

El grupo QTCMAT en el C³

J. Manuel Recio Alberto Otero Miguel A. Salvadó

Dpto. Química Física y Analítica

3^a Jornada del C³, Junio 2024

1 QTCMAT

2 MALTA

3 Previsiones de futuro

El grupo QTCMAT

Miembros:

- J. Manuel Recio (Catedrático - IP)
- Miguel Ángel Salvadó (Prof. Titular)
- Alberto Otero (Prof. Titular)
- Manuel Flórez Alonso (Prof. Titular)
- Ruth Franco (Prof. Titular)
- Pilar Pertierra (Prof. Titular)
- Ernesto José Blancas Jiménez (Pre-doc)

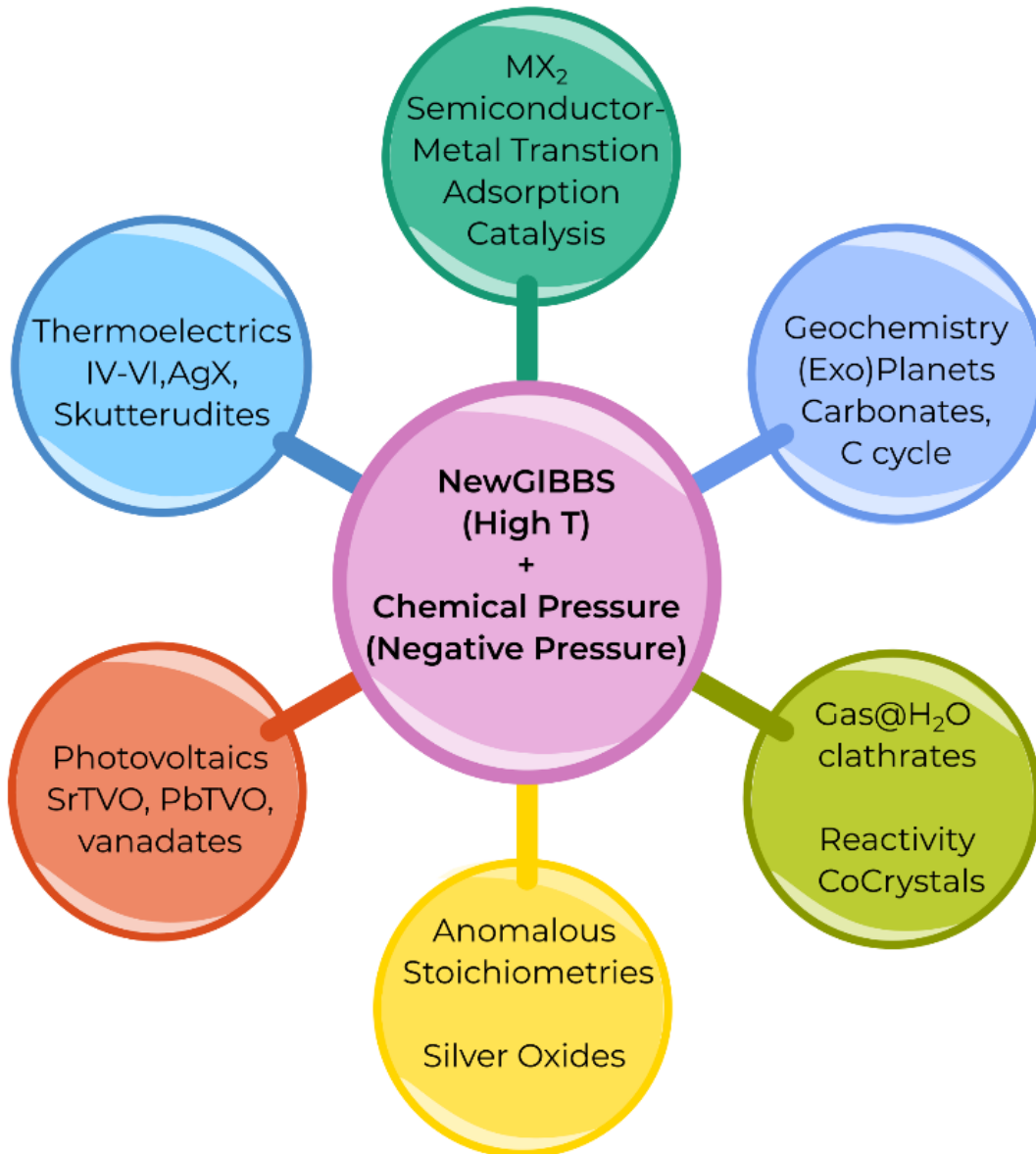
El consorcio MALTA

- El consorcio materia a alta presión (MALTA) es una agrupación interdisciplinar de 15 grupos de investigación españoles, entre los cuales se encuentra la Universidad de Oviedo, para explorar los diversos aspectos tecnológicos y científicos de las altas presiones.
- La red MALTA surgió de un proyecto Consolider del Gobierno de España (CSD2007-0045), liderado por José Manuel Recio (UniOvi) y Valentín García Baonza (Complutense), con 11 grupos de investigación españoles. En la actualidad, 15 grupos españoles y más de 100 investigadores integran el consorcio, que cuenta con gran cantidad de colaboraciones internacionales.

Investigación en QTCMAT

- Metodología: Estructura electrónica. Ecuaciones de estado. Predicciones estructurales. Presión química. Función de localización electrónica (ELF).
