



Grupo RASPA: Universidad Pablo de Olavide

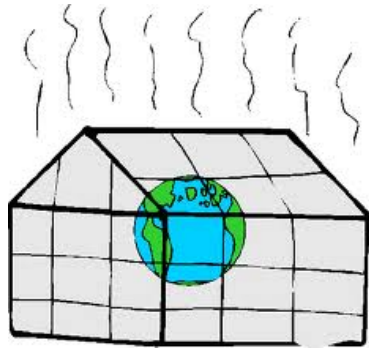


<http://www.upo.es/raspa>

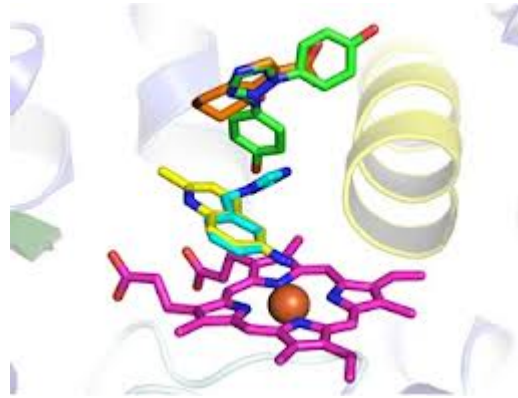


Usamos Simulación Molecular...

...para resolver problemas de interés tecnológico e industrial



Efecto invernadero



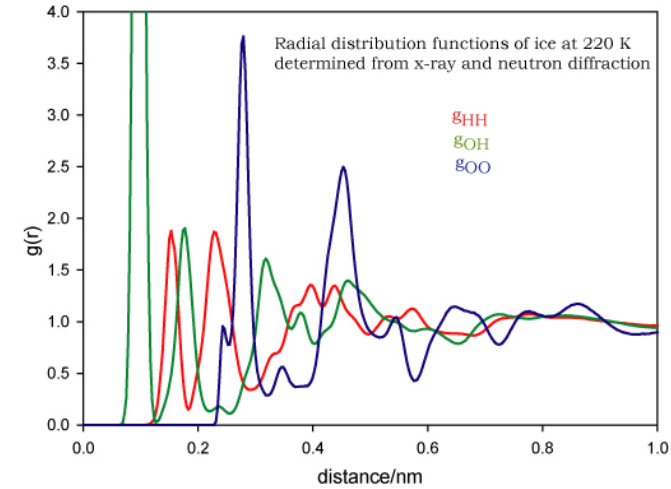
Diseño de materiales



Energías renovables

Simulación Molecular

Experimentos Computacionales



MODELOS

ORDENADOR

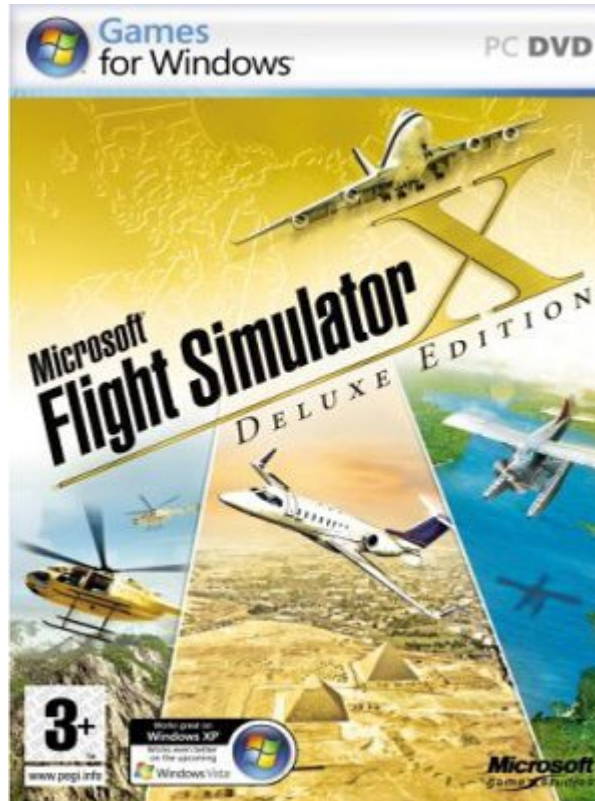
RESULTADOS

(material, sistemas...)

(equipos)

(medidas)

EL SIMULADOR DE VUELO



Quiero aprender a pilotar un Avión sin correr riesgos...

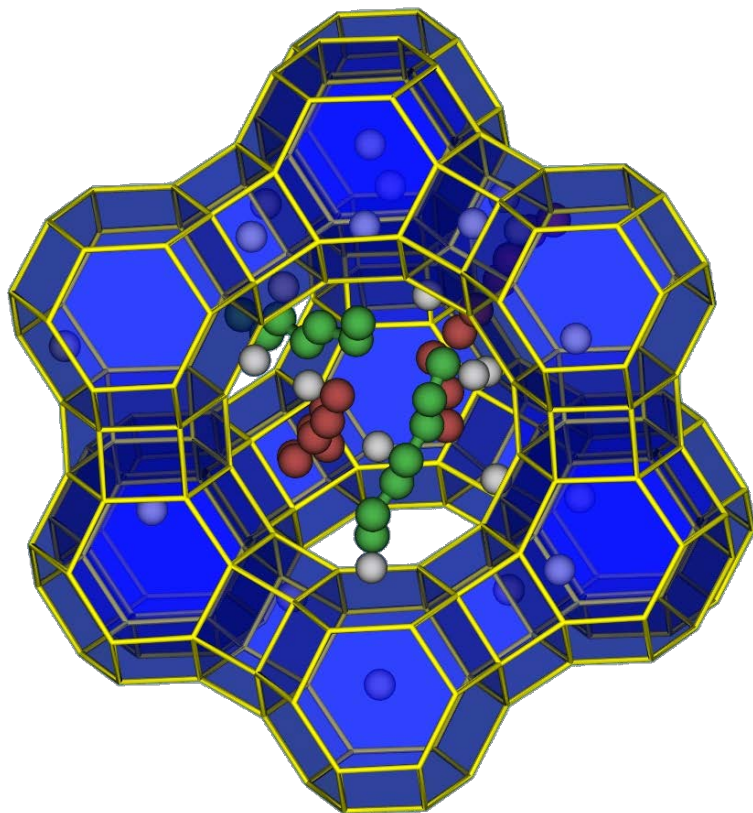


Utilizo un simulación:
Si algo va mal...



LO INTENTO UNA Y OTRA VEZ

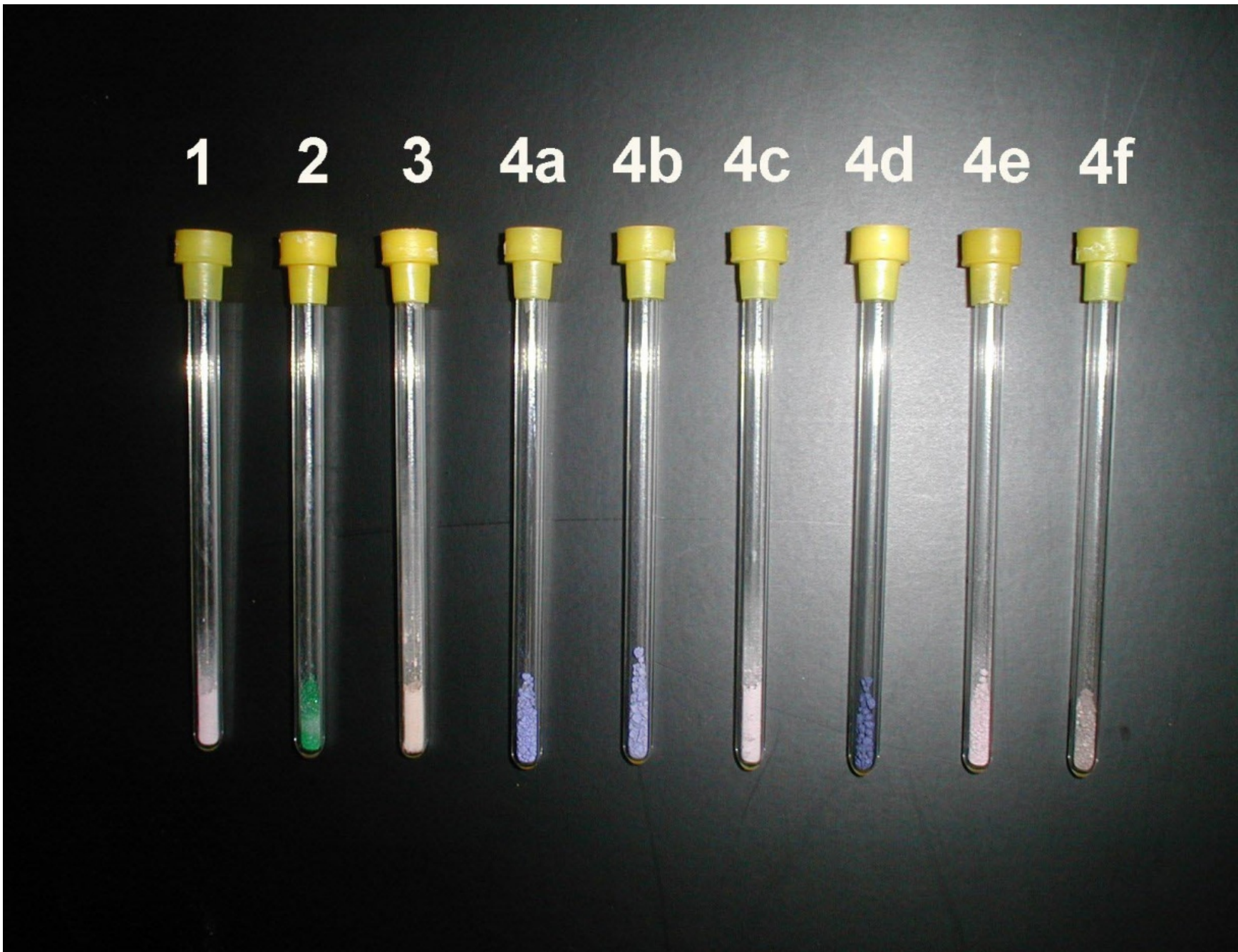
La Simulación Molecular permite:



