



Nanoestructuras híbridas metal plasmónico-magnetita con absorción de luz incrementada

Ezequiel R. Encina

INFIQC-UNC-CONICET. Departamento de Físicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, UNC. Pabellón Argentina Ala I - 2° Piso, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba. e-mail: ezencina@fcq.unc.edu.ar



Introducción

La energía solar puede convertirse en energía eléctrica o química mediante procesos fotovoltaicos y fotocatalíticos, respectivamente. La combinación de materiales semiconductores con nanopartículas de metales plasmónicos en una misma estructura, dando lugar a las denominadas nanoestructuras híbridas (NH), es una estrategia importante para incrementar la eficiencia de fotoconversión de los materiales empleados en procesos fotocatalíticos. En particular, la magnetita (Fe_3O_4) es un óxido con propiedades ferrimagnéticas y semiconductoras y ha sido empleado como fotocatalizador heterogéneo para la degradación de contaminantes a partir de energía lumínica. La motivación de este trabajo es alcanzar una mayor comprensión sobre los factores que permiten incrementar la absorción de luz en Fe_3O_4 cuando integra NHs, como consecuencia de su interacción con metales plasmónicos. En este trabajo se estudiaron, mediante simulaciones electrodinámicas sistemáticas, las propiedades ópticas de NHs compuestas por un núcleo esférico de diámetro D ($10 \text{ nm} \leq D \leq 90 \text{ nm}$) de un metal plasmónico (Au, Ag, Al) cubierto por una coraza concéntrica de espesor E del óxido Fe_3O_4 ($3 \text{ nm} \leq E \leq 40 \text{ nm}$).

Metodología

Simulaciones electrodinámicas

- Aproximación de Dipolos Discretos
- Simulación de los espectros de eficiencia de absorción, Q_{abs} , de las NHs, como así también de las contribuciones a Q_{abs} por cada componente de la NH.
- Simulación de los patrones de incremento de campo eléctrico local ($|E|/|E_0|$).

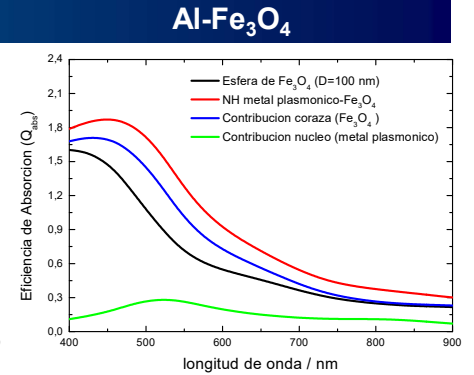
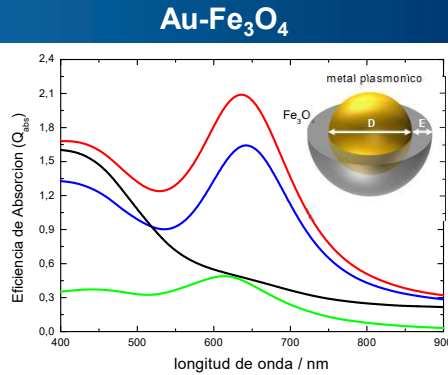
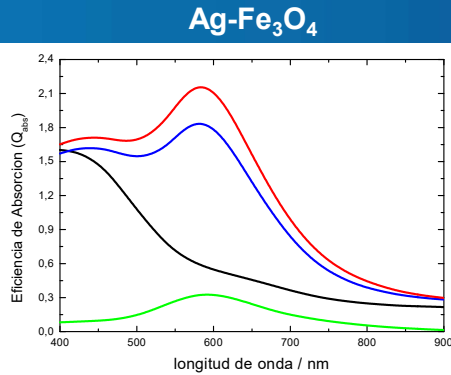
El flujo de fotones absorbidos en la coraza de Fe_3O_4 de la NH, Φ , fue calculado de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\Phi = \int_{\lambda=400 \text{ nm}}^{\lambda=800 \text{ nm}} I(\lambda) Q_{abs}(\lambda) d\lambda$$