- Fenómenos: Transiciones inducidas por presión y temperatura. Curvas de tensión-deformación. Espectros Raman e IR de sólidos. Propiedades termodinámicas de sólidos. Estabilidad de los clatratos de hidratos de gas. Composición de (exo)planetas.
- Desarrollo de metodología y software para el tratamiento computacional de sólidos bajo presión.
- Aplicación de técnicas computacionales para la predicción del comportamiento microscópico (propiedades termodinámicas y de enlace) de materiales bajo condiciones extremas.
- Predicción de diagramas de fases de cristales bajo condiciones arbitrarias de presión y temperatura.

MECHANOCHEMISTRY UNDER CONTROLLED CONDITIONS OF PRESSURE: HIGH TEMPERATURES AND NEGATIVE PRESSURES



▪ Concepts and models in Materials Chemistry

- Anharmonicity
- Negative Pressure
- Crystal Structure Prediction
- Topology of E and Ψ based scalar functions

AI, Machine Learning

▪ Materials for Energy

- Photovoltaics
- Thermoelectrics
- Phase Change and Thermochemical Energy Storage Materials
- Gas Clathrates, Co-crystals
- Laminars, 2D, catalysis
- C-and Si-based minerals

THEORETICAL & COMPUTATIONAL CHEMISTRY OF MATERIALS



MATERIALS FOR ENERGY

- THERMOELECTRICS
- THERMOCHEMICAL
- BATTERIES
- SUPERCONDUCTORS

SUPERLUBRICANT
CARBON GRAPHITE

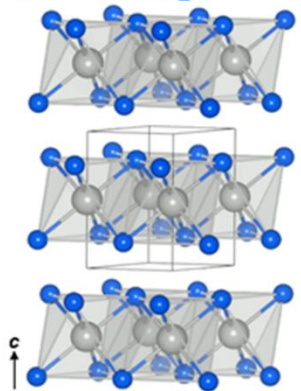
$\text{CO}_2 \leftrightarrow \text{CH}_4$
REPLACEMENT IN
CLATHRATES

MATERIALS FOR ENERGY

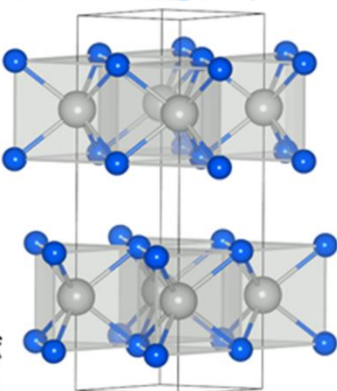
■ SUPERCONDUCTORS

New MX₂ crystalline polymorphs found thanks to UNIOVI-SUNY International Colaboration

