Estudio teórico de sistemas bidimensionales que contiene los elementos de segundo y tercer periodo

Se estudiaran nanohojuelas de carbón de diferentes tipos, los nanobelt, cintas de Mobius y estructuras similares con silicio enfocándose en búsqueda en sistemas con estado basal de alto espín. Los cálculos consistirán en optimizaciones de la geometría usado métodos de teoría de funcionales de la densidad y software Gaussian Q-chem, ADF GAMESS. También se utilizaran métodos multireferenciales tales como de espacio activo completo. Se necesitaran 200000 horas de cómputo, lo demás está indicado en la solicitud.

Los recursos serán utilizados por mi personalmente

Tengo 150 artículos publicados en revistas indicadas internacionales, de cuales unos 100 son de química computacional, 7 alumnos de doctorado graduados y varios de maestría y licenciatura. Tengo el PRIDE D y nivel de SIN III. Desde hace muchos años utilizo códigos computacionales tales como el Gaussian, Turbomole, Q-Chem, GAMESS, Jaguar, NW-Chem.