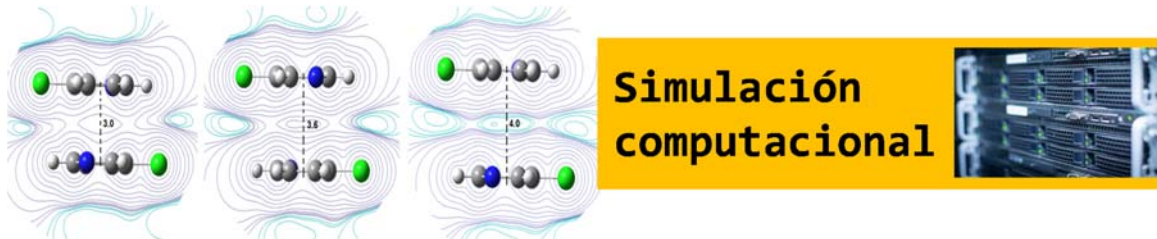


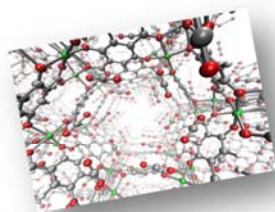
Modelado computacional de materiales:

Los avances en poder de cómputo y software hacen posible el diseño potencial, caracterizar y evaluar materiales en un contexto virtual. Tal potencialidad está acelerando la investigación en ciencia de los materiales simulando su estructura electrónica y propiedades funcionales. Nuestra capacidad para tales estudios se encuentra limitada a un clúster de 1.3 Teraflop, el cual progresivamente incrementara su capacidad de cálculo hasta por encima de 10 Teraflops.



La simulación de materiales computacional es un área que combina conocimientos de química, física, matemáticas y ciencias computacionales (software y hardware) y constituye en nuestros días una herramienta que contribuye a comprender y predecir las propiedades físicas y funcionales de los materiales.

Cálculo de: ◆ Propiedades físico-químicas

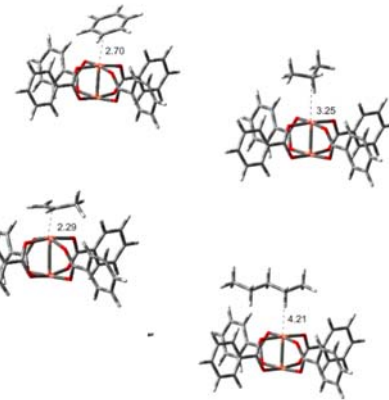
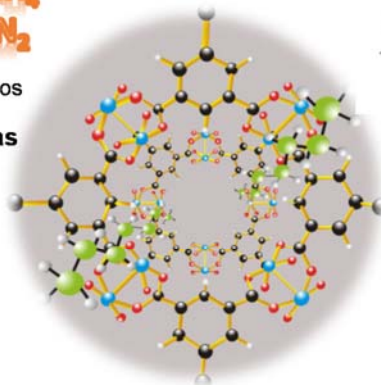


Materiales porosos

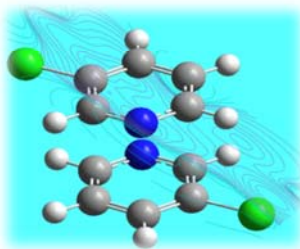
2007

◆ Parámetros termoquímicos

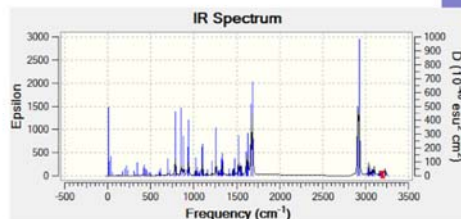
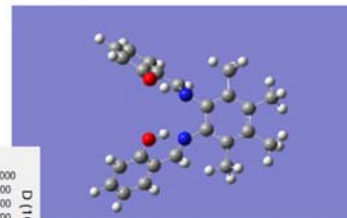
◆ Interacciones



◆ Optimización de geometrías



◆ Espectros IR



◆ Diagramas de bandas

Gap directo

Gap indirecto