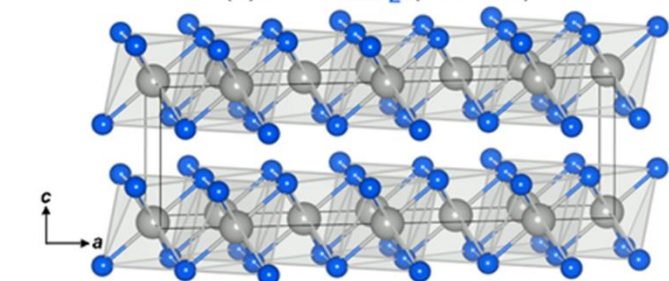
(a) 1T-HfSe₂ (P3m1)



(b) HP-HfSe₂ (P63/mmc)

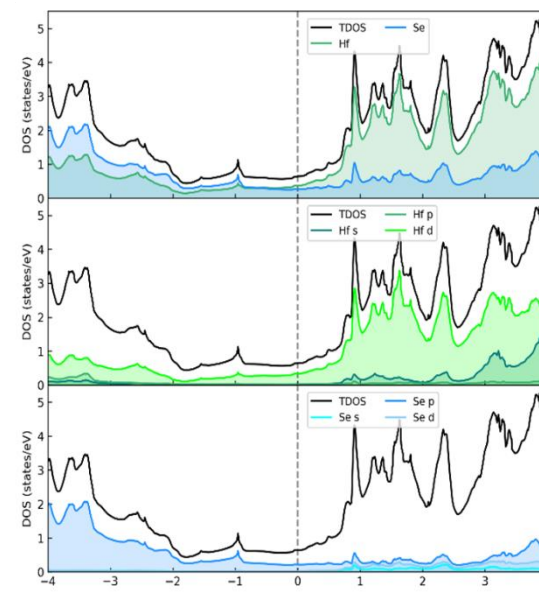
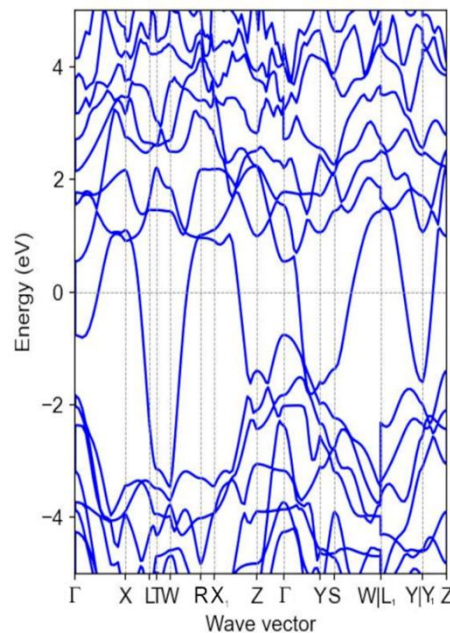
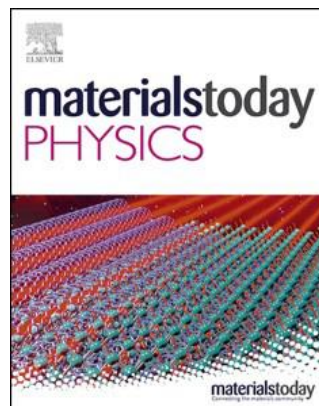


(c) HP-HfSe₂ (C2/m-T)



