



Instituto Universitario de Investigación
**Biocomputación y Física
de Sistemas Complejos**
Universidad Zaragoza

Alberto Castro Barrigón

Estudió Física en la Universidad de Valladolid, en dónde realizó su tesis doctoral en la modelización de materiales y moléculas con métodos *ab initio*, en particular la teoría de funcionales de la densidad (DFT). Seguidamente, realizó estancias posdoctorales en la Universidad Libre de Berlín y en el Instituto Fritz-Haber de la Sociedad Max-Planck. En 2009, se incorporó al BIFI tras ser contratado por la Fundación ARAID del Gobierno de Aragón. En julio de 2024, se trasladó a la Universidad de Valladolid, al departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica.



Perfil investigador

Actualmente, es investigador R4 y estudia el desarrollo de métodos teóricos / computacionales para la modelización de materiales o sistemas atómicos y moleculares. Ha trabajado en los llamados “métodos de primeros principios” o “ab initio”, que tratan de construir los módulos a partir de las leyes básicas de la naturaleza, sin recurrir a datos empíricos. Le interesa la interacción entre campos externos y sistemas materiales, como la predicción de las propiedades ópticas de materiales o moléculas, estudiando la interacción de luz (ordinaria o láser).

Importancia de su investigación

La modelización computacional se usa en la Física de materiales y la Química, para interpretar datos experimentales que guían la experimentación futura, y más frecuentemente, sustituir al experimento mismo cuando el coste sea alto. Esto es debido a la mejora de los métodos teóricos, mejora de los algoritmos y los avances de los sistemas de cómputo. Su investigación versa, en especial, el desarrollo de metodologías computacionales que permiten hacer “espectroscopia teórica”. Esto proporciona a la industria la oportunidad de sustituir caras pruebas experimentales por simulaciones computacionales.