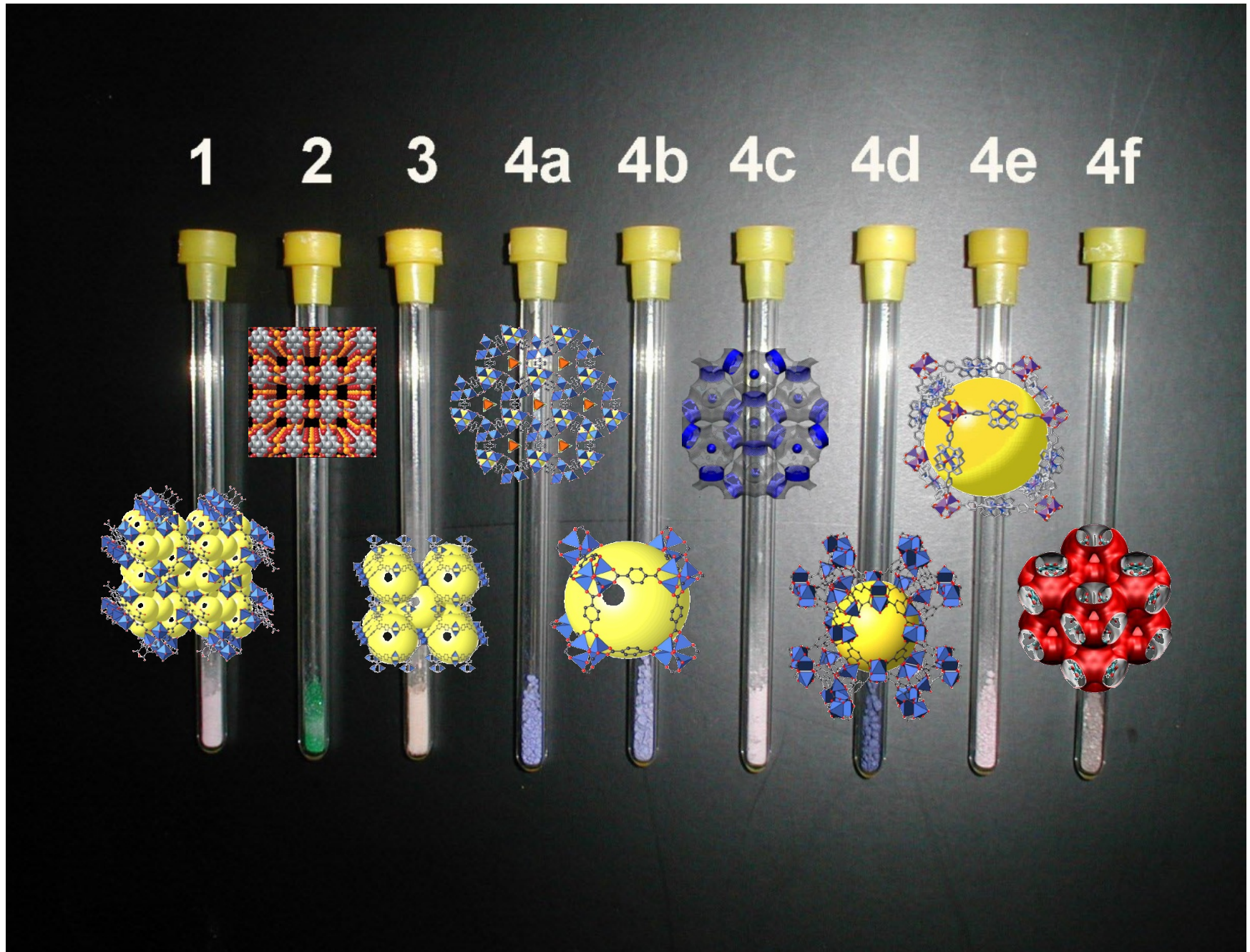
- 1. ver una estructura en detalle*
- 2. ver cómo se mueven las moléculas dentro de la estructura*
- 3. entender cómo se llena una estructura de moléculas*
- 4. diseñar estructuras “al gusto”*

