

# LUZ Y CALOR EN LA NANOESCALA: FENÓMENOS ÓPTICOS Y TÉRMICOS CON NANOPARTÍCULAS DE ORO

A. Sánchez<sup>1</sup>, I. Ojea<sup>2</sup>, P. Lloret<sup>1</sup>, G. Ybarra<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>INTI-Procesos Superficiales, <sup>2</sup>DM, FCEN, UBA  
dsanchez@inti.gob.ar

## OBJETIVO

El objetivo general de este trabajo estudiar procesos que involucran fenómenos ópticos y térmicos en la nanoescala. En particular, se busca producir un aumento de temperatura local en un entorno nanométrico del fluido circundante a una nanopartícula mediante una excitación óptica de una longitud de onda. El control de estos procesos a escala nanométrica encuentra aplicaciones en diagnóstico médico y terapéutica.

Desde el punto de vista experimental, se busca sintetizar y caracterizar nanopartículas con una frecuencia de resonancia plasmónica en el infrarrojo cercano, de alrededor de 880 nm. Adicionalmente, interesa conocer el perfil de temperatura generado por las nanopartículas en el medio circundante al recibir la potencia de una fuente láser de excitación. Este perfil se obtuvo mediante modelos teóricos y simulaciones computacionales.

## DESCRIPCIÓN

Al excitar a las nanopartículas con láseres a las frecuencias de resonancia plasmónica de las nanopartículas se produce un proceso de calentamiento por efecto Joule. Este calentamiento se propaga hacia el medio (acuoso u otro) mediante el proceso de difusión térmica. Uno de las características más interesantes de los nanomateriales es que algunas de sus propiedades pueden ser definidas a medida de las necesidades a partir del control, durante la síntesis, de la forma y tamaño de las nanopartículas. En este trabajo se realizó una síntesis de nanopartículas de oro, más precisamente las que se conocen como nanobarras o nanorods de oro (NR), cuya forma puede pensarse como un cilindro. La síntesis de los NR se llevó a cabo en el laboratorio de Procesos Superficiales, UT Nanomateriales. La síntesis se basa en el mecanismo de crecimiento mediado por semillas, el cual consiste en la generación de una semilla a partir de la cual se inicia el crecimiento de la nanopartícula, adoptando una forma y tamaño que dependen, entre otras cosas, de las concentraciones y reactivos empleados [1]. Finalizada la síntesis, los NR quedan en suspensión en agua para su

posterior utilización. Los NR fueron caracterizados mediante espectroscopía UV-vis y microscopía electrónica de barrido (SEM). Dado que se desea estudiar la propagación del calor desde los NR hacia el medio circundante, primero es necesario saber cómo se le entrega energía a los NR y cómo estos calientan el medio circundante. Para ello se emplea un láser cuya longitud de onda corresponde a la resonancia plasmónica de la nanopartícula. La resonancia plasmónica de las nanopartículas está fuertemente relacionadas con su forma y tamaño, y con las propiedades dieléctricas del medio circundante. Al variar estos parámetros de acuerdo con las necesidades se puede sintonizar la frecuencia de resonancia plasmónica [2].

Al excitar a las nanopartículas con una fuente luminosa externa, los electrones de conducción se mueven en conjunto provocando choques internos, lo cual da lugar a un calentamiento propio del efecto Joule. La disipación es máxima cuando la longitud de onda de la fuente corresponde a la resonancia plasmónica del NR. La energía es entregada al medio circundante a través del mecanismo de difusión térmica. Para conocer cómo se propaga el calor se procedió a realizar una simulación computacional empleando el método de elementos finitos. Esta simulación consiste en resolver numéricamente la ecuación de difusión del calor:

$$\rho(\vec{r})c_v(\vec{r})\frac{\partial T(\vec{r},t)}{\partial t} = \vec{\nabla}k(\vec{r})\vec{\nabla}T(\vec{r},t) + Q(\vec{r},t)$$

donde  $\rho(r)$  representa la densidad de masa,  $c_v(r)$  el calor específico y  $k(r)$  la conductividad térmica.  $Q(r,t)$  respresenta la potencia por unidad de volumen que el NR disipa cuando es excitado con una fuente luminosa, por ejemplo un láser [3]. La energía involucrada en  $Q(r,t)$  puede calcularse al estudiar las propiedades ópticas de los NR. Esto es, conociendo las secciones eficaces de absorción, extinción y dispersión de los NR queda completamente determinada la potencia absorbida por el NR [4], y por lo tanto puede resolverse la ecuación del calor.

## RESULTADOS

En la Figura 1 se muestra una imagen SEM de los NR obtenidos. La imagen fue tomada con el microscopio del Centro INTI-Electrónica e Informática y reveló que el tamaño promedio de los NR es de 50 nm de largo por 10 nm de diámetro.

