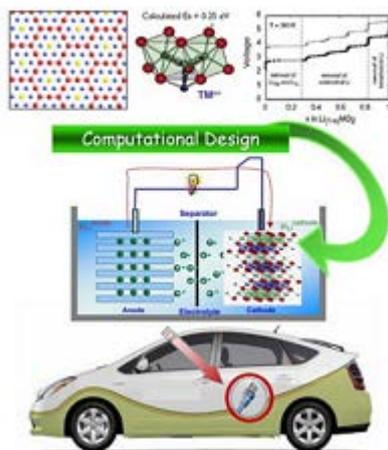




DISEÑO COMPUTACIONAL DE MATERIALES INORGÁNICOS

Descripción

[El grupo](#) diseña materiales prometedores sin la necesidad de cualquier esfuerzo experimental. Para ello, utiliza los cálculos a partir de primeros principios o *ab Initio*, que corresponden a la utilización del mero conocimiento de la composición de un material para predecir sus propiedades. El grupo es especialista en el estudio de materiales para la energía, teniendo amplia experiencia en materiales para baterías recargables de litio y otros cationes.



La química computacional asiste al diseño de nuevos materiales

Cómo funciona

Para realizar cálculos a partir de primeros principios sobre un material con una composición determinada, la única información que se necesita es la de su estructura cristalina (real o hipotética). Como resultado directo del cálculo realizado se obtienen las energías total, estructura de bandas, densidades de carga, parámetros de red, distancias de enlace, etc.

Ventajas

Los métodos a partir de primeros principios suponen una gran ventaja en el diseño de nuevos materiales, porque al no necesitarse información experimental, el comportamiento de un material puede predecirse incluso antes de ser sintetizado, siendo pues posible centrarse rápidamente en sistemas prometedores. Frente a los experimentos reales, la computación permite tener un control total sobre todas las variables experimentales. Este nivel de control hace posible diseñar "experimentos computacionales" encaminados a entender la influencia de una variable específica en la interacción estructura-composición-propiedades.

¿Dónde se ha desarrollado?

La experiencia [del grupo](#) en el campo de la química computacional se remonta al año 2000, cuando la Dra. Arroyo se incorporó como investigador contratado postdoctoral al grupo del Prof. G. Ceder en el *Massachusetts Institute of Technology* (MA, US). Desde su regreso a España en 2003 la Dra. Arroyo continuó con esta línea de investigación, combinando técnicas computacionales y experimentales para el estudio de materiales para la energía. En los últimos años el grupo ha establecido contratos de investigación con la empresa Toyota Motors Europe.

Investigadora responsable

Elena Arroyo de Dompablo: e.arroyo@quim.ucm.es

Departamento: Química Inorgánica

Facultad: Ciencias de Ciencias Químicas

