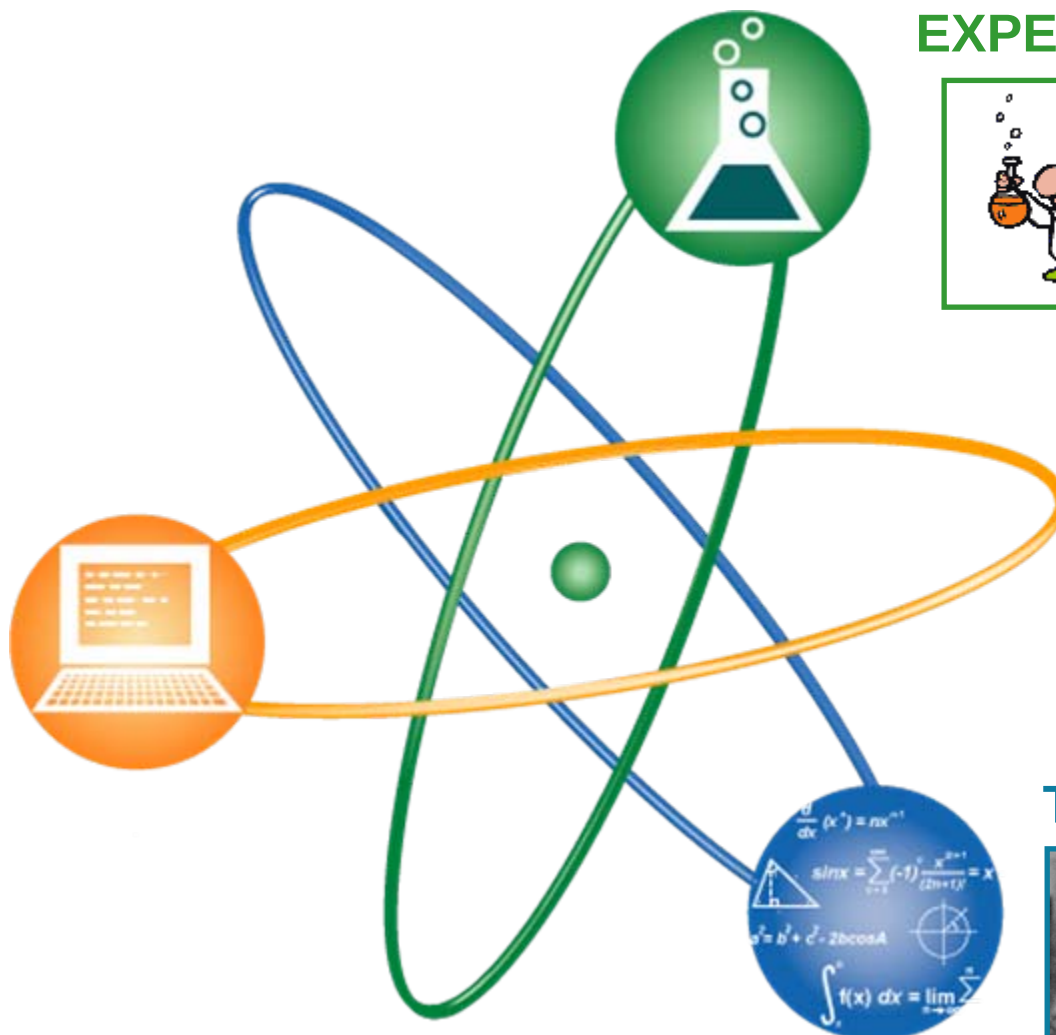




Laboratori de Química Computacional



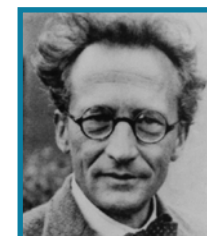
MODEL
 SIMULACIÓ



EXPERIMENT



TEORIA





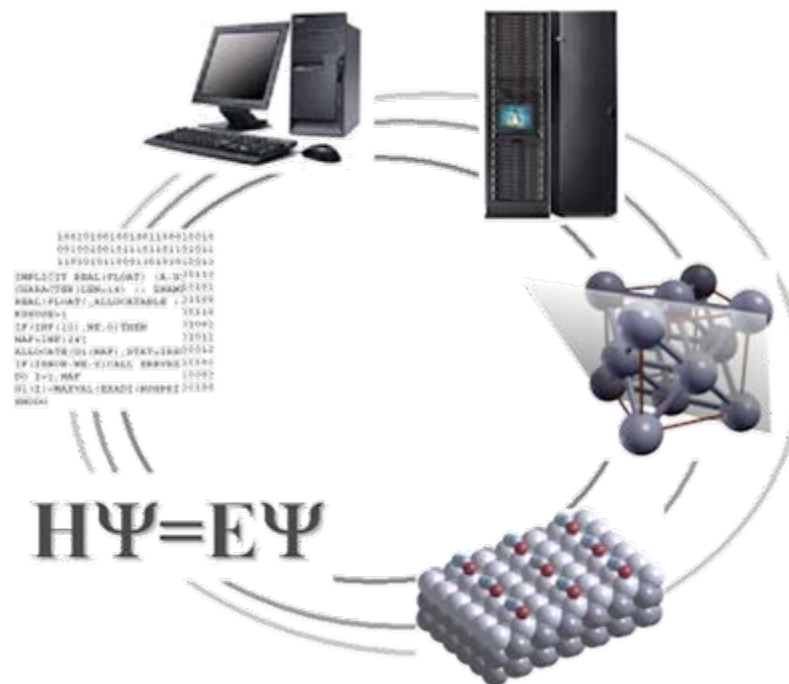
Avantatges de la Simulació

- **Validació de la teoria i del model.**
- **Cost** és reduït comparat amb la realització d'experiments.
- **Seguretat:** no toxines, no residus, materials inestables...
- **Precisió** és usualment alta.
- **Comprensió de la realitat.**
- **Disseny de nous materials.**



Estructura de la Matèria

Electrons + Protons + Neutrons





KIMIK

94 Procesadors Intel Pentium IV 3.06Ghz

TECLA

48 Procesadors Intel Pentium IV 3.6Ghz

INFI

11 Procesadors Intel Xeon

Doble Nucli 3.06Ghz





CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ
