

Resumen

El objetivo fundamental de este proyecto es promover la formación del “Primer GRID Teórico-Experimental de Laboratorios Compartidos en Ciencias de Materiales” basándonos en el desarrollo de investigaciones conjuntas con impacto en el sector energético y en la industria petrolera nacional. Los problemas a resolver involucran la síntesis y caracterización estructural de materiales del tipo de los dicalcogenuros de la especie MQ_2 , como son el MoS_2 y el WS_2 entre otros debido a su importancia en los procesos de hidrosulfuración. Lo novedoso de esta forma de trabajar es que realizaremos nuestras sesiones de trabajo a través de una “conexión virtual” usando Internet 2 para manipular los equipos de caracterización. También exploraremos la importancia de hacer un grids de sesiones teóricas de cálculo utilizando los módulos DMol3, y CASTEP del Materials Studio. Nuestras sesiones de trabajo también servirán para el entrenamiento “in-situ” de estudiantes de posgrado que trabajarán en el desarrollo de laboratorios virtuales para hacer la caracterización teórico-experimental de los materiales sintetizados.