



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

L. Nolasco-Hernández¹ y G. Rodríguez Gattorno¹

¹ 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. El estudio aborda la evolución de los espectros de absorción electrónica en función del tiempo durante la nucleación del material en solución. Los resultados experimentales serán comparados con 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 el 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 la los semiconductores nanoestructurados juegan un papel decisivo. 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.

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 y de ser necesario se utilizarán modificadores de superficie cuando el caso así lo exija. La evolución de las reacciones asociadas a los procesos de interés serán estudiadas midiendo los espectros de absorción electrónica en el tiempo.

Los cálculos son realizados con el código computacional CASTEP. [1] Este código incluye los métodos de Teoría de funcionales de la Densidad (DFT, por sus siglas en ingles), usando las bases de pseudopotenciales de ondas planas de Vanderbilt ultrasuaves. La energía de intercambio y correlación es calculada por el método de Perdew-Burke Ernzerhof (PBE). Los sistemas son puestos en una celda cúbica periódica lo suficientemente grande para simular un líquido en solución.

Resultados y Análisis

La tabla 1 muestra algunos resultados preliminares de distancias interatómicas de los cálculos teóricos comparadas con resultados experimentales.

Tabla 1. Distancias entre átomos en ángstrom

Especie	enlace	Longitud enlace (Å)	
		Calculado Cuántico Periódico	DMC a 298 ^o K experimental
ZnCl ₂	Zn-Cl	2.10	2.07 ^c
[ZnCl ₂ (H ₂ O) ₂]	Zn-Cl	2.19	
	Zn-O	2.20	
[ZnCl(H ₂ O) ₃] ⁺	Zn-Cl	2.05	2.4 ^a
	Zn-O	2.18	1.97 ^a
	ZnCl	2.39	2.24 ^d
[ZnCl(H ₂ O) ₅] ⁺	Zn-O	2.07, 2.12, 2.14, 2.19	2.07 ^d
	ZnCl	2.18	2.23
[ZnOHCl(H ₂ O) ₃]	Zn-O(OH)	1.88	1.87
	Zn-O	2.08	2.04
	Zn-O(OH)	1.93	1.87
[ZnOH(H ₂ O) ₃] ⁺	Zn-O	2.01	2.00

^a en agua. ^b sin solvente. ^c referencia 2. ^d referencia 3.

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

Agradecemos al Programa Institucional de Formación de Investigadores (PIFI) y a la Secretaria de Investigación y Posgrado (SIP) del Instituto Politécnico Nacional (IPN) por su apoyo a este trabajo.

Referencias

- [1] Payne, M. C.; Teter, M. P.; Allan, D. C.; Arias, T. A.; Joannopoulos, J. D. *Rev. Mod. Phys.*, **64**, 1045-1097 (1992).
- [2] Paschina, G.; Piccaluga, G.; Pinna, G.; Magini, M. *J. Chem. Phys.*, **78**, 5745 (1983).
- [3] Hargittai, M.; Tremmel, J.; Hargittai, I. *Inorg. Chem.*, **25**, 3163 (1986).