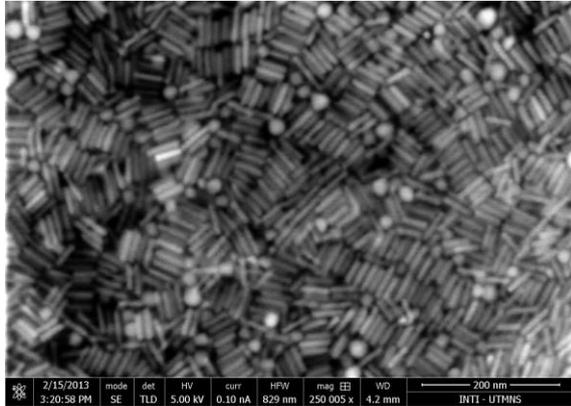


Figura 1. Imagen SEM. Puede observarse la presencia de NR de tamaño promedio 50 nm por 10 nm.

Dada su forma cilíndrica, se espera que los NR tengan dos resonancias plasmónicas: una correspondiente a la dirección transversal y otra longitudinal. Para saber dónde se ubican las longitudes de onda de la resonancia plasmónica fue necesario tomar una muestra de los NR y someterlos a un análisis UV-vis. En la Figura 2 se muestra el espectro adquirido. Puede observarse la presencia de los dos picos correspondientes a las resonancias trasversal y longitudinal de los NR en 513 nm y 880 nm, respectivamente.

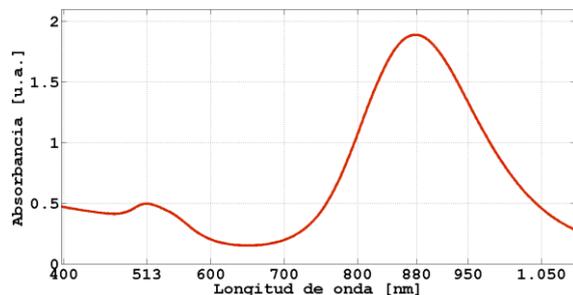


Figura 2. Espectro UV-vis de los NR. Los máximos de absorción se ubican a 513 nm y 880 nm.

Para estimar el perfil de temperaturas de los NR cuando son excitados con un fuente luminosa, se realizó una simulación computacional para una esfera del mismo material. Dado que para esta geometría la resolución es sencilla, se la utilizó solamente como una aproximación inicial al problema de

la calentamiento de entornos nanométricos mediante nanopartículas. En la figura 3 se muestra el perfil de temperaturas de la nanopartícula de 20 nm de diámetro inmersa en agua. En el centro está la nanoesfera cuyo volumen es el mismo que el de nuestros NR. Como puede observarse, la temperatura decae en forma proporcional a la inversa de la distancia, característica propia de las esferas.

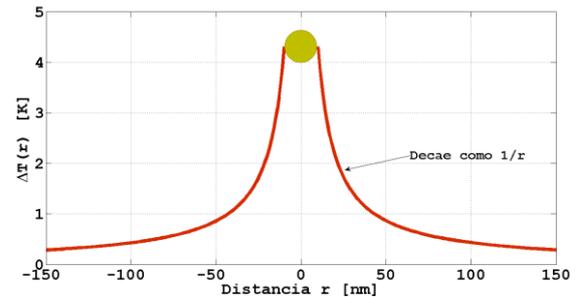


Figura 3. Perfil de temperatura generado por una nanoesfera de oro de radio 10 nm. La potencia por unidad de área entregada es de 75 kW cm<sup>-2</sup>.

## CONCLUSIONES

Se sintetizaron nanorods de oro de 10 nm de diámetro y 50 nm de altura, y una frecuencia de resonancia plasmónica en el infrarrojo cercano (880 nm), en tanto que el perfil de temperatura obtenido por excitación láser se analizó mediante simulaciones computacionales.

## REFERENCIAS

- [1] Ye et al. *Improved size-tunable synthesis of monodisperse gold nanorods through the use of aromatic additives*. ACS Nano, 2012, 6, 2804–2817.
- [2] Kreibitz, U.; Vollmer, M. *Optical Properties of Metal Clusters*; Springer: New York, 1995.
- [3] A. O. Govorov and H. H. Richardson. *Generating heat with nanoparticles*. Nano Today, 2007, 2, 30–38.
- [4] Jain, P. K.; Lee, K. S.; El-Sayed, I. H.; El-Sayed, M. A. *Calculated Absorption and Scattering Properties of Gold Nanoparticles of Different Size, Shape, and Composition: Applications in Biological Imaging and Biomedicine*. J. Phys. Chem. B 2006, 110, 7238–7248.