

Simulazione della crescita di nanoparticelle di oro-platino

Recenti esperimenti di crescita di nanoparticelle effettuati in fase liquida [1,2] hanno dimostrato che è possibile produrre nanoparticelle di platino con forma piramidale, con base quadrata di orientazione (100). Queste nanoparticelle hanno notevoli proprietà catalitiche [1]. La forma asimmetrica di queste nanopiramidi suggerisce che si possano utilizzare come punto di partenza per la formazione di altre strutture più complesse. Recentemente, il gruppo del Dr. Mauro Moglianetti (IIT, Venezia) ha proposto l'idea di ricoprire le nanoparticelle di platino con atomi d'oro, al fine di ottenere strutture con proprietà sia catalitiche sia plasmoniche, sfruttando la surface plasmon resonance dell'oro. In particolare, sarebbe molto utile poter ottenere un ricoprimento d'oro parziale o comunque asimmetrico. In questa tesi si intende studiare, con mezzi computazionali, la crescita di ricoprimenti d'oro sulle nanopiramidi di platino utilizzando diverse tecniche (Monte Carlo cinetico e dinamica molecolare) anche calcolando le barriere di diffusione con metodi di teoria del funzionale densità.

[1] Valentina Mastronardi, Emanuele Magliocca, José Solla Gullon, Rosaria Brescia, Pier Paolo Pompa, Thomas S. Miller, and Mauro Moglianetti, *ACS Applied Materials & Interfaces* **2022** 14 (32), 36570-36581 DOI: 10.1021/acsami.2c07738

[2] Diana Nelli, Valentina Mastronardi, Rosaria Brescia, Pier Paolo Pompa, Mauro Moglianetti, and Riccardo Ferrando *Nano Letters* **2023** 23 (7), 2644-2650 DOI: 10.1021/acs.nanolett.2c04982