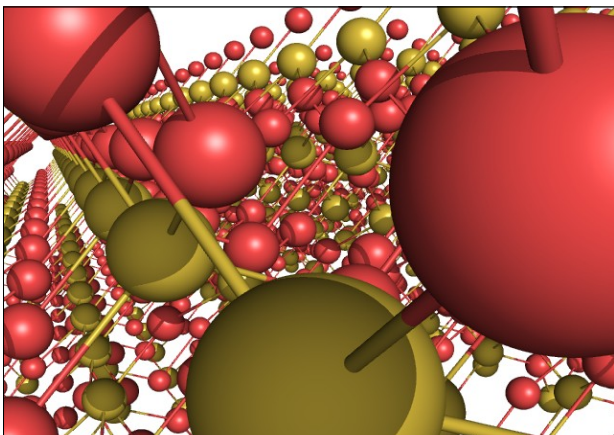


Cálculos *Ab-Initio* : Este método, considera que una molécula, o un sólido, está compuesto por iones y electrones, agrupados de tal modo que forman enlaces entre ellos. Las propiedades físicas que caracterizan al sistema dependen de las diferentes interacciones entre sus componentes.



Dinámica Molecular : Es un tipo de simulación computacional que considera un sistema de átomos o moléculas los cuales son tratados como un conjunto de partículas clásicas que interactúan unas con otras mediante un potencial interatómico. Debido a que en general los sistemas moleculares poseen un gran número de partículas, es imposible encontrar propiedades de tales sistemas complejos analíticamente.



Información de Contacto :

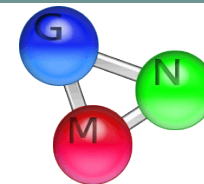
Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile.

Dirección : Las Palmeras #3425, Ñuñoa Santiago.

Teléfono : 9787276

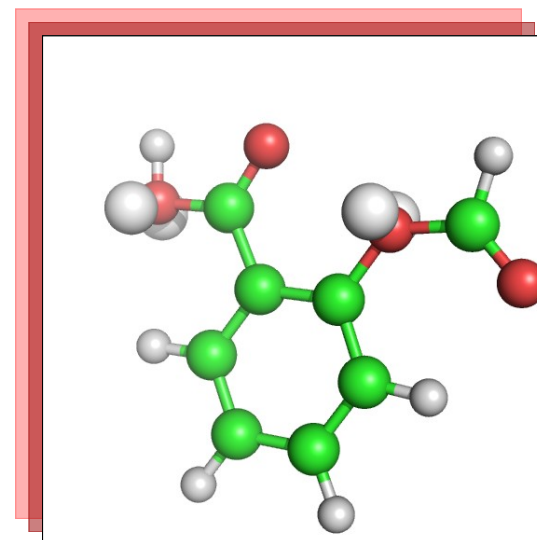
E-mail : gnm@gnm.cl

Página web : <http://www.gnm.cl>



Grupo de NanoMateriales

Nuestro grupo se dedica al estudio de Materiales y Nanoestructuras, enfatizando en sus Propiedades Estructurales, Electrónicas y Dinámicas, utilizando herramientas computacionales.



Una aproximación al mundo desde sus cimientos...

<http://www.gnm.cl>

Áreas Investigación

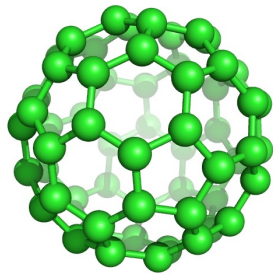
Áreas Investigación

Simulaciones

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, nanocrisales, 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*.

NanoMateriales.

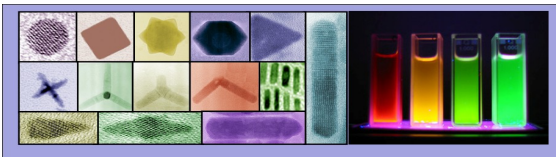
Los materiales nanoestructurados son materiales con tamaño de grano menor o igual a los 100 nanómetros ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$). El masivo interés por estudiar estos materiales se generó debido a que ciertas propiedades físicas mejoraron increíblemente respecto a materiales policristalinos 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.

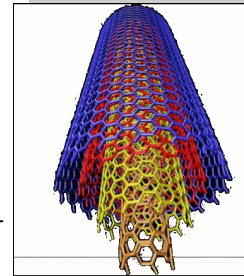
NanoCristales Semiconductores

Un nanocristal 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. Las nanoestructuras de cadmio selenio son un ejemplo de este tipo de nanocristal. La presencia de un único electrón en tales estructuras puede ser utilizada para almacenar información.



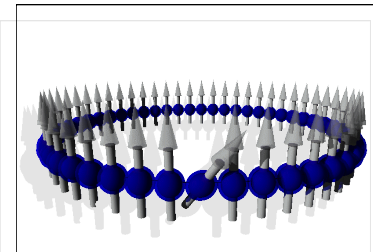
NanoTubos de Carbono.

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 promisoros 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.

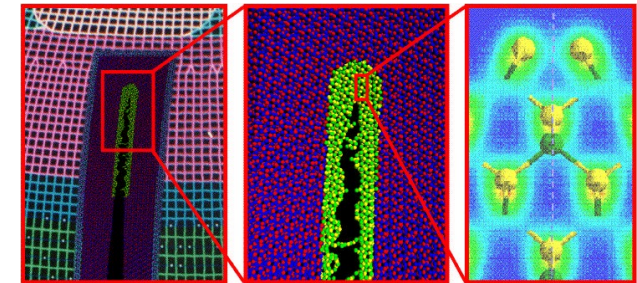


NanoMagnetismo

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.



Por muchos científicos es considerada "una tercera metodología" a la investigación científica. Este método, de carácter complejo y muchas veces alternativo a los modos convencionales de hacer ciencia, el experimental y el teórico, ha ejercido un fuerte impacto en prácticamente todos los campos de la ciencia. El objetivo de la simulación computacional es resolver los modelos teóricos en su total complejidad, mediante la resolución numérica de las ecuaciones involucradas, haciendo uso intensivo (y extensivo) de computadores.



Los métodos de simulación computacional comúnmente usados para el estudio de las propiedades físicas de los materiales, son los de Dinámica Molecular y Cálculos *ab-initio*.



Clusters de Computadores.