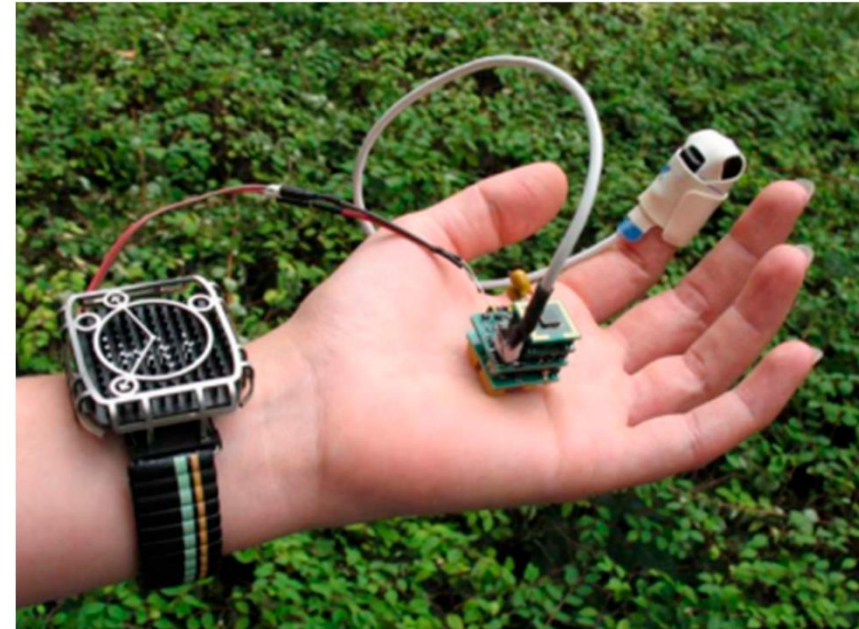
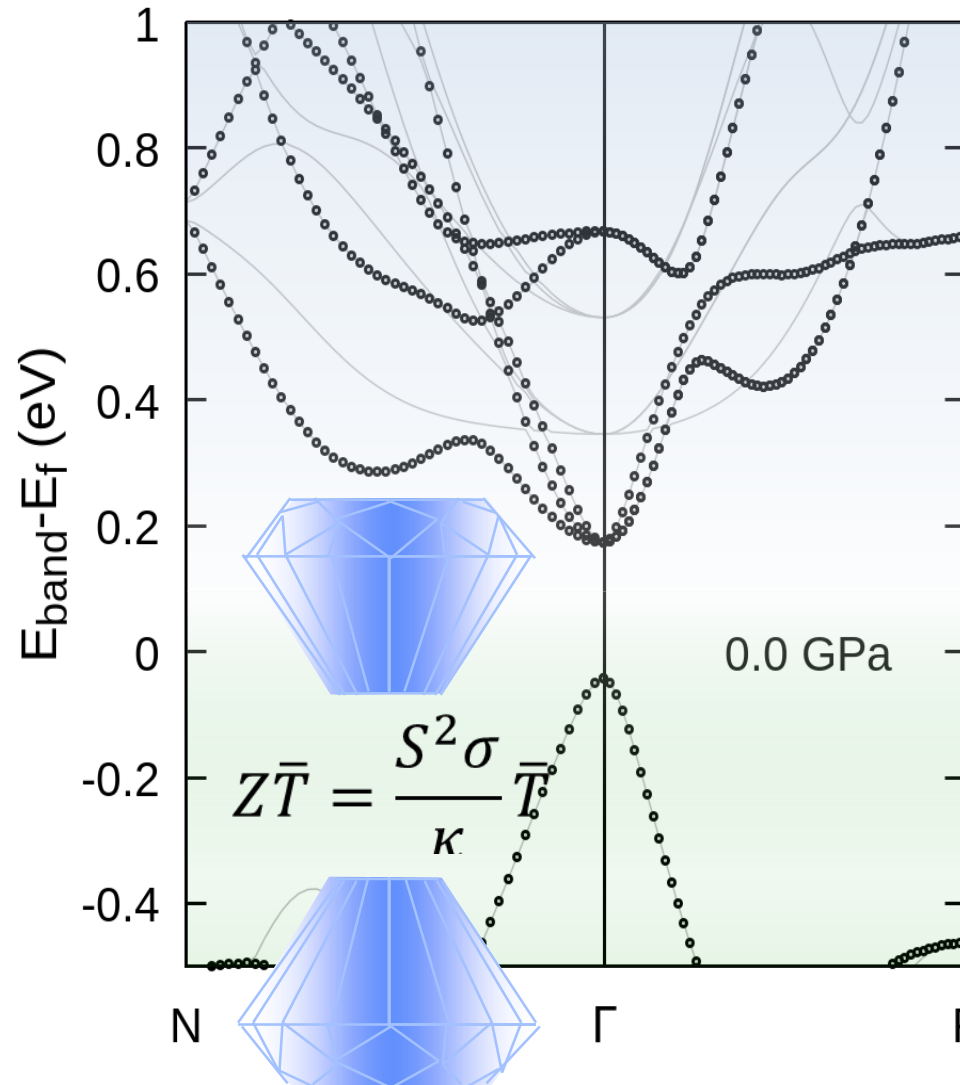
(d) HP-HfSe₂ (Immm)

