

Resistencia a la radiación en nanopartículas metálicas de tipo core-shell

• Diego R. Tramontina,^{1,2} Orlando R. Deluigi,^{1,2} Reinhardt Pinzón,^{3,4,5,6} Javier Rojas-Núñez,^{7,8,9} Felipe J. Valencia,⁸ Samuel E. Baltazar,^{7,8,9} Rafael I. Gonzalez,^{7,10} Eduardo M. Bringa^{1,2,10}

¹Facultad de Ingeniería - Universidad de Mendoza

²CONICET

³Centro de Estudios Multidisciplinarios de Ingeniería Ciencias y Tecnología, El Dorado, República de Panamá.

⁴Grupo CIHH del HPC-Cluster-Iberogun, República de Panamá

⁵Sistema Nacional de Investigación, República de Panamá

⁶Universidad Tecnológica de Panamá - Centro de Investigaciones Hidráulicas e Hidrotécnicas

⁷Centro para el Desarrollo de la Nanociencia y la Nanotecnología, Universidad de Santiago de Chile, Chile.

⁸Centro de Investigación DAiTA Lab, Facultad de Estudios Interdisciplinarios, Universidad Mayor, Chile

⁹Universidad de Santiago de Chile, Santiago, Chile

¹⁰Centro de Nanotecnología Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad Mayor, Santiago, Chile 8580745

Presentamos simulaciones de dinámica molecular (molecular dynamics, MD) sobre daño por radiación en nanopartículas bimetálicas tipo Core-Shell (CSNP). La CSNP incluye un núcleo de Fe (bcc), recubierto con una capa de Cu (fcc) y se emplea una nanopartícula (NP) de Fe puro para contraste. Se emplearon varias energías de hasta 10 keV utilizando el método Primary Knock-on Atom (PKA). Los resultados muestran defectos puntuales, sin formación de clusters más allá de di-vacancias, a diferencia de lo observado en materiales 'bulk'. Las simulaciones de bombardeo acumulativo con PKAs de 5 keV muestran el mismo comportamiento, también con menos defectos que en el caso bulk. La interfaz core-shell y el shell pueden actuar como sumideros de defectos, absorbiendo el daño inducido por radiación y por lo tanto, el número final de defectos en el núcleo es significativamente menor que en el caso NP. Además, la capa de Cu disminuye sustancialmente el número de átomos eyectados de Fe, actuando como una barrera. Estructuralmente, el shell de Cu responde a la tensión generada por las cascadas de colisión mediante acumulación de defectos puntuales minimizando el daño en el núcleo. Comparamos nuestros resultados de MD con simulaciones de Monte Carlo usando el método de Aproximación por Colisiones Binarias (Binary Collision Approximation, BCA) implementado en SRIM, para la irradiación de una película delgada amorfa tricapa con un espesor análogo al diámetro de la CSNP y una de tipo monocapa, emulando la NP. BCA no modela la recombinación de defectos, por lo que el número de pares de Frenkel es significativamente mayor al observado con técnicas MD, como es de esperarse. BCA también subestima el sputtering, lo que también se espera dado que se ha simulado radiación con incidencia normal. De acuerdo con nuestras simulaciones, esta clase de nanomaterial podría ser adecuada para desarrollar nuevos recubrimientos resistentes a la radiación, componentes nanoestructurados y escudos para su uso en entornos extremos, por ejemplo, en aplicaciones de energía nuclear, astrofísica y radiomedicina.