentales. Introducción al método de Rietveld para refinamiento de estructura cristalina, análisis cuantitativo. Ejemplos en materiales masivos y nanométricos. Difractogramas característicos de los distintos alótropos del carbono y nanoestructuras magnéticas. **Dra. Valeria Fuertes**

Espectroscopía y Microscopía Raman: Conceptos generales. Dispersión Raman Stokes y anti-Stokes. Resolución lateral y de profundidad. Espectroscopia SERS. **Dra. Gabriela Lacconi**

Microscopías electrónicas aplicadas a nanomateriales (SEM, TEM, STEM). **Dr. Omar E. Linarez Pérez**

Microscopía de Sonda de Barrido (SPM): Conceptos generales. Microscopía de Fuerza atómica (AFM). Modos de operación: contacto, intermitente y no-contacto. Resolución espacial y temporal. Dispositivos experimentales: sistema de detección, sensores de fuerza. Microscopía de efecto túnel. Ventajas y limitaciones. Análisis de imágenes de sistemas basados en el carbono y nanoestructuras. Ejercicios. **Dra. Lucrecia Carot**

Magnetometría de muestra vibrante (VSM). Conceptos generales. Sensibilidad. Configuración experimental. Microscopía de Fuerza Magnética. Ventajas y limitaciones. Análisis de ejemplos. **Dra. Noelia Bajales Luna**

Módulo 4: *Nanomateriales basados en carbono. (2 clases)*

Dra. Noelia Bajales Luna

Hibridación sp , sp^2 y sp^3 . Enlaces. Formas alotrópicas del carbono y sus óxidos. Dimensionalidad. Defectos cristalinos. Rol del Hidrógeno en las propiedades del carbono. Citotoxicidad y biocompatibilidad. Nanociencia y Nanotecnología del carbono. Ejercicios. Óxido de grafeno y óxido de grafeno reducido: propiedades generales. Métodos de obtención y producción. Ventajas y desventajas de los distintos métodos. Terminaciones de borde: zig-zag y armchair. Rol de defectos. Dispersiones y composites de óxido de grafeno. Aplicaciones. Ejercicios. Clasificación de fullerenos. HOMO y LUMO, rol de defectos, polimerización. Aplicaciones. Ejercicios integrados con DRX, espectroscopía Raman y magnetometría.

Módulo 5: *Nanoestructuras metálicas. (2 clases)*

Dr. Omar E. Linarez Pérez, Dr. Martín Broens

Nanopartículas metálicas y aleaciones. Propiedades ópticas y magnéticas. Superficies metálicas modificadas (ensamblados moleculares y capa por capa). Materiales híbridos y compósitos. Plataformas 2D y 3D con actividad SERS. Ejemplos de aplicación.

Módulo 6: *Óxidos nanoestructurados. (2 clases)*

Dr. Omar E. Linarez Pérez, Dr. Martín Broens

Generalidades. Membranas porosas de óxido de aluminio: uso como moldes en la síntesis de diversos nanomateriales (nanohilos, nanotubos, películas delgadas). Formación y propiedades de arreglos de nanotubos de TiO_2 por anodización electroquímica. Aplicaciones como sensores de gases, descomposición fotoelectroquímica de agua, celdas solares, usos biológicos. Ejemplos de otros óxidos metálicos.

Seminarios de profesores invitados (2 h cada uno)

- *Aplicaciones Ambientales De Nanoestructuras Magnéticas*. Dr. Juan Escrig Murua (USACH).
- *Simulaciones micromagnéticas y aplicaciones de la Resonancia Ferromagnética (FMR) al estudio de nanoestructuras*. Dr. Eduardo Saavedra Díaz (USACH).

