

# Desarrollo de sistemas autoorganizados con propiedades físicas mejoradas y polímeros para aplicaciones sostenibles en catálisis y separación de gases: de moléculas a materiales

## Objetivo del proyecto

*Diseño racional de nuevos materiales moleculares con comportamiento de cristal líquido.*

## Participantes del proyecto

Universidad de Valladolid, [www.uva.es](http://www.uva.es)

SCAYLE, Supercomputación Castilla y León, [www.scayle.es](http://www.scayle.es)

## Periodo de ejecución

Desde el año **2021** al **2024**.

## Financiación del proyecto

Convocatoria de financiación que respalda el proyecto. Agencia Estatal de Investigación, Ministerio de Ciencia e Innovación.

## Funciones de SCAYLE

El uso de los recursos computacionales está destinado a la caracterización a nivel molecular de nuevos materiales moleculares los cuales nos permitirá establecer relaciones estructura-propiedad, centrándonos fundamentalmente en obtener información acerca de su estructura supramolecular, y como ésta se puede utilizar para modular otras propiedades, como por ejemplo las propiedades de absorción / emisión de luz o el transporte de carga. Todo esto se conseguirá a través de la aplicación de métodos teóricos, principalmente aquellos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) y dinámica molecular.

## Líder del proyecto

Grupo de Investigación de Cristales Líquidos y nuevos Materiales, perteneciente al Instituto Universitario Centro de Innovación en Química y Materiales Avanzados (CINQUIMA) de la Universidad de Valladolid.

Una de las líneas principales de investigación del grupo se centra en la síntesis, diseño y caracterización de materiales moleculares, principalmente enfocados en los cristales líquidos y, más específicamente, en los metalomesógenos: compuestos metálicos que exhiben comportamiento de cristal líquido. En lo que respecta al diseño y caracterización de nuevos materiales moleculares, buscamos obtener un mejor entendimiento de las relaciones estructura-propiedad que nos permitan preparar materiales con propiedades concretas mediante el uso de métodos de química computacional.

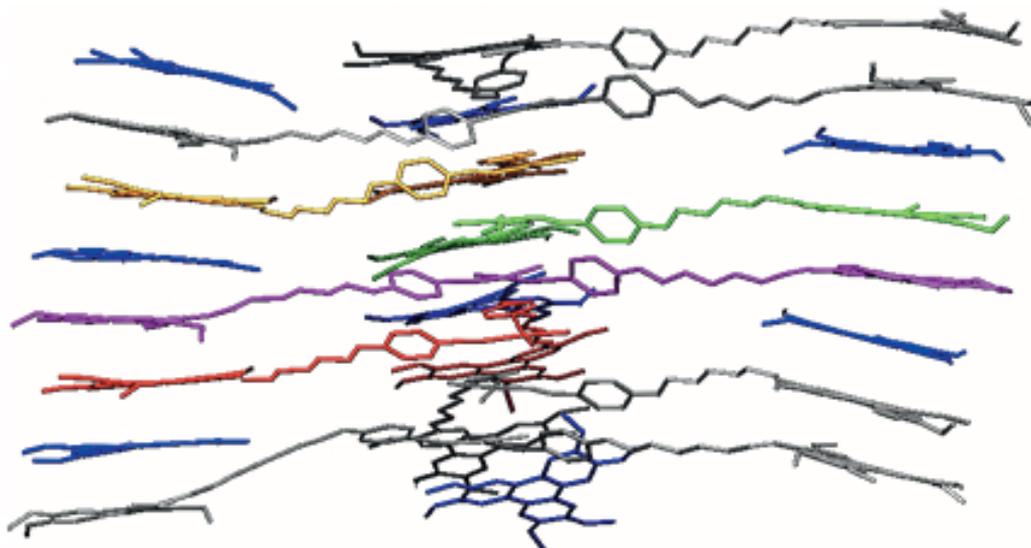


Referencia PID2020-118547GB-I00

## Justificación del proyecto

En el marco de este proyecto, el uso de recursos computacionales se destina a la caracterización a nivel molecular de nuevos materiales moleculares. Esto incluye moléculas basadas en complejos de metales de transición que presentan un comportamiento de cristal líquido. Nos enfocamos en obtener información sobre su estructura supramolecular y su influencia en propiedades de interés, tales como la absorción de luz, la

luminiscencia o el transporte de carga. Todo esto se logrará mediante la aplicación de métodos teóricos, principalmente aquellos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) y la dinámica molecular. Debido a la naturaleza de los sistemas en estudio, los métodos empleados deben ser capaces de describir tanto interacciones no covalentes como interacciones entre metales, a la vez que son adecuados para estudiar sistemas con varios cientos o miles de átomos.



Modelo supramolecular de uno de los metalomesógenos de Pt estudiados el cual describe la estructura columnar de la mesofase.