

FORO BUAP-AEM, Enero de 2015

ESTUDIO QUÍMICO CUÁNTICO DE MATERIALES CON PROPIEDADES DE INTERÉS EN LA INVESTIGACION ESPACIAL

J.F. Rivas-Silva, N. Grijalva-Ortiz

Instituto de Física Ing. Luis Rivera Terrazas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México.

RESUMEN

En esta ponencia, luego de presentar al Cuerpo Académico de Física Computacional de la Materia Condensada del IFUAP, se describen dos ejemplos de líneas de investigación complementarias que se pueden desarrollar dentro de ese grupo académico, en el enfoque de la investigación espacial que se fomenta en este foro.

Ambas líneas se relacionan con el estudio de la estructura electrónica de la materia que se desarrolla en ese grupo, a partir de resolver las ecuaciones que plantea la Mecánica Cuántica de sistemas de muchas partículas, y que se llevan a cabo en computadoras de alto desempeño utilizando códigos especializados.

En el primer caso, se describe las causas microscópica de la erosión que sufren los materiales poliméricos de los satélites que orbitan en las orbitas LEO (Low Earth Orbit) debido a la presencia de Oxígeno atómico a esas alturas (180-650 km). El estudio energético del sistema polimérico en su choque con esos átomos brinda la explicación para el rompimiento de esas cadenas y que resulta en el daño mencionado.

En el segundo caso, se describe el estudio y obtención de las propiedades mecánicas de materiales de interés espacial (como Rh_3X , $X=Ti, V$) que se utilizan para el diseño de motores y sondas, usando métodos de simulación de estado sólido que permiten obtener teóricamente parámetros tales como las constantes elásticas de los materiales, sus módulos de bulk y de corte, etc., todo ello en la búsqueda de mejores materiales que soporten las condiciones espaciales.