(e) HP-HfSe₂ (C2/m)



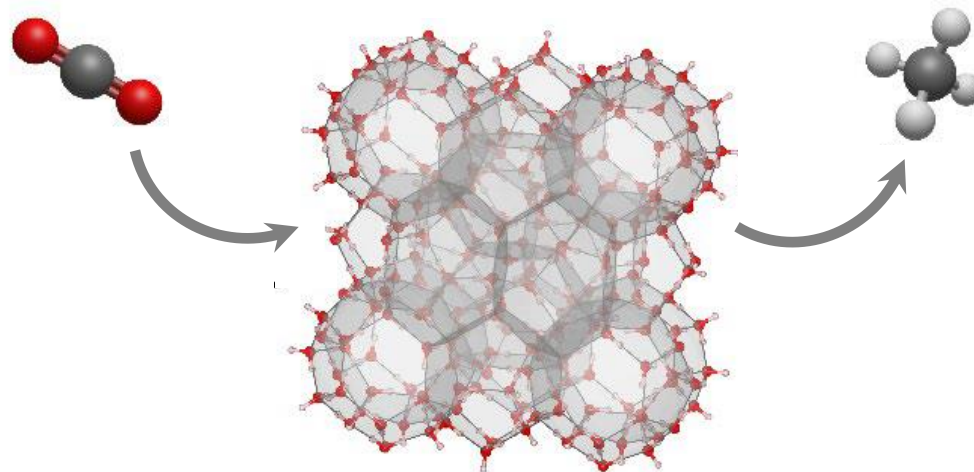
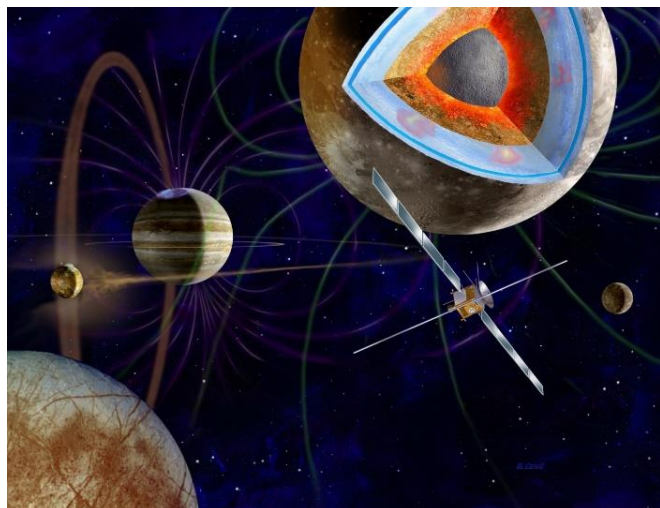
Pressure and Bonding in CoSb_3

HEAT AND WASTED ENERGY
CONVERTED INTO
ELECTRICITY



On the finger, there is a commercial oximeter, in the middle of the hand a wireless module, and on the wrist a P watch-style **thermoelectric** generator.

