

## **Un nuevo enfoque computacional para estudiar la adsorción en sistemas inconmensurados**

L. M. Farigliano, M. A. Villarreal, O. A. Oviedo y E. P. M. Leiva

Instituto de Físicoquímica de Córdoba (INFICO-CONICET), Departamento de Matemática y Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba. Córdoba. Argentina.

La formación electroquímica de monocapas o submonocapas metálicas ha sido extensivamente estudiada en los 80 y en los 90. Dichos estudios se han enfocado principalmente a superficies planas e infinitas [1]. Pero en recientes años, una nueva ola de estudio se ha centrado en la deposición electroquímica en sistemas con altas curvaturas tales como nanopartículas, nanorods y nanocavidades [2]. Estos sistemas son claramente superficies finitas. Para definir termodinámicamente la estabilidad electroquímica de estas fases, en general se utiliza como estado de referencia una pieza infinita del mismo material. Pero como el sistema en estudio es finito y de tamaño nanoscópico, la termodinámica macroscópica puede no ser válida para describir sus propiedades. En esta escala pueden aparecer otras componentes a la energía libre tales como: contribuciones de curvaturas, rotacionales, traslacionales, etc. que deben ser considerados [2,3].

En el presente trabajo se mostrará una nueva aplicación del modelo termodinámico de dos fases [4], tendiente aquí a estudiar los diferentes aportes energéticos y entrópicos al proceso de electrodeposición metálica en la nanoescala. Se emplearán simulaciones computacionales para ejemplificar y comparar cualitativamente la deposición en superficies monocristalinas y en nanopartículas. Consideraremos la electrodeposición en sistemas pseudomórficos tal como Ag/Au y nopseudomórficos tal como Pb/Au en nanopartículas de diferentes tamaños y formas.

[1] E. Budevski, G. Staikov and W. J. Lorenz, in "Electrochemical Phase Formation and Growth", VCH, Weinheim, 1996.

[2] ""Metal Clusters and Nanoalloys: From Modeling to Applications", Edited by: M. M. Mariscal, O. A. Oviedo and E. P. M. Leiva. Springer, New York, 2012.

[3] T. L. Hill, Nano Lett. 1, 273 (2001).

[4] S-T. Lin, M. Blanco, W. A. Goddard. J. Chem. Phys. 119 (2003) 11792.