

Grupo de NanoMateriales "GNM" <http://www.gnm.cl> Universidad de Chile-Universidad Andrés Bello Una aproximación al mundo desde sus cimientos



Nuestro grupo lleva a cabo investigaciones en el área de nanomateriales y nanoestructuras. Nos interesa estudiar las propiedades estructurales, dinámicas, electrónicas y magnéticas de cerámicos, nanocristales, nanotubos, clusters y estructuras magnéticas de bajas dimensiones. La principal metodología para estudiar estos problemas es mediante técnicas de simulación computacional particularmente cálculo de estructura electrónica basada en teoría funcional de la densidad, así como dinámica molecular clásica y *ab-initio*.

Gente

Este grupo se formó a fines del 2004 y está conformado por :

Profesores:

- . Gonzalo Gutiérrez (Universidad de Chile)
- . Eduardo Menéndez (Universidad de Chile)
- . Walter Orellana (Universidad Andrés Bello)

Estudiantes:

- . Joaquín Peralta
- . Claudia Loyola
- . Eduardo Valdebenito
- . Paula Escobar
- . Fernando Cuturrufu

Colaboradores:

- . Sergio Davis (KTH)
- . David Laroze

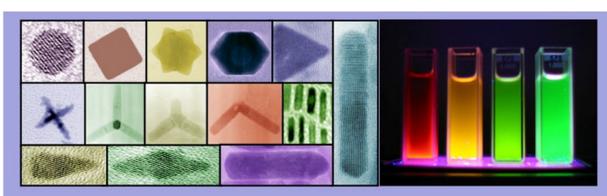
Áreas de Investigación

Nanomateriales

Los materiales nanoestructurados son materiales con tamaño de grano menor o igual a los 100 nanómetros ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$). El masivo interés por estudiar estos materiales se generó debido a que ciertas propiedades físicas mejoraron increíblemente respecto a materiales policristalinos o cristales simples de la misma composición química, pero de tamaño de grano convencional ($> \mu\text{m}$). Por ejemplo, los metales nanoestructurados pueden resistir esfuerzos mucho mayores que los metales convencionales, de grano más grueso. De modo similar, los cerámicos, normalmente quebradizos, muestran una alta dureza, alta resistencia a las fracturas, y un comportamiento superplástico, cuando el tamaño de grano es refinado al régimen nanométrico. Estos materiales son altamente deseados para aplicaciones que requieren condiciones extremas de operación, por ejemplo, son utilizados en la industria aeronáutica, entre otras. De allí la necesidad de investigar estos materiales, a nivel atómico, tanto desde el punto de vista experimental como teórico.

Nanocristales Semiconductores

Un nanocrystal semiconductor o un punto cuántico es una estructura cristalina a nanoescala, la cual se considera que tiene una mayor flexibilidad que otros materiales fluorescentes, lo que lo hace apropiado para utilizarlo en construcciones a nanoescala de aplicaciones computacionales donde la luz es utilizada para procesar la información. El atributo cuántico sirve para recordar que el comportamiento del electrón en tales estructuras debe ser descrito en términos de la teoría cuántica. Las nanoestructuras de *cadmio selenio* son un ejemplo de este tipo de nanocrystal. La presencia de un único electrón en tales estructuras puede ser utilizada para almacenar información.

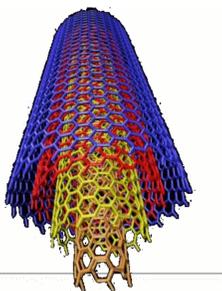


Cerámicos Avanzados

Los materiales cerámicos *max phases* son una clase de compuestos ternarios de la forma: $M_{n+1} A X_n$ (MAX), donde M es un metal de transición temprana con $n = 1, 2$ o 3 , A es un elemento del grupo A (*sobre todo IIIA e IVA*), y X es Carbón y/o Nitrógeno. Estos *carburos* y *nitruros* ternarios combinan características inusuales de los metales y de los cerámicos. Poseen alta dureza, pero al mismo tiempo gran ductibilidad.

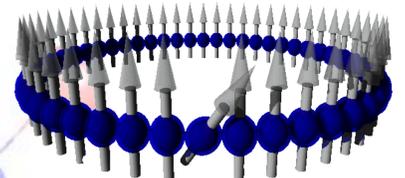
Nanotubos de Carbono

Son estructuras tubulares compuestas de átomos de carbonos cuyos diámetros son del orden de los nanómetros con longitudes que pueden llegar a los micrómetros. Estas estructuras son actualmente materia de intensa investigación teórica y experimental debido a sus extraordinarias propiedades electrónicas y estructurales que los hacen *promisores candidatos* para una nueva generación de dispositivos de escala nanométrica. Experimentos han mostrado posibles aplicaciones de estos nanotubos en sistemas tan diversos como sensores químicos y biológicos, encapsuladores moleculares, transistores, nanohilos, entre otros.



Nanomagnetismo

Estudiamos las propiedades magnéticas de materiales a nivel atómico tanto por métodos de cálculo *ab-initio* así como mediante cálculos modelos, ya sean cuánticos o clásicos. Respecto a los modelos clásicos, estamos investigando la transmisión de calor en sistemas de espines unidimensionales. Según nuestros cálculos, estos sistemas presentan ciertas anomalías con respecto al modelo clásico de la Ley de Fourier para sistemas de dimensiones mayores, presentando comportamientos que pueden ser de tipo *balístico*, *superdifusivo* o *subdifusivo*.



Agradecimientos

Proyecto Anillo ACT/24
 "Computer Simulation lab for nanobio systems"