CO₂ ↔ CH₄ REPLACEMENT IN CLATHRATES



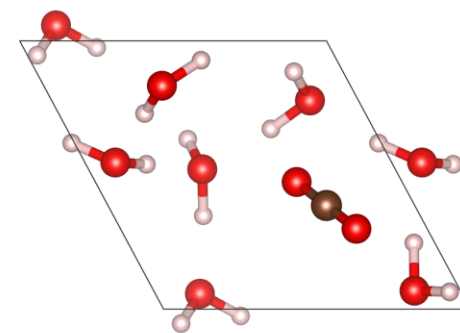
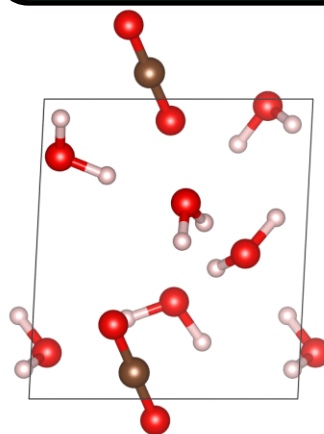
Gas Storage

Energy Source

Climate Change

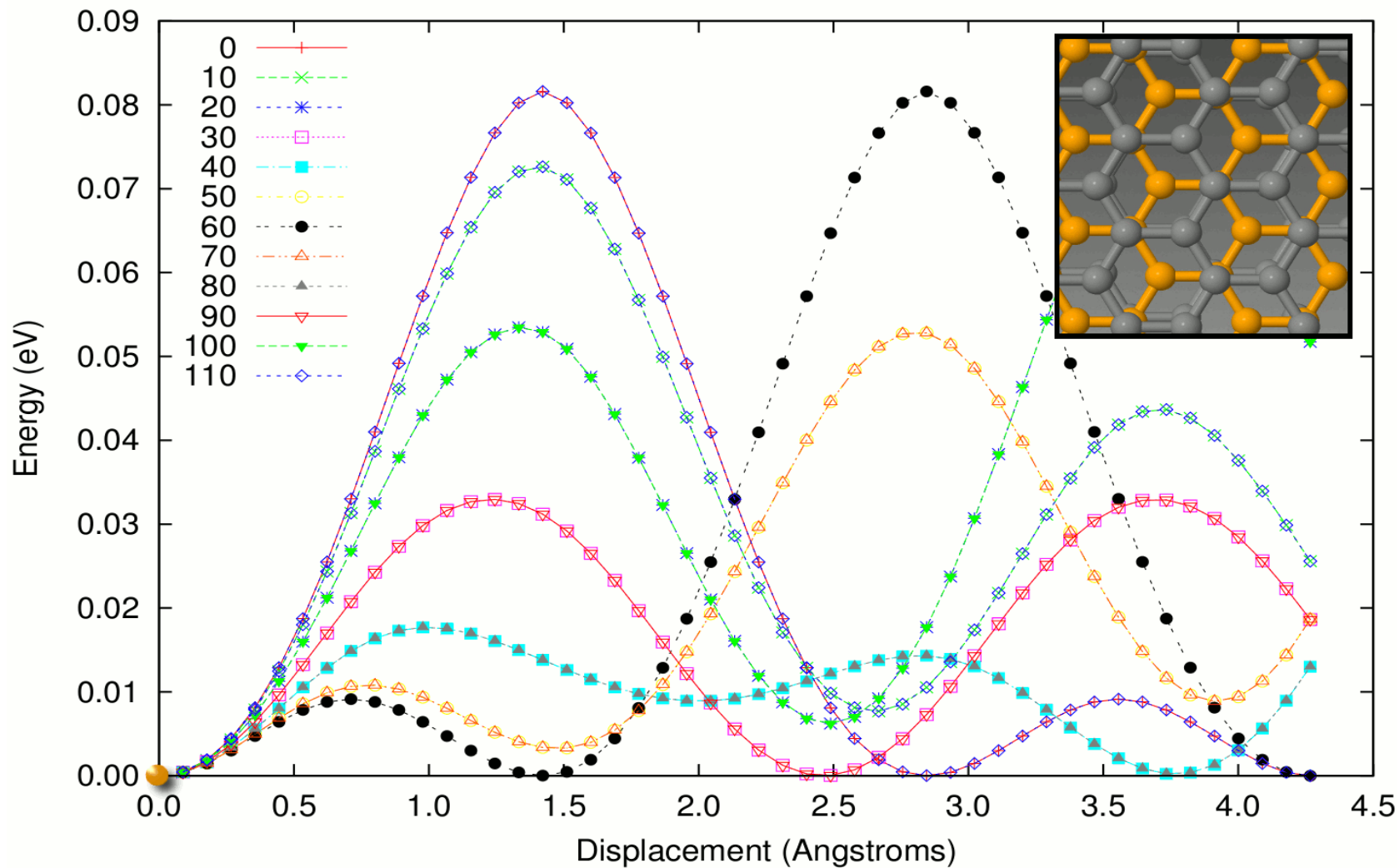
Planetary Science

Carbon Neutral Energy Source



C³ – CARBON GRAPHITE SUPERLUBRICANT- C³

$\sigma_z = 0$ GPa



Clúster de computación de QTCMAT (Mieres)

Características de los nodos QTCMAT en Mieres:

- 4 nodos de computación con procesadores Intel Xeon 6248R e Intel Xeon 8362. Total de 208 cores. 4 GPU NVIDIA A30
- 10 nodos de computación con procesadores Intel Xeon Silver, Intel Xeon Platinum y AMD EPYC 9734
- Accesibles a través de las IP:
156.35.212.81 (agua.c3.uniovi.es)
156.35.212.83 (metano.c3.uniovi.es)
156.35.212.85 (amoniaco.c3.uniovi.es)
- Configurados para administración remota
- 6.4 TB de almacenamiento total.
- Sistema de colas TORQUE/MAUI. Sistemas operativos CentOS 7.9 y Ubuntu Server 22.04, operando en modo headless.
- Sistema de colas SLURM con SO debian.

Clúster de computación de MALTA (Oviedo)

El clúster de computación principal de MALTA se encuentra en la Facultad de Química, primera planta. Constituye el principal recurso computacional de la red MALTA, y es utilizado regularmente por varios de los grupos integrantes, y particularmente por el grupo de Oviedo.

Características:

- Accesible a través de la dirección malta.quimica.uniovi.es.
