

Hesaplama malzeme bilimi grubu yeni malzemelerin tasarımı ve malzemelerin performansının optimizasyonuna yardım etmek için bilgisayar simülasyonlarının kullanımı ile ilgilenir.

Grubumuz odaklandığı konular:

Yarı-metallic malzemelerin elektronik ve manyetik özellikleri

Ferromanyetik-Ferrimanyetik-Antiferromagnetik Yarıiletkenlerin modellenmesi

Termoelektrik malzemelerin bilgisayar modellemesi

BN nanotüplerde hidrojen depolanması