

# OFERTA DE PROYECTO DE TESIS DOCTORAL, AYUDAS PARA LA FORMACIÓN DE PROFESORADO UNIVERSITARIO (FPU 2019)

## Información General

Área de Investigación
Centro/Instituto
Grupo de Investigación
Tema de investigación del grupo:
Provincia
Correo de contacto
Página Web de referencia

## Detalles Sobre la Oferta

Referencia proyecto
Tema de Investigación:
Ámbito (dentro del área de investigación):
Palabras Clave



## Resumen del Proyecto (100-3000 palabras)

El proyecto de la tesis se centrará en el estudio de sistemas moleculares acuosos (tales como los clatratos de agua o los agregados de agua/ion-agua desde su fase gas hasta la fase líquida) para avanzar en el conocimiento de sus interacciones intermoleculares, y sus propiedades termodinámicas y espectroscópicas. Del lado teórico, obviamente, las limitaciones provienen de los modelos de interacción utilizados en las simulaciones. Aunque a primera vista, diseñar interacciones totalmente *ab initio* resulte en un esfuerzo de enormes proporciones, claramente representa un paso adelante para describir sistemas de gran interés, que al combinarse apropiadamente con cálculos computacionales eficientes, así como con ajustes precisos, aportan a la comunidad científica un protocolo que se corrige por diseño y no por azar o cancelación de errores. En este sentido, la ruta a seguir en el proyecto es sistemática y constituye un protocolo de actuación para el estudio de cualquier sistema de manera eficiente. Dicho protocolo incluye: realizar cálculos de estructura electrónica de primeros principios (*p.e.* a nivel de teorías DF-MP2, CCSD(T)-F12, DFT+D, etc), desarrollar modelos de la representación de las interacciones, examinar su transferibilidad a diferentes ambientes y bajo distintas condiciones (*p.e.* temperatura, presión, concentración, etc), determinar las propiedades a través de simulaciones moleculares (cuánticas), comparar los resultados con las observaciones experimentales actuales, evaluar las predicciones teóricas, aportar información detallada sobre diversos mecanismos moleculares a los que difícilmente se puede acceder mediante experimentos, y finalmente, aplicar la misma a problemas reales que vinculen la ciencia con la tecnología y la innovación.

Se trata de un proyecto teórico-computacional y requiere conocimientos y destrezas en química/física computacional. El plan de trabajo se estructura de acuerdo con los objetivos propuestos, y dependiendo de la formación e interés del estudiante se asignarán las tareas a realizar.

- [1] <http://dx.doi.org/10.1021/jp5123745>
- [2] <http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b07584>
- [3] <http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpca.7b12107>
- [4] <http://dx.doi.org/10.1002/chem.201800497>
- [5] <http://dx.doi.org/10.1021/jp211952y>
- [6] <http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b09562>