Trabajo que se plantea realizar

Una vez que hemos obtenido, mediante cálculos de dinámica molecular, la distribución de la boehmita como función de la temperatura y del tiempo. Analizaremos, la coordinación en torno a los átomos de aluminio. Esto lo haremos determinando el espectro de absorción de resonancia magnética nuclear partiendo de la correspondiente distribución atómica. De igual determinaremos la densidad de estados energéticos y de las frecuencias de oscilación. Determinaremos asimismo el potencial electrostático de la mencionada configuración.

Esto lo realizaremos empleando el código Gaussian y la supercomputadora Miztli. En número de distribuciones que se analizarán se estimará de manera que el tiempo de cálculo no exceda los 50,000 horas de CPU.

Se iniciará la caracterización de partículas metálicas soportadas en grafeno. Actualmente tenemos ya algunos cálculos de dinámica molecular en algunos sistemas como Pd/grafeno, Ni/grafeno, Rh/grafeno y Ru/grafeno. Además de estudios preliminares sobre la oxidación de grafeno con ácidos, permanganato de potasio y agua oxigenada.

Para la caracterización emplearemos el código Gaussian. Se buscará también hacer cálculos de dinámica molecular de cúmulos metálicos de oro sobre grafeno. Metal que no podemos analizar empleando el código TeraChem con los GPUs en los nodos en nuestro laboratorio.

Estimamos que este estudio, junto con la caracterización se podrá hacer con 50,000 horas de CPU.