

Estudio de las propiedades electrónicas y estructurales de los materiales complejos: Cuasicristales e Hidroxiapatita

Robert Espinoza Bernardo
Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú

En la actualidad el amplio rango de aplicaciones de los materiales complejos corresponde a la enorme variedad de sus propiedades, como electrónicas, magnéticas, térmicas, ópticas y físico-químicas, que surgen principalmente de la diversidad de estructuras, tamaños y especie atómica. En este sentido los cuasicristales y la hidroxiapatita son estructuras complejas que ya tienen aplicaciones relevantes en la industria. Por ejemplo, ya se utilizan aleaciones metálicas cuasicristalinas en algunos productos comerciales, incluyendo un revestimiento para sartenes en las cuales los alimentos no se pegan porque combinan la propiedad de ser resistentes a los arañazos y a las altas temperaturas de un polímero como el Teflón con la capacidad de conducción del calor de los metales. Asimismo, la propiedad clave de la hidroxiapatita es la adhesión con los metales. Además de ser ésta su principal aplicación, es posible utilizarlo, según recientes estudios, en la purificación de agua como intercambiador iónico. Mediante distintas técnicas se han producido filtros para inmovilizar los metales pesados del agua.

La presente charla va estar dividida en dos partes: en la primera parte se hará una revisión, que no pretende ser completa ni detallada, pero que permita introducirnos al concepto de aperiodicidad a partir de los números de Fibonacci para luego discutir algunas de las características más saltantes de los cuasicristales. Finalmente, se presenta una posibilidad de seguir explotando aún más las propiedades físicas de estos sistemas introduciendo un nuevo parámetro: el tamaño de grano promedio de los cristalitas del cuasicristal, el cual tiene relevancia a escalas nanoscópicas. En la última parte se hará un revisión de las dos fases cristalinas en que se presenta la hidroxiapatita. Haciendo uso de la teoría del funcional de la densidad, con el software SIESTA, se estudia las propiedades estructurales y electrónicas de la hidroxiapatita en sus fases hexagonal y monoclinica.