



## Estudio de la cinética de formación de nanopartículas de ZnO en dispersión coloidal.

L. Nolasco-Hernández<sup>1</sup> y G. Rodríguez Gattorno<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada del Instituto Politécnico Nacional, Legaria 694. Colonia Irrigación, 11500 México D. F.

### Resumen

En el presente trabajo se estudian las primeras etapas relacionadas a la formación de nanopartículas de ZnO obtenidas por la aproximación coloidal. Se presentan resultados preliminares de la simulación de algunos procesos que pueden estar asociados a la cinética de reacción del sistema  $ZnCl_2 \cdot 2H_2O$  en presencia de NaOH a su vez corroborados por los resultados teóricos obtenidos de la aplicación de metodologías de Dinámica Molecular Cuántica (DMC) que incluyen el efecto de la temperatura y del solvente en un sistema periódico. Para estimar los posibles precursores que participan en los procesos de nucleación se aplican diferentes metodologías de cálculo teórico cuántico a nivel ab-initio.

### Introducción

Dentro de la revolución tecnológica de los últimos años los semiconductores nanoestructurados exhiben una gran variedad de aplicaciones potenciales interesantes. En ellos se espera encontrar varias de las respuestas dentro de las investigaciones que abordan problemas tales como la creciente escasez de combustibles fósiles, ó problemas como el impacto ambiental global. Semiconductores como el ZnO se aplican hoy en día de forma cotidiana. La aproximación coloidal constituye una de las vías principales de preparación del ZnO y de muchos otros nanomateriales, sin embargo resulta interesante el hecho de que se conoce bastante poco acerca de los mecanismos involucrados en este método de síntesis. Para disponer de un control adecuado de las propiedades físico-químicas de los nanomateriales es necesario tener control sobre el tamaño de partícula en sus metodologías de síntesis. Esto presupone tener dominio en los procesos de formación de precursores y la posterior nucleación del material deseado. La clave para la comprensión de auto-organización iónica en solución y su interacción con el solvente apunta a la escala molecular. Para tales investigaciones, técnicas de simulación moleculares han sido probadas para ser una herramienta útil en las etapas iniciales de la formación de precursores y su posterior nucleación.

### Procedimiento Experimental

Para la síntesis de nanopartículas de ZnO se utilizarán básicamente dos metodologías que son la hidrólisis forzada y la auto-hidrólisis de carboxilatos. Ambos procesos serán estudiados en medios orgánicos. La evolución de las reacciones asociadas a los procesos de interés será estudiada

mediando los espectros de absorción electrónica en el tiempo.

Los cálculos teóricos han sido realizados con el código computacional DMol3. [1,2] Este código incluye los métodos de Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT, por sus siglas en inglés), usando las bases de DND. La energía de intercambio y correlación es calculada por el método de Perdew-Burke Ernzerhof (PBE). [3]

### Resultados y Análisis

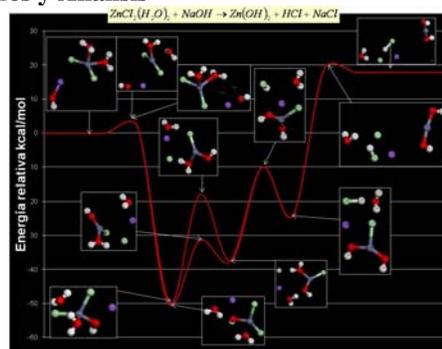


Fig. 5 Resultados teóricos de la cinética de reacción de hidrólisis forzada del  $ZnCl_2$  hidratado.

En la Fig. 5 se muestran resultados preliminares de la simulación de algunos procesos que pueden estar asociados a la cinética de reacción del sistema  $ZnCl_2 \cdot 2H_2O$  en presencia de NaOH en el vacío. Los resultados indican que la hidrólisis se inicia con el ataque nucleofílico del grupo  $OH^-$  al  $Zn^{2+}$  con una energía mayor de reacción que la que presenta una reacción por sustitución del un hidrogeno de una de sus moléculas de agua de hidratación. Estos resultados son corroborados con DMC bajo las condiciones termodinámicas de número de moles, volumen y temperatura (298.15 K) constante (NVT). Los sistemas son puestos en una celda cúbica periódica lo suficientemente grande para simular un líquido en solución.

Estos resultados entre otros parámetros que se derivan de los cálculos servirán de base para explicar los procesos involucrados en las primeras etapas de la formación de nanopartículas de ZnO.

### Agradecimientos

Al posgrado (SIP) del Instituto Politécnico Nacional (IPN) por su apoyo a este trabajo.

### Referencias

- [1] B. Delley, *J. Chem. Phys.* **92**, 508 (1990),
- [2] B. Delley, *J. Chem. Phys.* **113**, 7756 (2000).
- [3] Perdew, J.P., Burke, K., and Ernzerhof, M., *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).