DE CATALUNYA



SGI Altix 3700 Bx2

128 Procesadors Itanium2

Doble Nucli 1.6Ghz

384GB Memòria i 6TB de Disc

HP CP4000

33 Procesadors AMD64 Opteron

Doble Nucli 2,2Ghz

528GB Memòria i 9TB de Disc.





Mare Nostrum

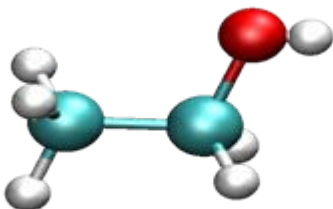
10240 Procesadors IBM Power
PC

4 Procesadors per placa 2.3 GHz
20TB Memòria i 370TB de Disc





Model Molecular



Etanol $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$

Refinament
Estructura
(Minima Energia)

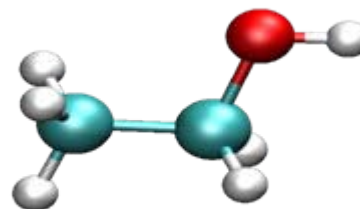


FOTO 3D

Caracterització

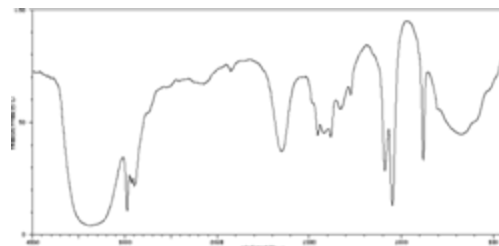
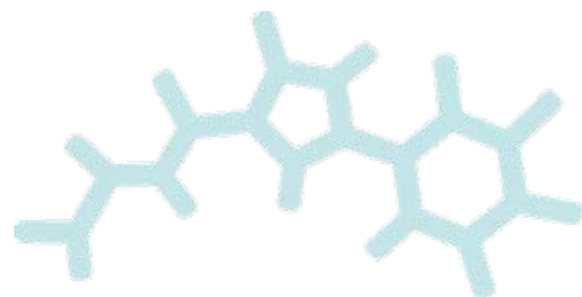


FOTO 2D

IR, RMN, UV-Vis

Simulació Reactivitat
Comportament Col·lectiu

Predicció de
Reactivitat i Propietats



ICIQ 

**Institut
Català
d'Investigació
Química**