

INDICE GENERAL

Contenidos	Página
Resumen	1
Publicaciones relacionadas con la tesis	4
Listado de figuras	5
Glosario	8
Introducción	9
Capítulo 1. Descripción de los experimentos	14
1.1. Síntesis y caracterización de las nanopartículas de oro (NPsAu) esféricas.	15
1.2. Irradiación con pulsos láser de nanosegundos.	19
1.3. Experimentos <i>pump-probe</i> con pulsos láser de femtosegundos.	19
Capítulo 2. Metodología para el desarrollo de las simulaciones de dinámica molecular clásica	23
2.1. Simulación de AuNPs esféricas: huecas y con contenido en su interior, tras el calentamiento por irradiación con pulsos láser de nanosegundos.	24
2.2. Simulación de AuNPs tras el calentamiento por irradiación con pulsos láser de femtosegundos.	25
2.3. Simulación de las oscilaciones mecánicas de NPsAu tras ser calentadas por irradiación con pulsos láseres de femtosegundos.	27
Capítulo 3. Mecanismo de formación de AuNPs huecas tras la irradiación con pulsos láser de nanosegundos.	29
3.1. Discusión de los resultados experimentales.	30
3.2. Simulaciones de dinámica molecular.	34
Capítulo 4. Simulaciones de la forma de AuNPs esféricas tras la irradiación con pulsos láser de femtosegundos.	41
4.1. Simulaciones de dinámica molecular.	42
4.2. Cálculo de la respuesta óptica para diferentes tamaños de las nanopartículas y en función de la forma y la longitud de onda.	48
Capítulo 5. Estudio de la dinámica de las oscilaciones de AuNPs esféricas tras la irradiación con pulsos láser de femtosegundos.	51
Conclusiones	61
Bibliografía	64
Anexos	76
A. Algoritmos Verlet para la integración numérica de las ecuaciones de movimiento.	76
B. Termostato de Langevin para simular la acción térmica de solventes.	79