Bibliografía

- 1.1) Nanomaterials synthesis. Design, fabrication and applications, Y. Beeran Pottathara, S. Thomas, N. Karlarikkal, Y. Grohens, V. Kokol, Elsevier, 2020.
- 1.2) Introduction to nano: basics to nanoscience and nanotechnology, A. Sengupta, C. K. Sarkar, Springer, 2015.
- 2.1) Electronic Structure. Basic theory and practical methods. Richard M. Martin, Cambridge University Press, 2004.
- 2.2) Computer Simulations of Liquids. Allen & Tildesley. (Clarendon Press, Oxford 1987)
- 2.3) Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. D. Frenkel y B. Smith, (Academic Press Limited, San Diego, CA, 1996).
- 2.4) Molecular Dynamics Simulation – Elementary methods. - Wiley - J. M. Haile, (Wiley Press. New York 1997).
- 3.1) Modern Raman Spectroscopy – A Practical Approach. Ewen Smith, Geoffrey Dent. John Wiley & Sons Ltd, 2005, England.
- 3.2) Characterization challenges for nanomaterials D. R. Baer, J. E. Amonette, M. H. Engelhard, D. J. Gaspar, A. S. Karakoti, S. Kuchibhatla, P. Nachimuthu, J. T. Nurmi, Y. Qiang, V. Sarathy, S. Seal, A. Sharma, P. G. Tratnyek and C.-M. Wang. Surf. Interface Anal. 2008; 40: 529–537
- 3.3) Characterization techniques for nanoparticles: comparison and complementarity upon studying nanoparticle properties, S. Mourdikoudis, R. M. Pallares, N. T. K. Thanh, Nanoscale, 2018, 10, 12871.
- 3.4) Raman Spectroscopy in Graphene Related Systems. Ado Jorio, Riichiro Saito, Gene Dresselhaus, and Mildred S. Dresselhaus. 2011 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co.
- 4.1) M. S. Dresselhaus, A. Jorio, M. Hofmann, G. Dresselhaus, R. Saito, Perspectives on Carbon Nanotubes and Graphene Raman Spectroscopy. Nano Lett. 2010, 10, 751–758. DOI: 10.1021/nl904286r
- 4.2) Probing Layer Number and Stacking Order of Few-Layer Graphene by Raman Spectroscopy. Yufeng Hao, Yingying Wang et. all. Small 2010, 6, 195–200.
- 4.3) Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis, J. Goldstein, D. Newbury, J. Michael, N. Ritchie, J. Scott, D. Joy, 4th ed., Springer, 2018.
- 4.4) Scanning Probe Microscopy, B. Voigtländer, Springer, 2015.
- 4.5) Scanning probe microscopy, K. Bian, C. Gerber, A. J. Heinrich, D. J. Müller, S. Scheuring, Y. Jian, Nature Reviews 1, 2021, 36.
- 4.6) Introduction to Magnetic Materials, B. D. Cullity y C. D. Graham, Wiley, 2011, ISBN: 9781118211496
- 5.1) Review of supported metal nanoparticles: synthesis methodologies, advantages and application as catalysts, M. J. Ndolomingo, N. Bingwa, R. Meijboom, J. Mat. Sci. 55 (2020) 6195.

- 5.2) Current Strategies for noble metal nanoparticle synthesis, G. Habibullah, J. Viktorova, T. Ruml, *Nanoscale Res. Letters* 16 (2021) 47.
- 5.3) Optical properties of metallic nanoparticles: Basic principles and simulation, A. Trügler, Springer, 2018.
- 5.4) Recent advances in metal decorated nanomaterials and their various biological applications: A review. A. A. Yaqoob, H. Ahmad, T. Parveen, A. Ahmad, M. et al, *Front. Chem.* 2020, 341.
- 6.1) M. I. Broens, W. Ramos Cervantes, A. M. Asenjo Collao, D. P. Oyarzun, M. López Teijelo, O. E. Linarez Pérez, "*Nanostructured semiconducting oxide films*", Capítulo 3 en "*Nanostructured Multifunctional Materials. Synthesis, characterization, applications and computational simulation*". Ed: E. A. Franceschini. CRC Press, 2021.
- 6.2) P. Roy, S. Berger, P. Schmuki, TiO₂ Nanotubes: Synthesis and Applications, *Angew. Chem. Int. Ed.* 50 (2011) 2904.
- 6.3) W. Lee, S.-J. Park, Porous anodic aluminum oxide: Anodization and templated synthesis of functional nanostructures, *Chem. Revs.* 114 (2014) 7487-7556.
- 6.4) C. A. Grimes, G. K. Mor, TiO₂ nanotube arrays. Synthesis, properties and applications, Springer, 2009.
- 6.5) Diana M. Arciniegas Jaimes, Paulina Márquez, Juan Escrig, Omar Linarez Pérez and Noelia Bajales, Comparative analysis of the electrochemical performance obtained for magnetic graphene oxide-based composites, *Mater. Lett.* 290, 2021, 129473.
- 6.6) D. M. Arciniegas Jaimes, S. Raviolo, J. M. Carballo, N. Bajales, J. Escrig, Wave reversion mode stability as a function of diameter and wall thickness for permalloy and nickel nanotubes, *J. Magn. Mater.* 523, 2021, 167578.
- 6.7) D. M. Arciniegas Jaimes, P. Márquez, A. Ovalle, J. Escrig, O. Linarez Pérez, N. Bajales, Multifunctional Permalloy nanowires/graphene oxide composite with enhanced conductive properties, *Scientific Reports* 10, 2020, 13742.
- 6.8) Raviolo, D. M. Arciniegas Jaimes, N. Bajales, J. Escrig, Wave reversal mode: a new magnetization reversal mechanism in magnetic nanotubes, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 497, 2020, 165944.

Otro material bibliográfico de reciente publicación será indicado por los docentes de cada módulo.