*Todo eso sin hacer experimentos
(ahorro de tiempo y de dinero)*

Podemos ver una estructura en detalle

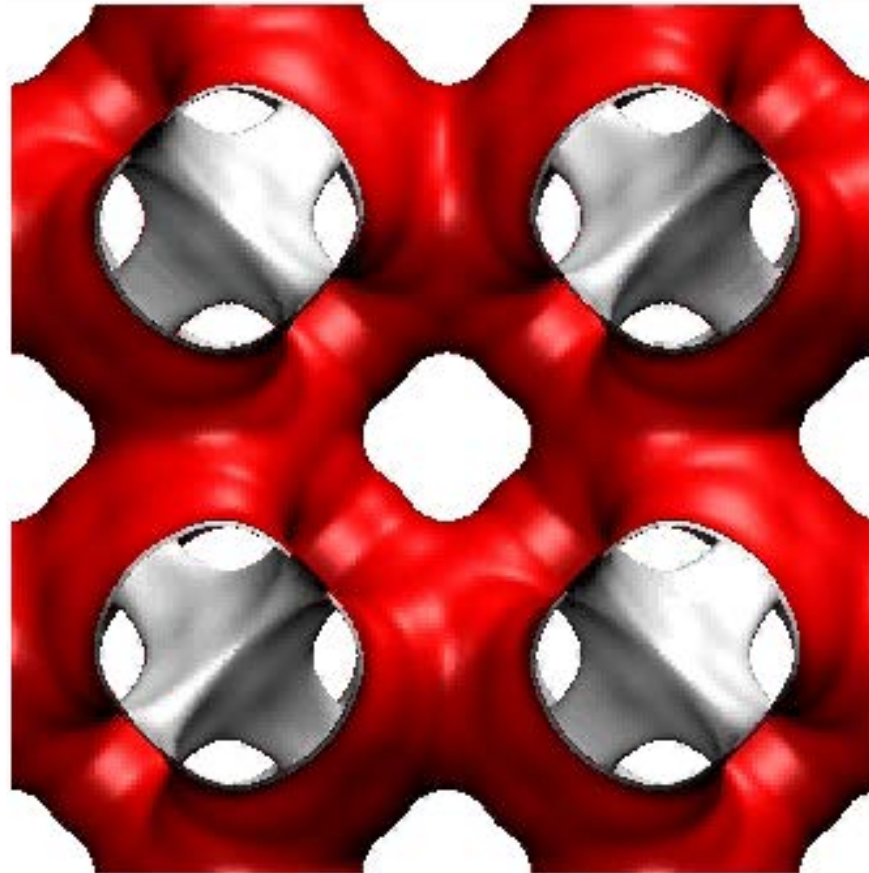


Podemos ver una estructura en detalle



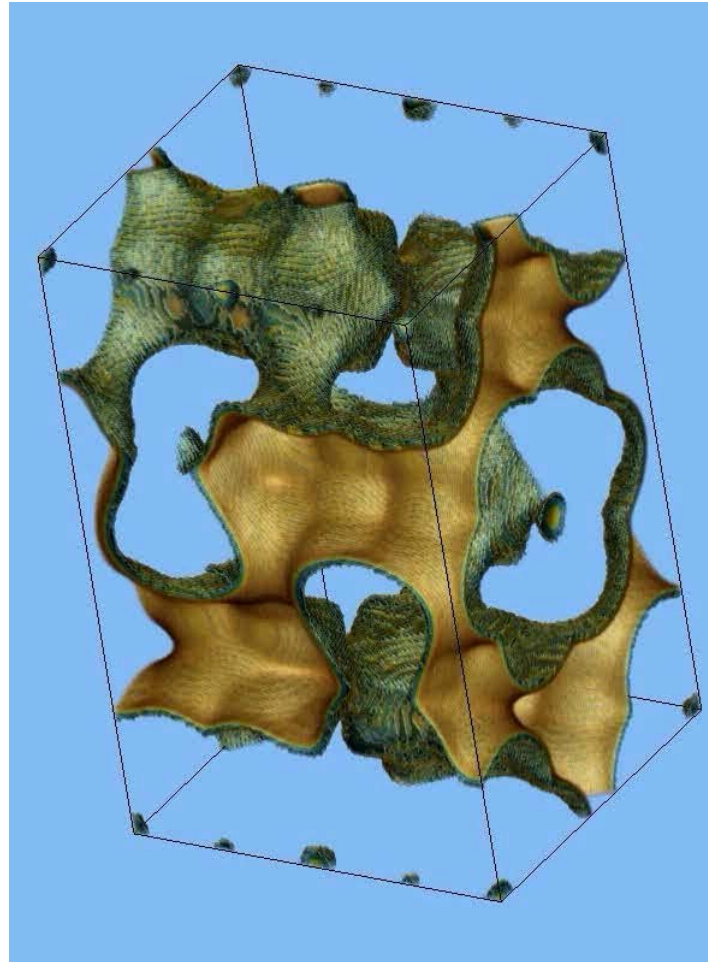
Podemos ver una estructura en detalle

Estructura diseccionada

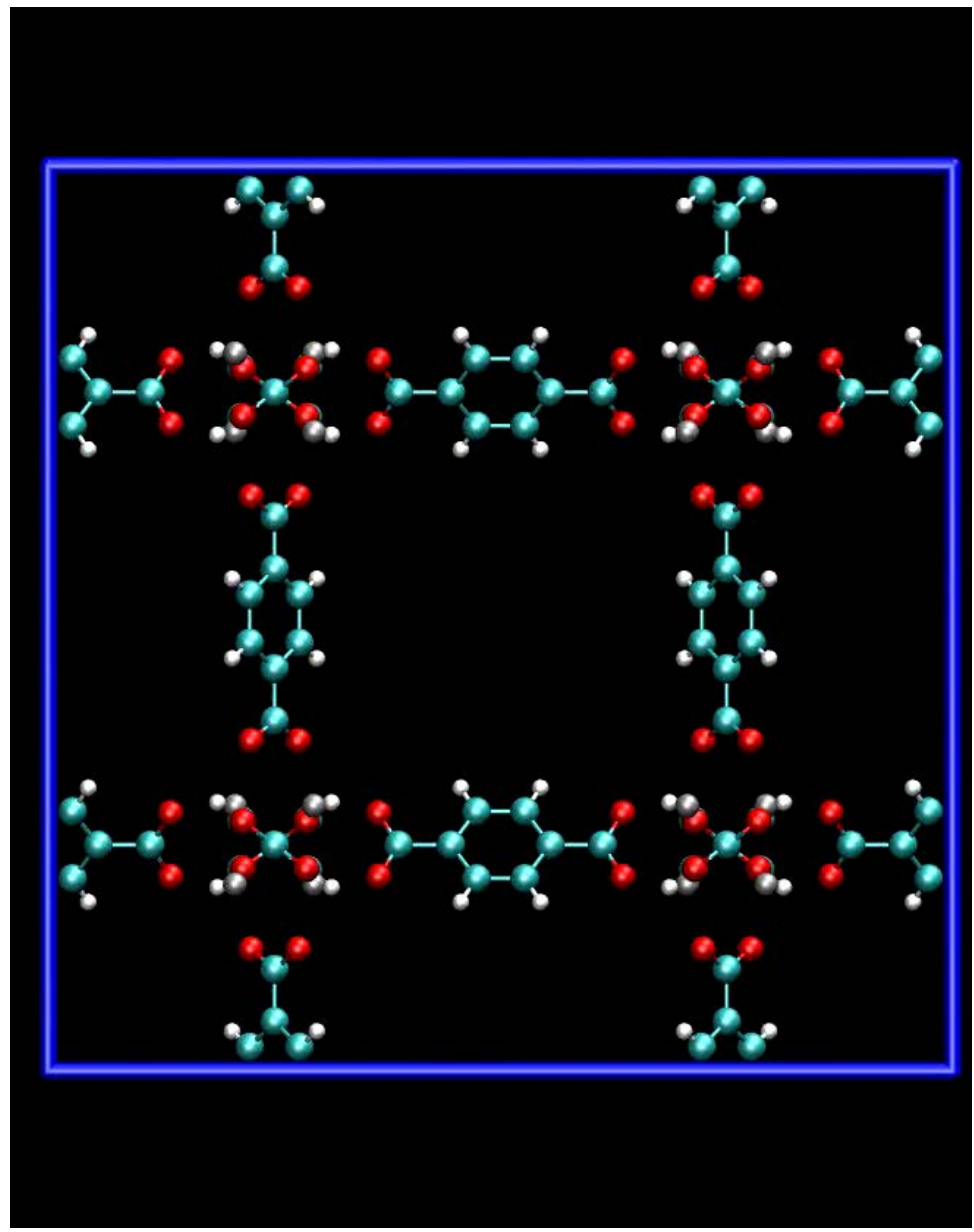


Podemos ver una estructura en detalle

