

**PROPIEDADES TERMODINÁMICAS Y ÓPTICAS DE AUTOENSAMBLADOS  
COLUMNARES DE SUPERELIPSES METÁLICAS**

Missoni, Leandro Luis<sup>1,2\*</sup>, Ortiz, Guillermo P.<sup>3</sup>, Martínez Ricci, M. L.<sup>1</sup>,  
Tagliazucchi, Mario E.<sup>1,2</sup>

1. Instituto de Química Física de los Materiales, Medio Ambiente y Energía, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, CONICET, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina.

2. Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina.

3. Grupo de Electromagnetismo Aplicado, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y Agrimensura, Universidad Nacional del Nordeste, Corrientes, Corrientes, Argentina.

\* missoni@qi.fcen.uba.ar

### Introducción

Los nanomateriales autoensamblados han surgido en las últimas décadas como una alternativa importante para la síntesis de materiales con propiedades ópticas novedosas. En particular, los materiales híbridos metal/dieléctrico poseen la capacidad de localizar energía mediante su interacción con luz, lo que los vuelve de vital interés para diversas aplicaciones. En este trabajo, se estudian las propiedades de estabilidad y propiedades ópticas de materiales compuestos metal/dieléctrico mediante 2 técnicas de simulación.

### Resultados

Se estudiaron las propiedades de estabilidad termodinámica de arreglos columnares de nanoestructuras recubiertas de ligandos de sección superelipsoidal, es decir, que cumplen con la parametrización:

$$|x/a|^p + |y/b|^p = 1$$

Con  $a, b > 0$ . Se utilizó una teoría molecular (*MOLT*)<sup>1</sup> para describir los ligandos anclados en la superficie de cada columna y el solvente que las rodea. Se modelaron distintos arreglos geométricos, con el fin de realizar diagramas de estabilidad morfológica de estas nanoestructuras.

Por otra parte, se estudiaron las propiedades ópticas emergentes de las nanoestructuras, mediante el uso de métodos de homogeneización electromagnética basados en el método recursivo de Haydock.<sup>2</sup> Así, se logró caracterizar las regiones de comportamiento metálico, dieléctrico y de índice cercano a cero (región *ENZ*) de diversas estructuras, para establecer los usos potenciales de estos materiales en la confección de estructuras fotónicas.

### Conclusiones

Se utilizaron 2 métodos de simulación (*MOLT* y método de Haydock) para estudiar y caracterizar arreglos columnares de nanopartículas de sección superelipsoidal, logrando así obtener diagramas de estabilidad morfológica y propiedades ópticas, en función de los parámetros geométricos que describen dichos sistemas.

### Referencias

- 1) Zaldivar, G. *et al.*, *ACS omega*, **2022**, 7, 43, 38109–38121.
- 2) Mochán, W. L. *et al.*, *physica status solidi (b)*, **2020**, 257(5), 1900560.