

Jueves 12 de junio 10 hs.

Aula Fernández Prini INQUIMAE-DQIAQF

Ciudad Universitaria Pab. II, 3º Piso

**Modelado del autoensamblado, estructura y propiedades ópticas de
superestructuras en la Nanoescala**

Tesis doctoral

LEANDRO LUIS MISSONI

Director: Dr. Mario Tagliazucchi

Co-Directora: Dra. Luz Martínez Ricci

Consejero de Estudios: Dr. Ricardo Martín Negri

Jurados: Dr. Damián Scherlis - Prof. Asoc., DQIAQF, FCEN, UBA - Inv. Princ., INQUIMAE, CONICET, Dr. Mario Del Popolo - Prof. Tit., UNCUYO - Inv. Princ., ICB, UNCUYO, CONICET y Dra. Diana Skigin - Prof. Asoc., DF, FCEN, UBA - Inv. Indep., IFIBA, CONICET

Resumen

Los supercristales de nanopartículas (SCNPs), materiales formados por nanopartículas que se autoensamblan para formar sistemas periódicos en dos o tres dimensiones forman parte del conjunto de nuevos materiales que se estudian en la escala nanoscópica con potenciales respuestas ópticas únicas. La termodinámica del autoensamblado juega un rol fundamental en la síntesis de SCNPs. En esta tesis, se utilizó una Teoría Molecular (MOLT, por sus siglas en inglés) para estudiar la estabilidad termodinámica relativa y estructura interna de SCNPs. Con este fin, se avanzó en el desarrollo de una nueva implementación de MOLT que permite el estudio de sistemas compresibles, lo cual permite el estudio de SCNPs en su etapa final de cristalización. En vistas a las posibles aplicaciones de estos materiales en fotónica, se estudiaron las propiedades ópticas de SCNPs metal-dieléctrico bidimensionales. Así, se empleó un método de homogeneización del índice de refracción (implementado en el software libre *Photonic*) capaz de utilizar la estructura obtenida mediante MOLT como parámetros de entrada para obtener la función dieléctrica macroscópica del sistema. Finalmente, se estudió la respuesta óptica de estructuras fotónicas unidimensionales acopladas a películas delgadas de SCNPs capaces de generar modos localizados Tamm, evaluando su capacidad como posibles sensores de cambio de índice de refracción y concentradores de energía lumínica en regiones sub-longitud de onda.