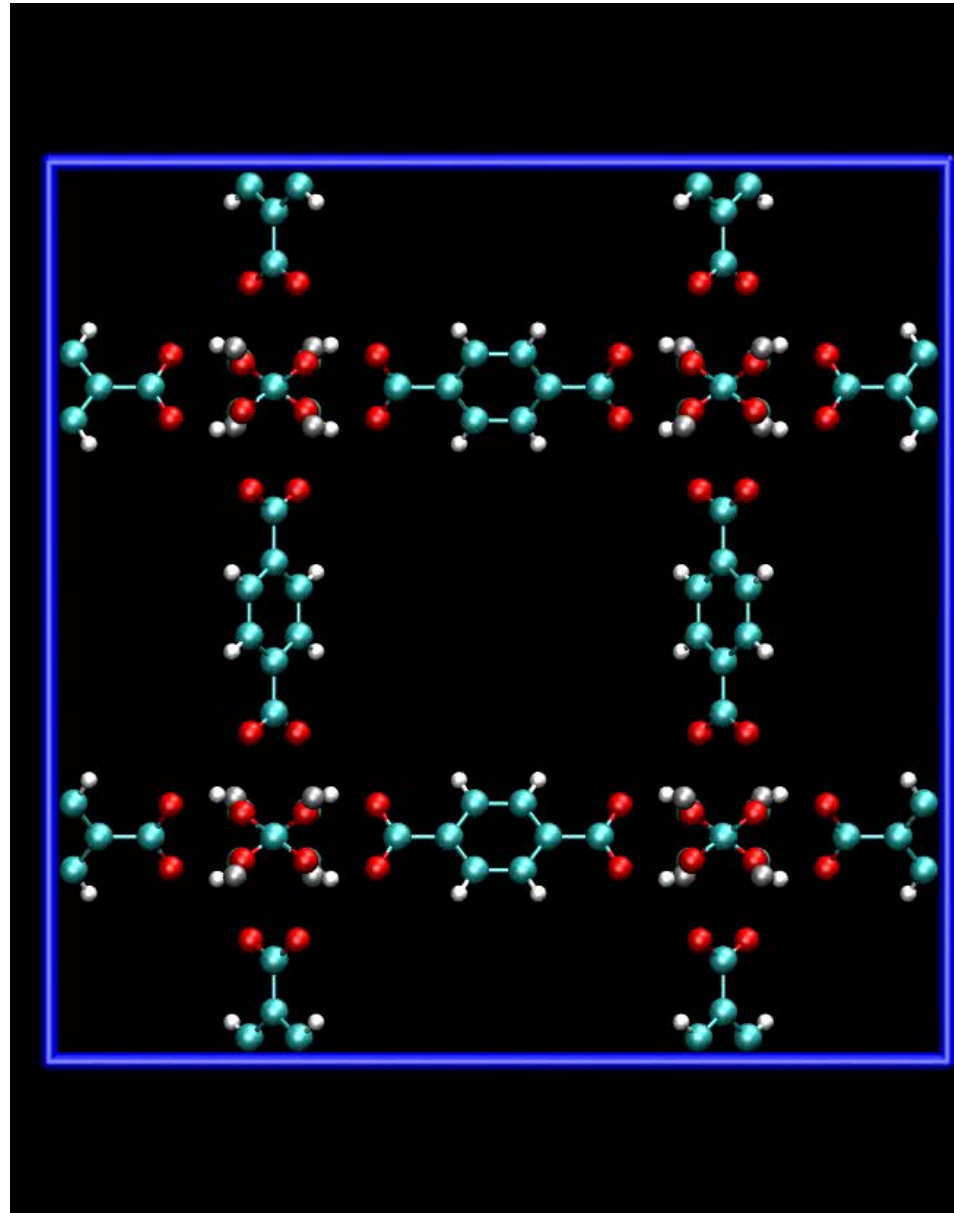
Estructura rotada



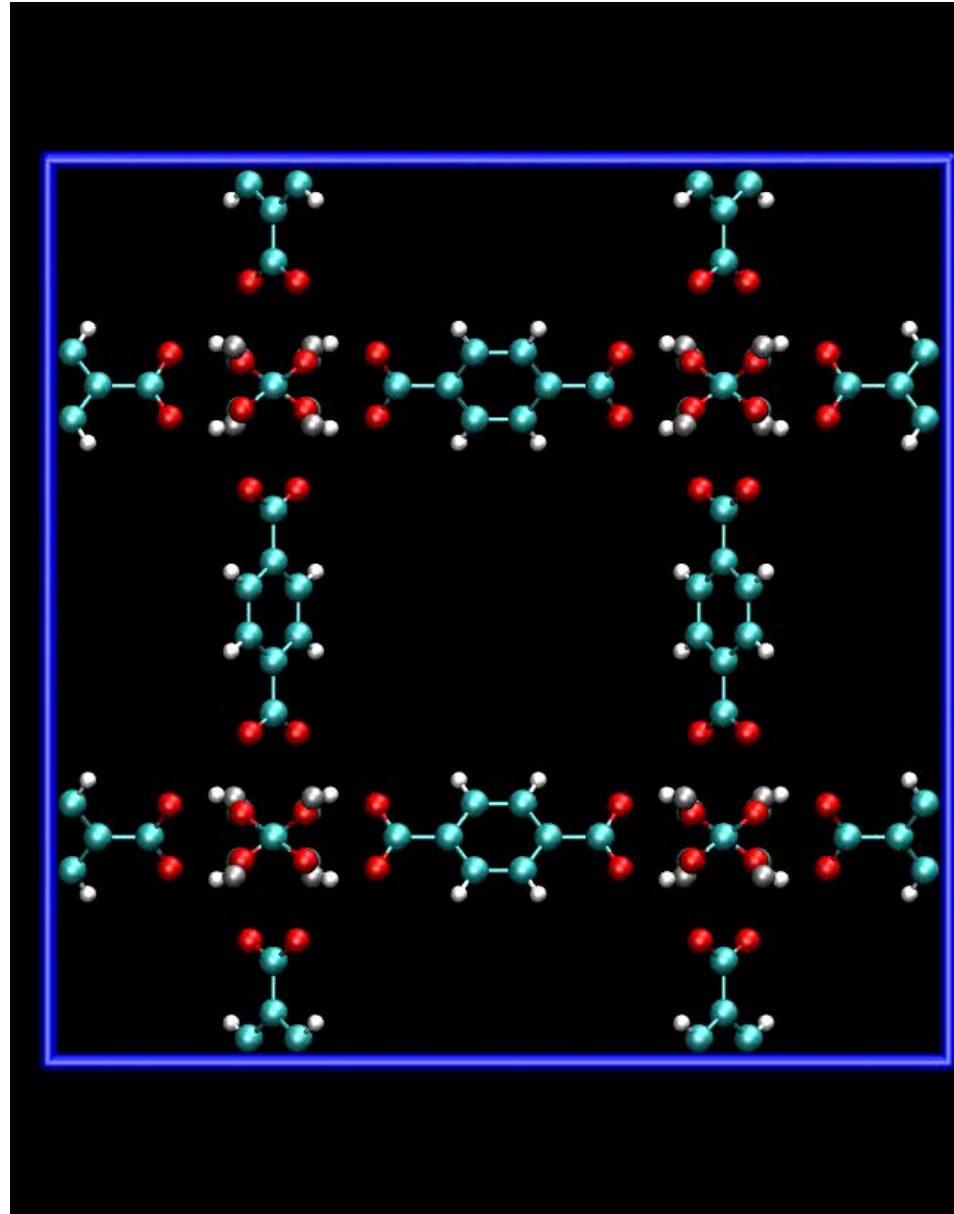
Podemos ver cómo se mueven las moléculas



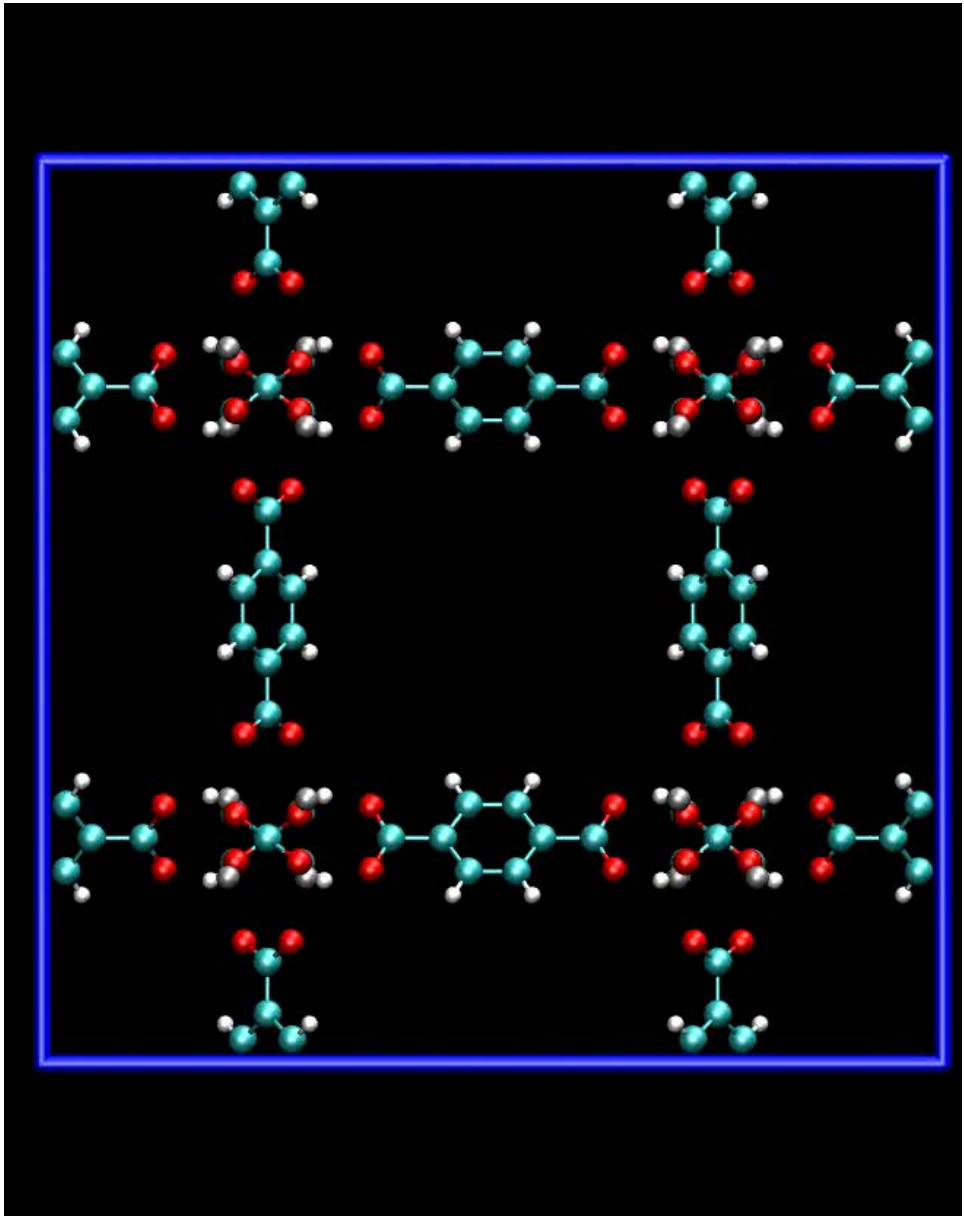
Podemos ver cómo se mueven las moléculas



Podemos ver cómo se mueven las moléculas



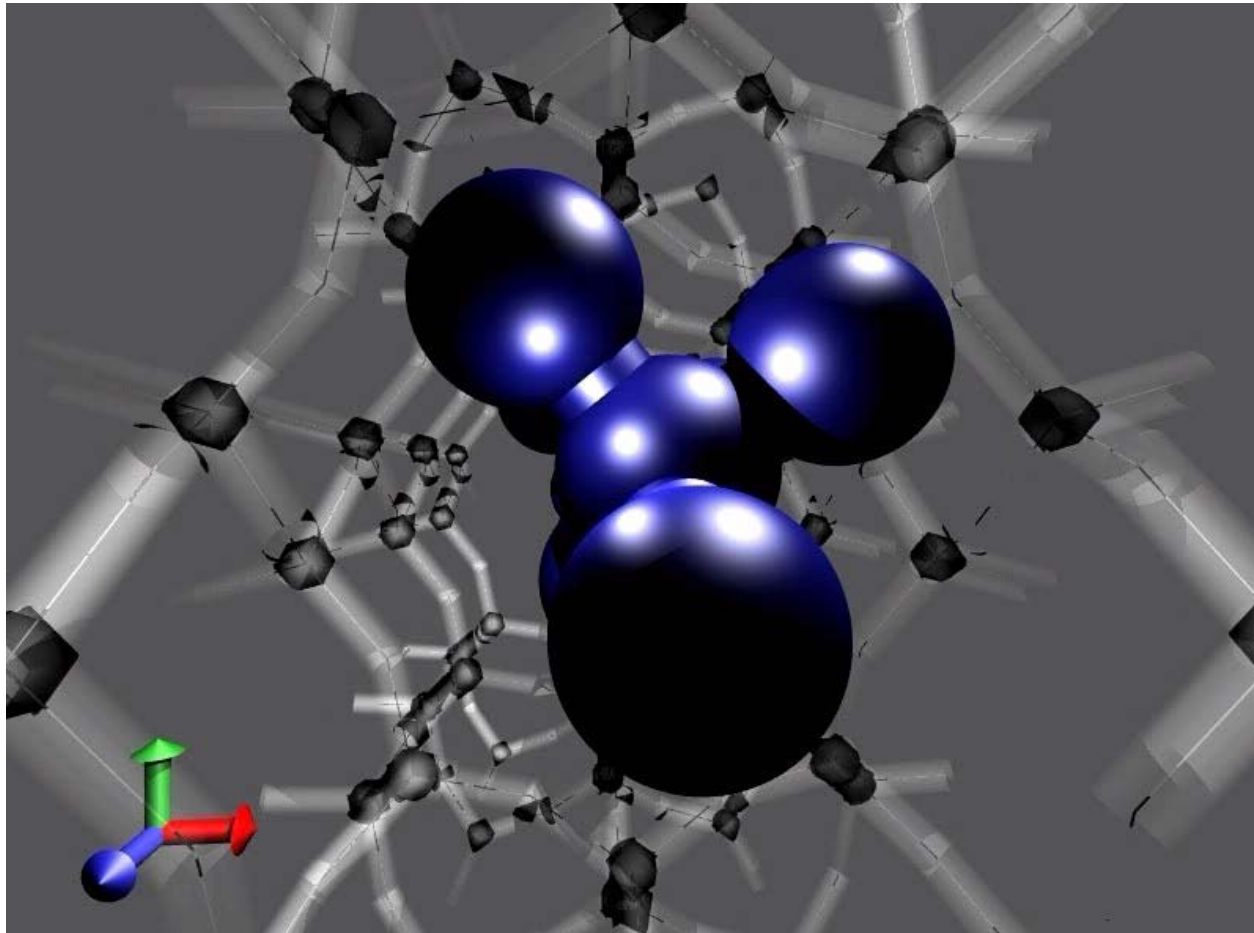
Podemos ver cómo se mueven las moléculas