- 72 nodos de computación con 8 o 12 cores (Intel Xeon) por nodo. Total de 720 cores.
- Unidad de almacenamiento de 6TB, con RAID 1.
- Aproximadamente 70 usuarios y más de 200,000 trabajos completados.
- Sistema de colas LoadLeveler (LL). Sistema operativo RedHat.
- Licencias de software: VASP, WIEN2k, CRYSTAL17.

Clúster de computación de MALTA (Mieres)

Los nodos del clúster de Oviedo de MALTA son incompatibles con los racks de Mieres. No obstante, los nodos nuevos de la red MALTA sí se están trasladando al clúster de Mieres.

Características de los nodos MALTA en Mieres:

- Accesible a través de la IP: 156.35.212.91
- 4 nodos de computación con 20 cores (Intel Xeon Silver 4210R) por nodo. Total de 80 cores.
- 1TB de almacenamiento, con RAID 0 y espacio de /scratch.
- Sistema de colas SLURM. Sistema operativo debian, operando en modo headless.

Previsiones de futuro

QTCMAT

- Adquisición de futuros nodos de cálculo con una inversión prevista de aprox. 60000 € en los próximos dos años.
- Completar la unificación de nuestros nodos en un mismo armario.
- Estudiar un posible traslado de equipos actualmente en la Facultad de Química.

MALTA

- Inversión prevista en los próximos años aprox. 10000 €.
- Pendiente de la nueva convocatoria de redes de excelencia.
- Estudiar un posible traslado de equipos actualmente en la Facultad de Química.

Gracias a todos por la atención !