

Resumen

La irradiación de nanopartículas de oro (AuNPs) esféricas en una suspensión coloidal con pulsos láser de nanosegundos puede inducir su metamorfosis, dando lugar a la aparición de esferas con cavidades internas. La concentración del surfactante estabilizador de las partículas, el uso de fluencias de láser moderadas y el tamaño de las partículas, determinan la eficiencia y características del proceso. Las partículas huecas resultantes se obtienen cuando las moléculas del medio circundante (ej., agua, materia orgánica del surfactante) quedan atrapadas durante la irradiación láser. Estas observaciones experimentales sugieren la existencia de un balance sutil entre los procesos de calentamiento y enfriamiento. El primero induce la expansión y paso a un estado amorfo y, el segundo, la subsecuente recristalización manteniendo en su interior el material atrapado. Estas observaciones experimentales han sido explicadas satisfactoriamente con las simulaciones de dinámica molecular clásica desarrolladas en el marco de esta tesis. Específicamente, la dinámica molecular confirma que es necesaria la existencia de moléculas en el interior de las cavidades que se forman dentro de las AuNPs para que se produzca su estabilización.

En la segunda parte de esta tesis, se detallan las simulaciones de dinámica molecular clásica y los cálculos de propiedades ópticas de la irradiación de nanopartículas esféricas de oro con pulsos láser de femtosegundos, para predecir los cambios de forma que se producen en las mismas, bajo una exploración de los diferentes parámetros involucrados, es decir, la fluencia y duración del láser, el tamaño de las nanopartículas cristalinas esféricas y la capacidad de enfriamiento del medio circundante. El objetivo fundamental de las simulaciones es brindar una guía para la síntesis de nanopartículas con morfologías determinadas. Los resultados de las simulaciones indican que, para la formación de nanopartículas huecas, las mismas deben ser calentadas hasta una temperatura entre 2500 y 3500 K, seguido por un enfriamiento exponencial rápido, con una constante de tiempo menor de 120 ps. Por lo tanto, se describen las condiciones experimentales para la producción eficiente de nanopartículas huecas, lo que abre un amplio rango de posibilidades de aplicación en áreas fundamentales, tales como el almacenamiento de energía y la catálisis.

En la última parte de esta memoria se exponen las simulaciones de dinámica molecular clásica implementadas para profundizar en los experimentos *pump-probe* con nanoesferas plasmónicas de oro, desarrollados en la referencia [R. Fuentes-Domínguez *et al.* Appl. Sci. 2017, 7(8), 819.]. Tras la irradiación láser y consecuente deposición de energía, las partículas vibran, lo que se puede medir mediante la fuerte modulación producida en la sección eficaz de dispersión. La vibración mecánica de las AuNPs esféricas, tras ser irradiadas con láseres ultracortos, las convierte en generadores termoelásticos eficientes de ultrasonido y, por tanto, en excelentes candidatos para transductores luz-sonido en diversas aplicaciones.