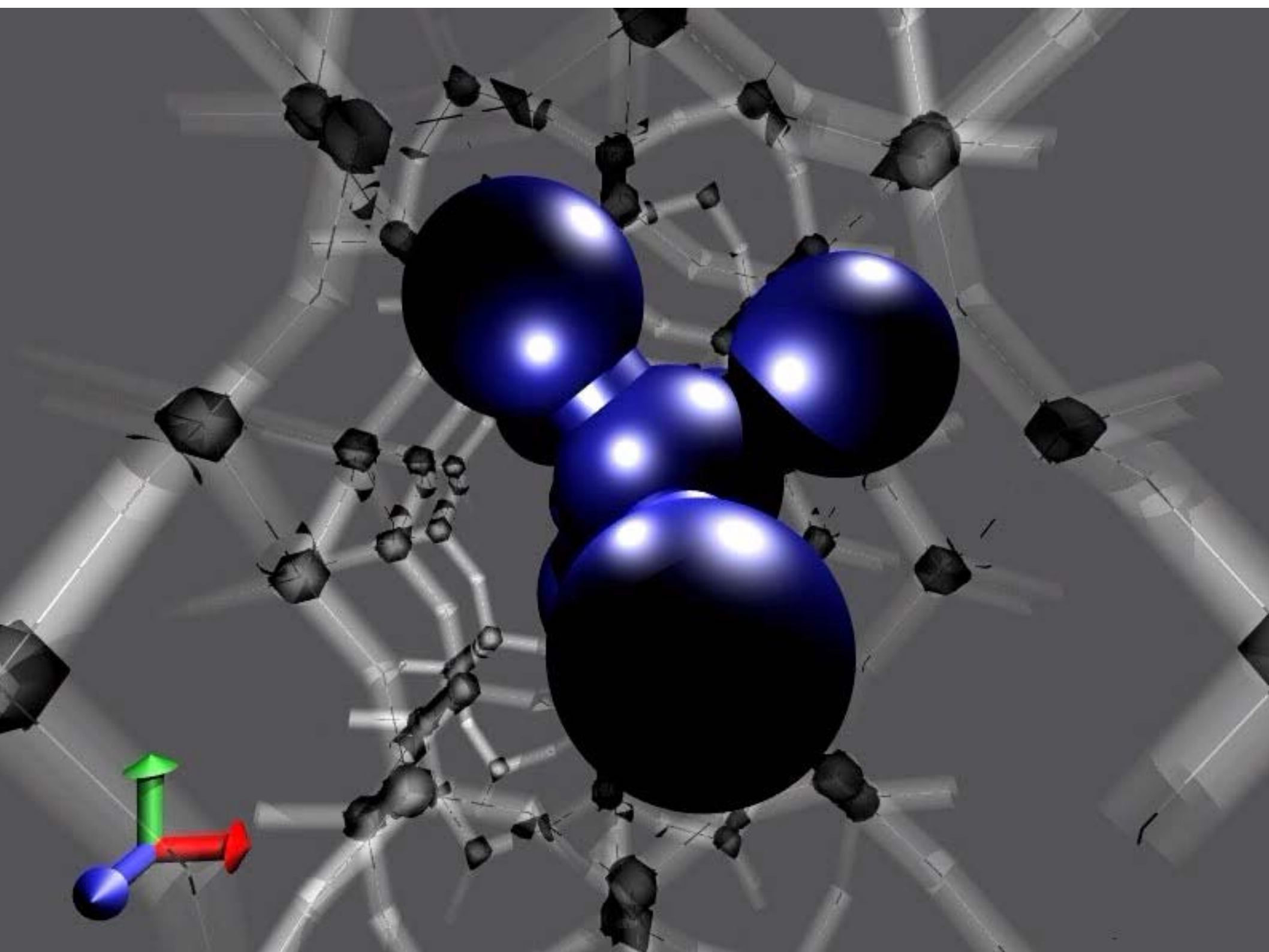


Podemos ver cómo se mueven las moléculas

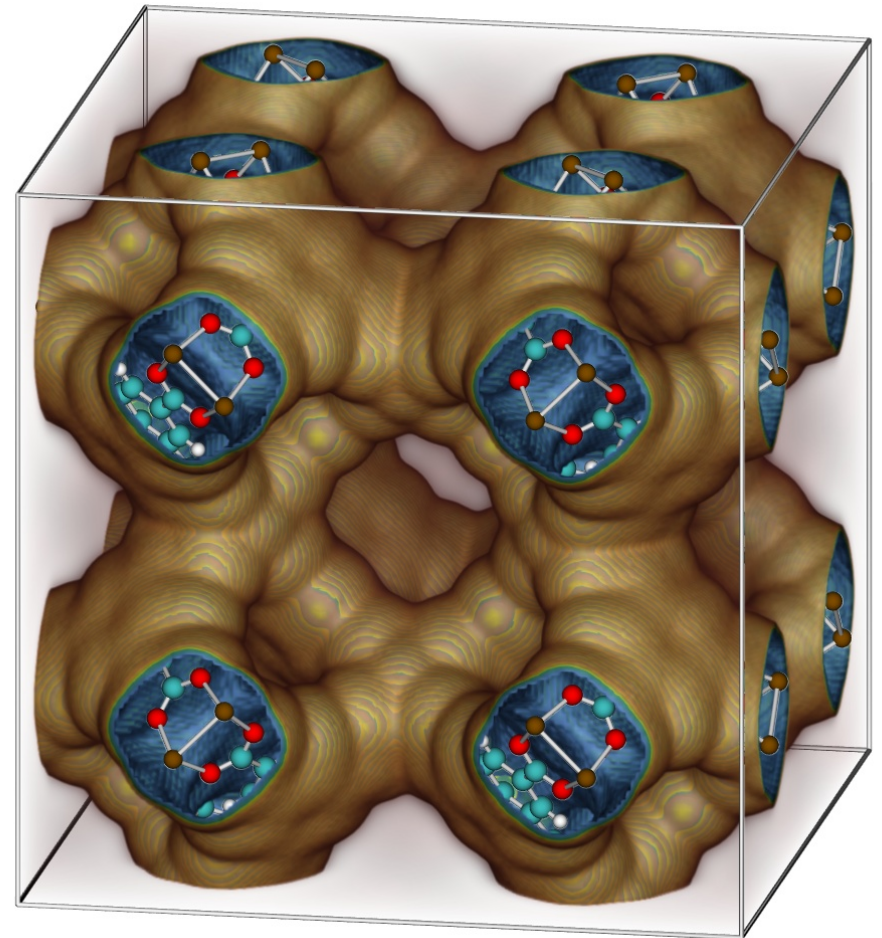
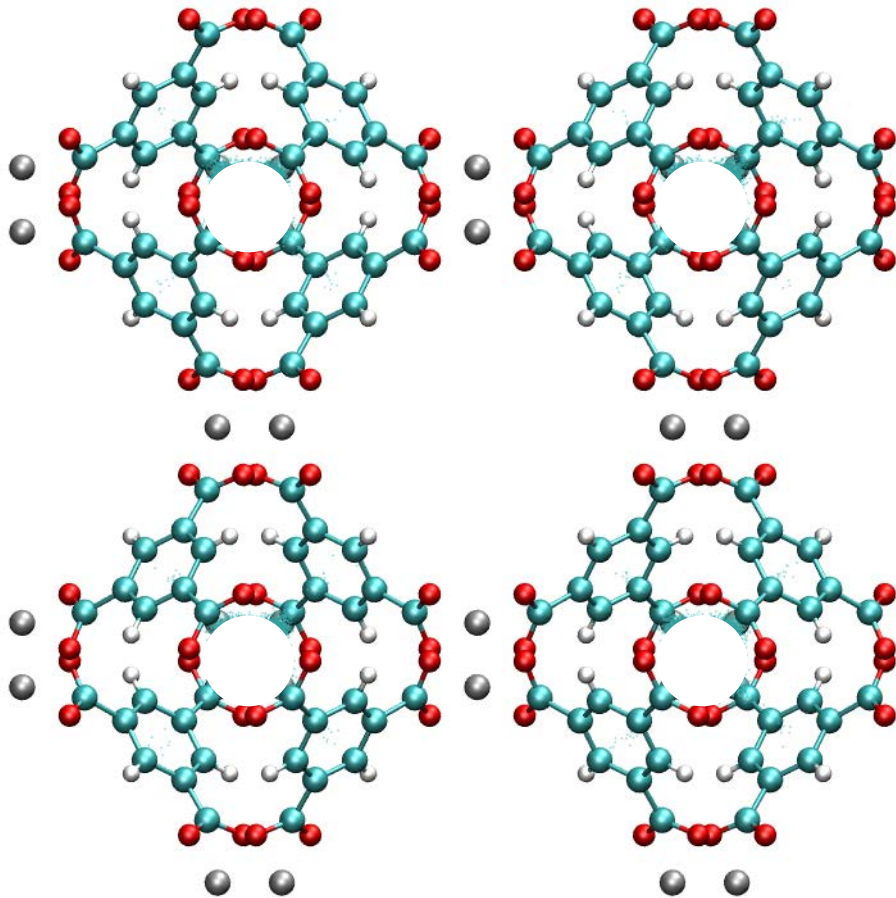


