

Cómo obtener materiales ordenados utilizando coloides anisótropos

Eva G. Noya^a, Chak Wong^b, Pablo Llombart^a, Jonathan Doye^b

^a*Instituto de Química-Física Blas Cabrera, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Calle Serrano 119, Madrid*

^b*Physical and Theoretical Chemistry Laboratory, Department of Chemistry, University of Oxford, South Parks Road, Oxford OX1 3QZ, Reino Unido*

E-mail: eva.noya@iqf.csic.es

Palabras clave: simulación, coloides, diagramas de fase, estructura, cuasi-cristales.

Los avances experimentales de los últimos años en la síntesis de coloides y nanopartículas, que permiten un elevado control sobre la forma e interacciones de estas partículas [1,2], han abierto una vía para el diseño de nuevos materiales con propiedades “a la carta”. Pero para aprovechar todo el potencial de este enfoque es necesario descifrar la relación entre la anisotropía de las partículas y las estructuras ordenadas que éstas pueden formar.

Inicialmente abordamos este problema estudiando geometrías de partículas sencillas, pero incluso el ensamblado de sistemas relativamente sencillos resultó ser bastante complejo, debido a que frecuentemente se observa la formación de estructuras competitivas además de la estructura diana buscada [3-5]. A la luz de estos resultados decidimos reformular el problema, centrándonos ahora en el diseño del sistema modelo para obtener una estructura objetivo dada. Para ello elegimos varias estructuras diana, incluyendo tanto cristales con celda unidad compleja, como cuasicristales icosaédricos (IQC). Éstos son materiales que están ordenados, pero carecen de periodicidad en cualquier dirección del espacio. Fueron descubiertos por Dan Shechtman en 1982 [6] y desde entonces se han observado en muchas aleaciones metálicas, pero, hasta ahora, nunca en sistemas no metálicos o de un solo componente [7]. En esta charla mostraremos que también se pueden obtener utilizando partículas modelo con enlaces que imitan los entornos locales en el IQC [8]. A la luz de los impresionantes avances en el diseño de origamis de ADN [9] y proteínas [10] es posible que los modelos diseñados puedan pronto trasladarse a sistemas experimentales.

Agradecimientos. Este trabajo fue financiado por la Agencia Estatal de Investigación, PID2020-115722GB-C21.

Referencias

- [1] S.C. Glotzer and M. Solomon, *Nat. Mater.* **6**, 557 (2007).
- [2] W. Li, et al., *Chem. Soc. Rev.* **49**, 1995 (2020).
- [3] Z. Zhang, A.S. Keys, T. Chen and S.C. Glotzer, *Langmuir* **21**, 11547 (2005).
- [4] F. Romano, E. Sanz and F. Sciortino, *J. Chem. Phys.* **132**, 184501 (2010).
- [5] E.G. Noya, I. Zubieta, D. Pine and F. Sciortino, *J. Chem. Phys.* **151**, 094502 (2019).
- [6] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [7] H. Takakura, et al., *Nat. Mater.* **6**, 58 (2007).
- [8] E. G. Noya, C. K. Wong, P. Llombart, J. P. K. Doye, *Nature* **596**, 367 (2021).
- [9] Y. Tian et al., *Nat. Mater.* **19**, 789 (2020).
- [10] B. I. M. Wicky, et al., *Science* **378**, 56 (2022).