

Las simulaciones atomísticas como aliadas de las técnicas experimentales en Ciencia de Materiales

Miguel San-Miguel

Instituto de Química, UNICAMP

Campinas (Brasil)

Nuestra sociedad actual exige el desarrollo de nuevos materiales cada vez más sofisticados. Las técnicas experimentales de caracterización permiten a veces un conocimiento muy detallado de distintas propiedades físico químicas. Sin embargo, estrategias que combinen experimentos con técnicas computacionales de simulación atomística pueden resultar muy eficientes y ventajosas.

En este seminario presentaremos algunas de las líneas actuales de investigación que estamos llevando a cabo en nuestro grupo. En primer lugar, se mostrará cómo el uso de métodos de simulación clásicos han permitido comprender mejor los fundamentos físico químicos de las interacciones subyacentes en la cutina vegetal y han ayudado en la fabricación de bioplásticos comerciales de polímeros de ácidos carboxílicos hidroxilados. Las simulaciones atomísticas muestran cómo el número y la posición de los grupos hidroxilo determinan la eficiencia y estabilidad de los bioplásticos resultantes.

También se expondrán otras aplicaciones en las que los métodos cuánticos están permitiendo dar algunas respuestas a problemas relacionados con nanoestructuras metálicas. Así, por ejemplo, cadenas atómicas lineales de metales de transición pueden exhibir propiedades electrónicas sorprendentes y también pueden actuar como catalizadores en la oxidación de CO. En otro contexto, el bombardeo con electrones de superficies de algunos tipos de óxidos metálicos induce el crecimiento de agregados de plata que pueden ser usados como sensores de ozono o también como agentes bactericidas.