Movimiento de las moléculas en la estructura

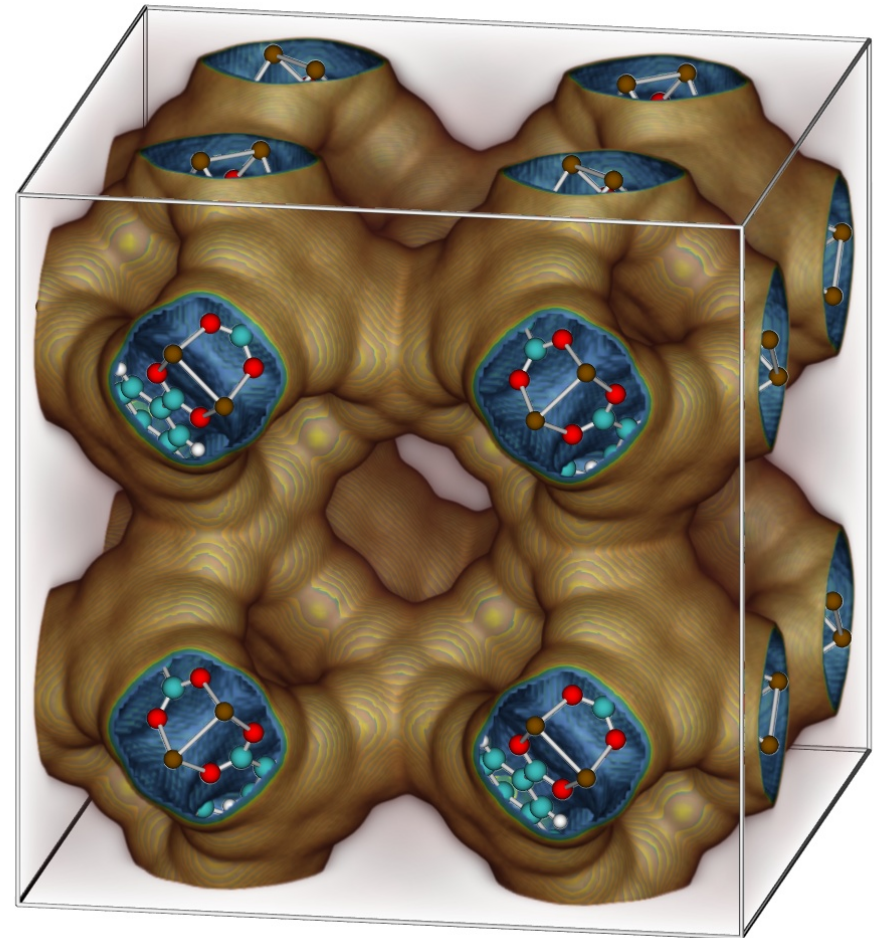
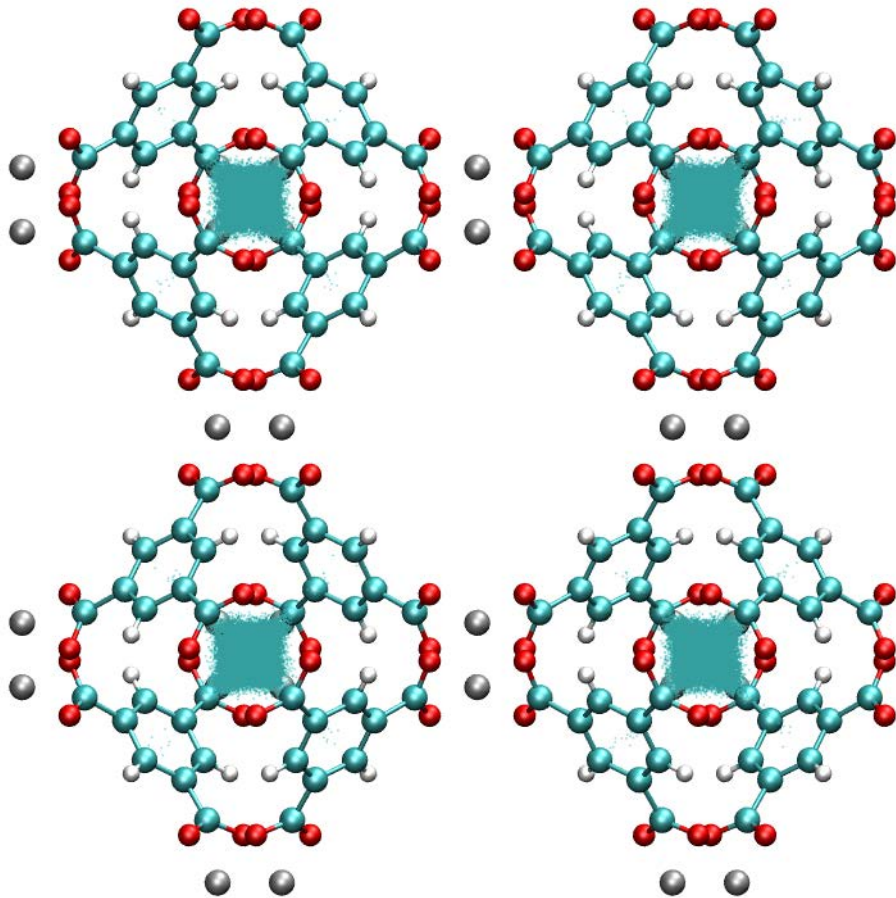