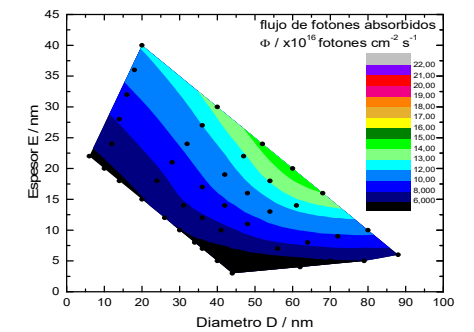
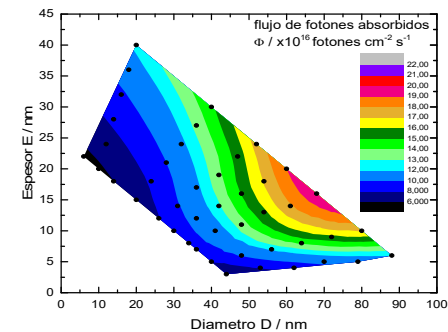
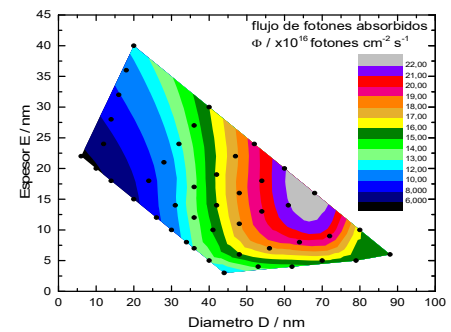
donde $I(\lambda) = \lambda I_{AM1.5G} / hc$ y Q_{abs} para cada componente de la NH está dado por:

$$Q_{abs,i} = \frac{k \text{Im}(\epsilon(\lambda))}{C_{geom} |E_0|^2} \int_{V_i} |E(r)|^2 dr$$

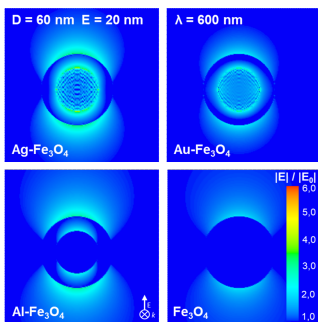
D = 60 nm E = 20 nm



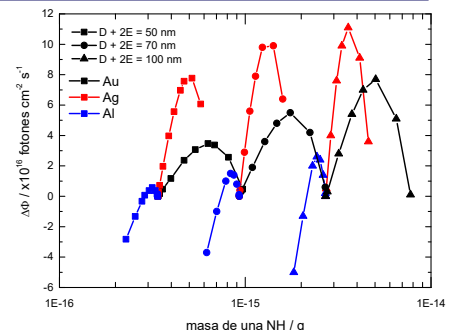
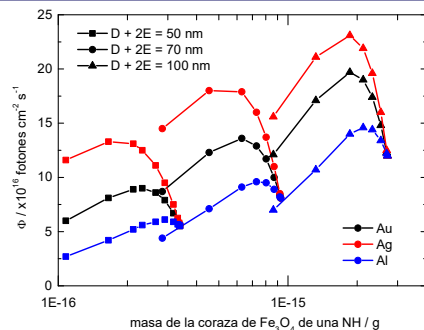
Fotones absorbidos



Campo cercano



Relación Φ - masa



Conclusiones

- Se implementó una metodología que permite calcular las contribuciones a Q_{abs} por parte de cada componente de la NH. El método es general y puede aplicarse a NHs con formas arbitrarias y compuestas por diversos materiales. El principal requisito para aplicar esta metodología es conocer la constante dieléctrica de cada uno de los materiales que componen la NH en el intervalo de longitudes de interés.
- Los espectros de Q_{abs} muestran que es posible aumentar la absorción de luz en la coraza de Fe_3O_4 cuando forma parte de NHs esféricas del tipo núcleo-coraza compuestas por metal plasmónico- Fe_3O_4 . Este aumento se atribuye al incremento del campo eléctrico local $|E|$ en la coraza de Fe_3O_4 como consecuencia de la excitación de resonancias plasmónicas dipolares en el respectivo componente metálico.
- Para alcanzar los mayores aumentos de Q_{abs} , es necesario sintonizar la resonancia plasmónica con la región espectral donde la Fe_3O_4 absorbe. La longitud de onda de resonancia del plasmón se puede sintonizar cambiando la naturaleza del metal, así como también modificando el diámetro de la nanoesfera metálica.
- El flujo de fotones adsorbidos en la coraza de Fe_3O_4 , Φ , aumenta cuando ésta forma parte de NHs. En particular, Ag y Au dan lugar a incrementos significativos de Φ , a diferencia de Al el cual produce incrementos de Φ más pequeños.

Agradecimientos

- FONCYT (PICT 2016-1768)
- CONICET
- SeCyT UNC por apoyo financiero