

FICHA DESCRIPTIVA JAE INTRO (IFF-CSIC)

1. **Proyecto ofertado:** Estudio de las interacciones intermoleculares en nanoestructuras carbonosas
2. **Tutor/a responsable:** Dr. Massimiliano Bartolomei
3. **Email tutor/a:** maxbart@iff.csic.es
4. **Requisitos específicos:**
Estudiante de grado (tercer o cuarto año) en Física o Química (ver requisitos generales para aplicar)
5. **Descripción del proyecto y actividades que se desarrollarán:**

Se abordará el estudio teórico de las interacciones intermoleculares en nanoestructuras compuestas principalmente por hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH), que representan sistemas paradigmáticos de elevado interés por distintas razones: se pueden encontrar tanto en el Medio Interestelar como en la atmósfera terrestre y su estructura planar les convierte en plataformas ideales para el estudio de la adsorción física de especies atómicas y moleculares ligeras sobre planos carbonosos como el grafeno.

Para ello se abordará la adquisición de las siguientes competencias:

- Desarrollo de tareas básicas para el acercamiento a los principios básicos de la Física Molecular.
- Introducción a la Química Computacional bajo sistemas operativos tipo LINUX a través del uso de los códigos de estructura electrónica como Molpro y Gaussian.