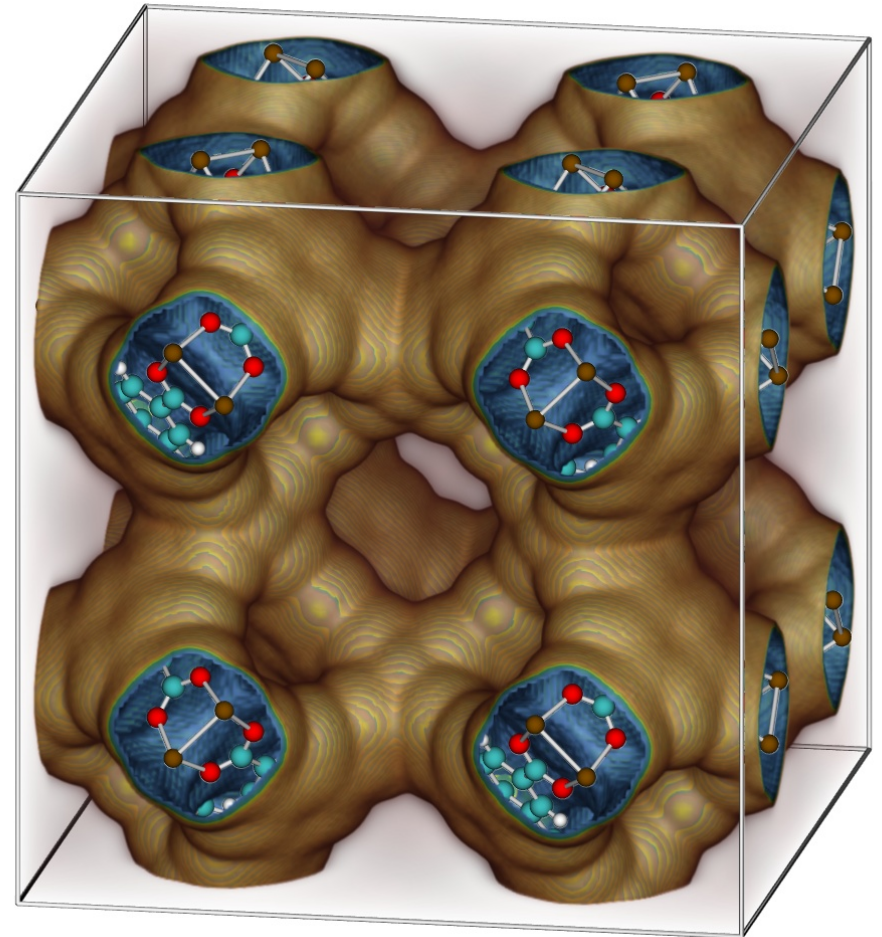
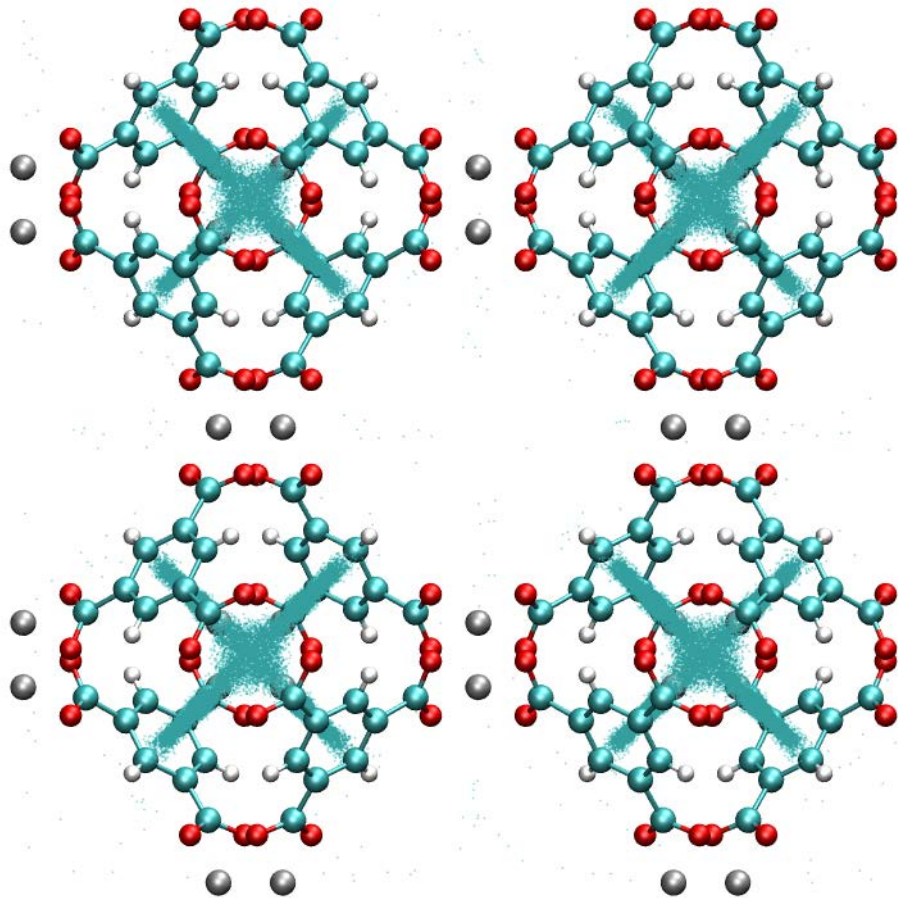
Podemos ver cómo se llena una estructura



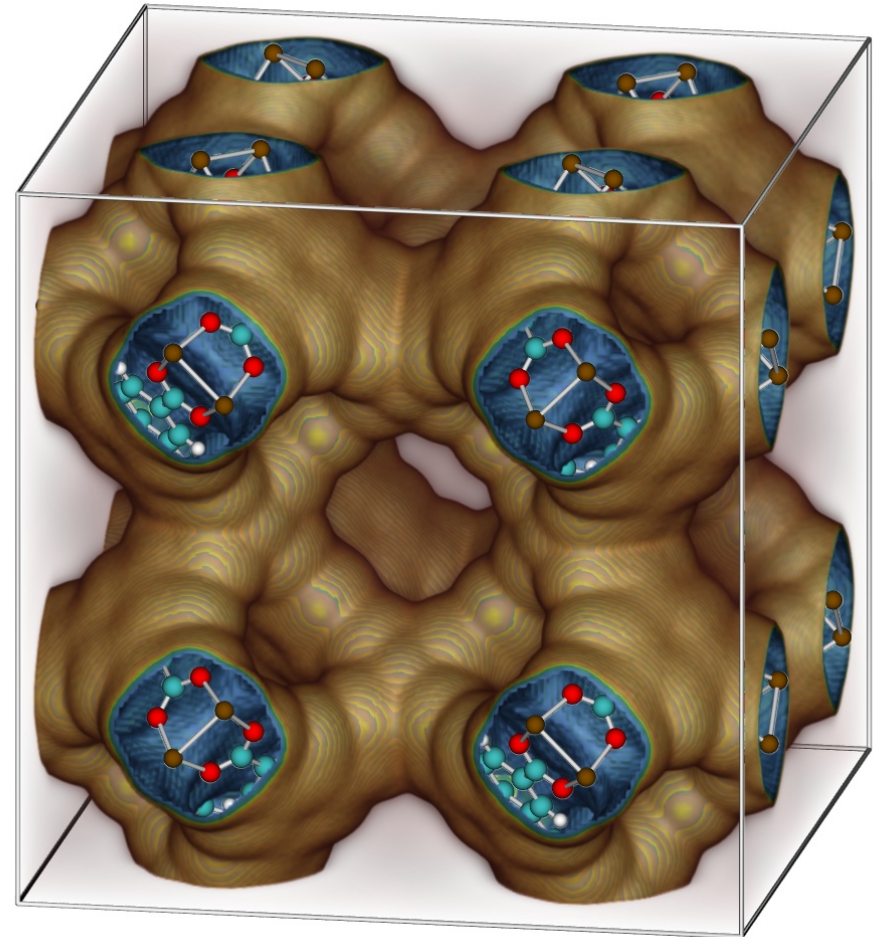
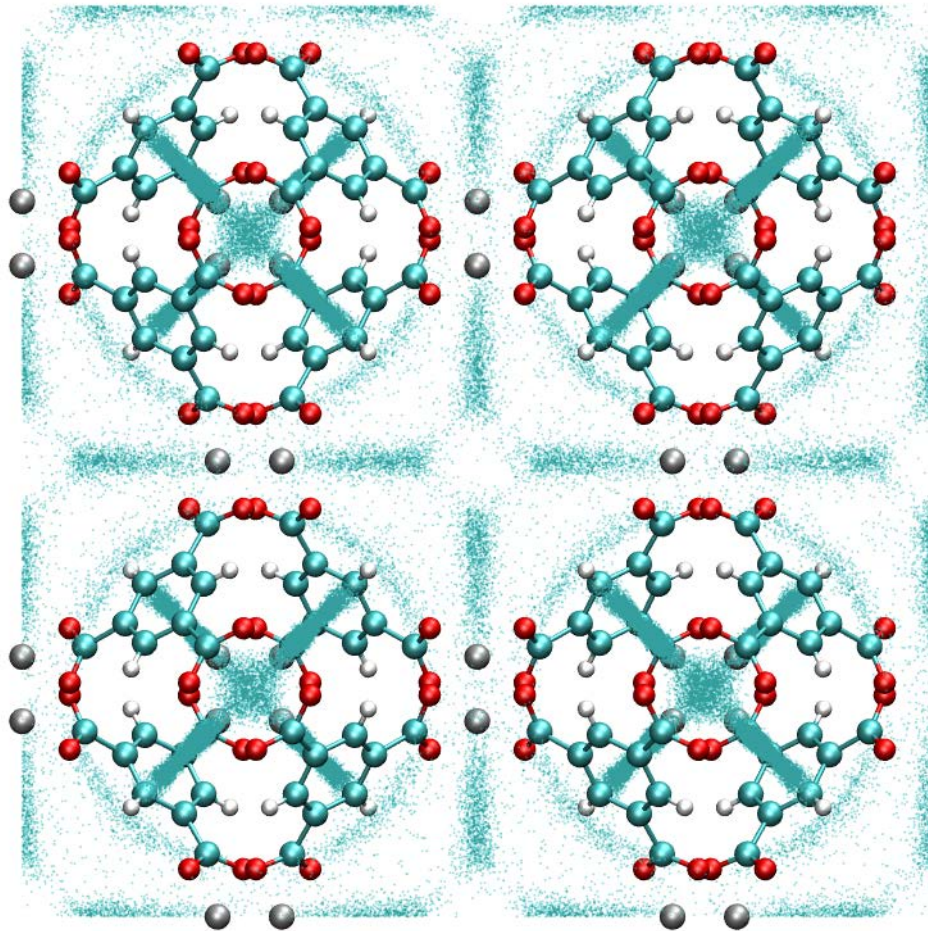
Podemos ver cómo se llena una estructura



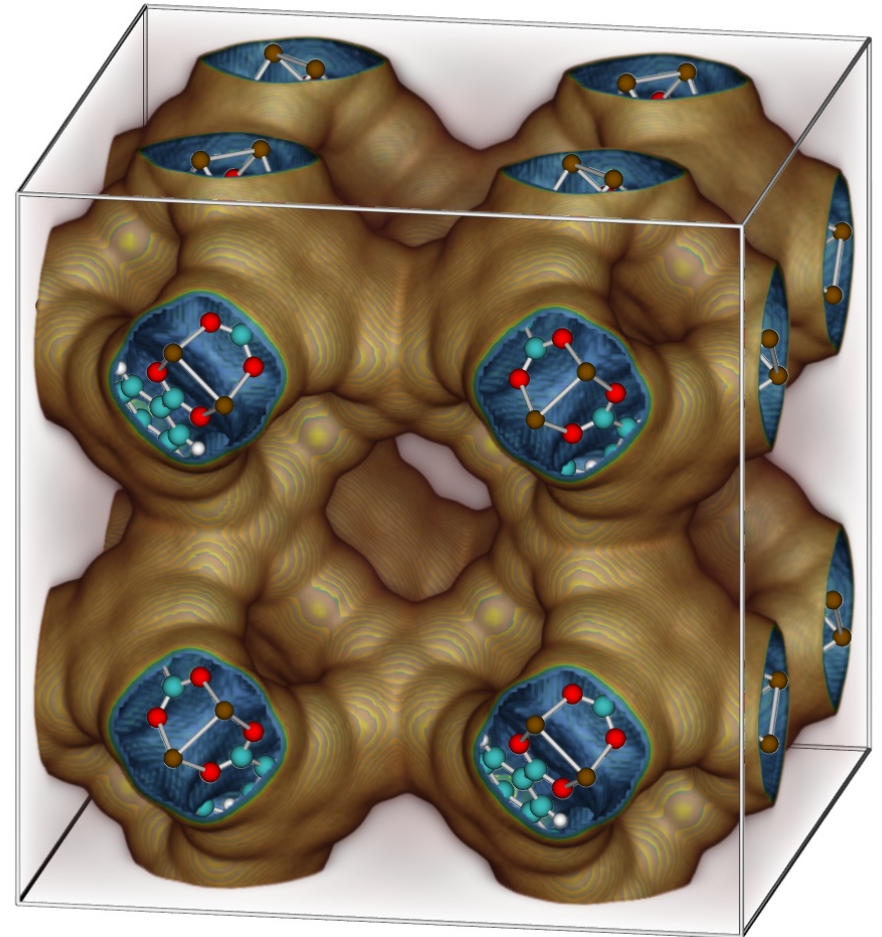
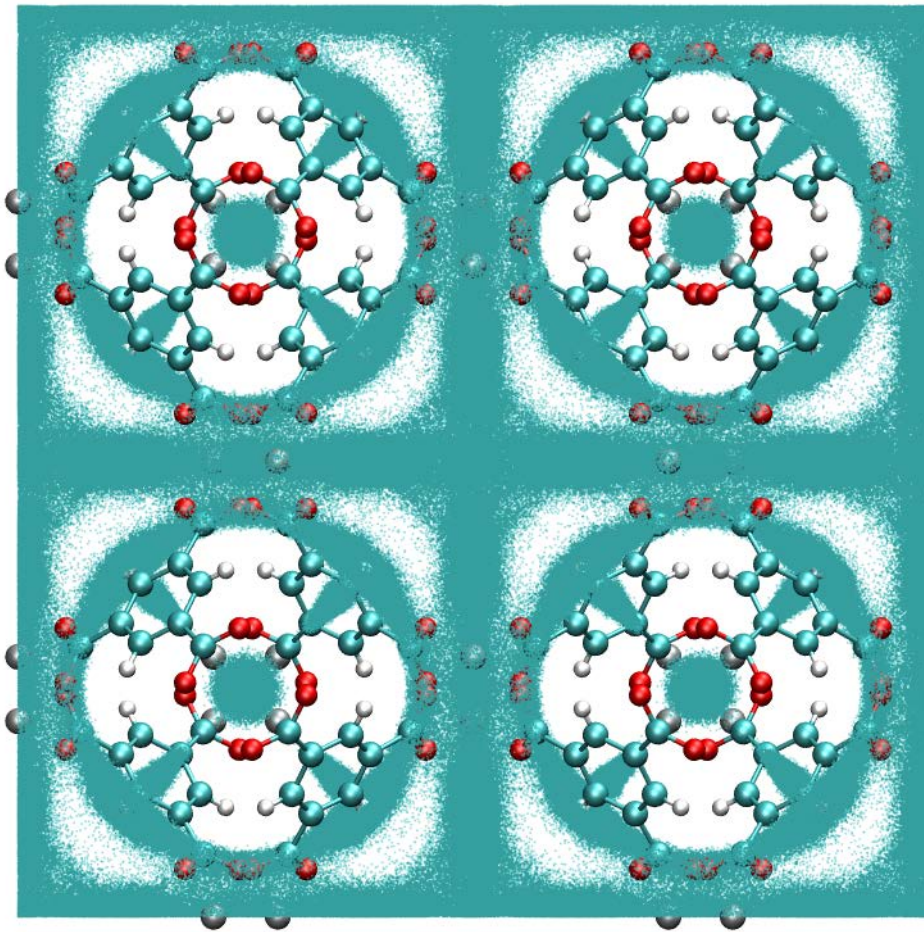
Podemos ver cómo se llena una estructura



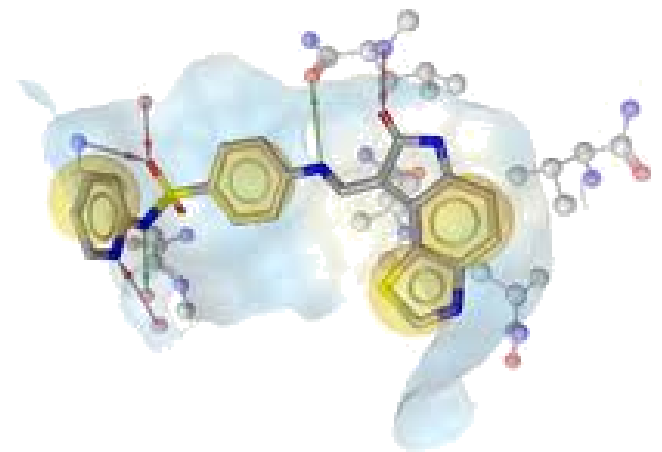
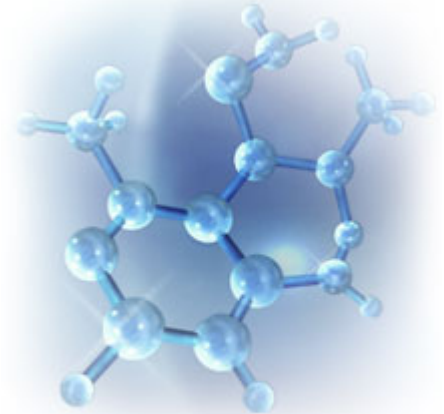
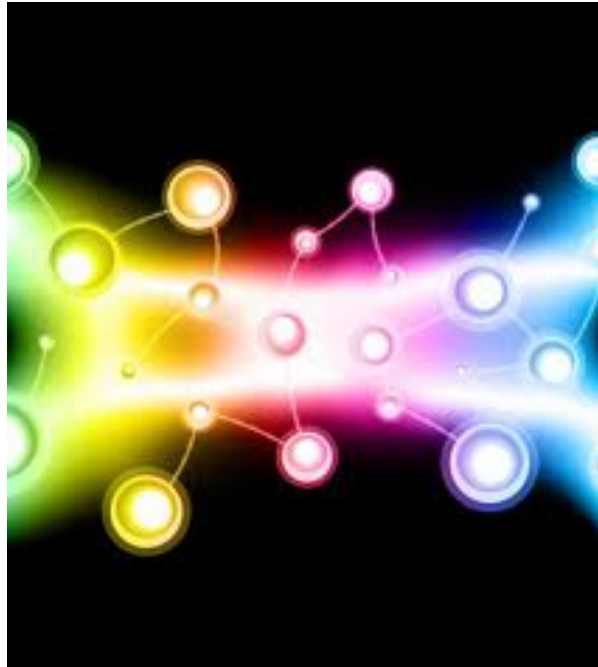
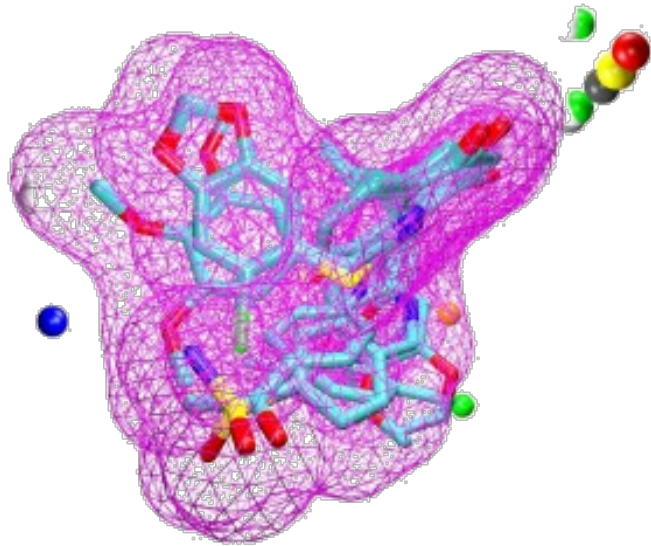
Podemos ver cómo se llena una estructura



Podemos ver cómo se llena una estructura



Diseño de moléculas “al gusto”





Revista de Química de la
Universidad Pablo de Olavide

MoleQla en Dialnet, Facebook, Twitter,
aplicaciones móvil par Android y Iphone,
Blog, email (moleqla@upo.es)....

ISSN: 2173-0903

<http://www.upo.es/moleqla/>

