

FICHA DESCRIPTIVA JAE INTRO (IFF-CSIC)

1. **Proyecto ofertado:** Retos cuánticos moleculares
2. **Tutor/a responsable:** Dr. Tomás González Lezana / Prof. Pablo Villarreal Herrán
3. **Email tutor/a:** t.gonzalez.lezana@csic.es / p.villarreal@csic.es
4. **Requisitos específicos:**

Estudiante o graduado de Física o de Química. Recomendable conocimientos de programación. Se valorará cualquier Máster en modelización o simulaciones en sistemas físico-químicos (ver requisitos generales para aplicar)

5. **Descripción del proyecto y actividades que se desarrollarán:**

El objetivo de la estancia es el de familiarizar al solicitante con la investigación de grandes retos moleculares participando en el desarrollo y diseño de métodos numéricos rigurosos basados en primeros principios y nuevas tecnologías en computación. El proyecto implica llegar a entender los mecanismos responsables de los procesos estudiados en sistemas de muy diverso tamaño en fase gas y condensada que abarcan colisiones de unos pocos átomos, agregados de tamaño nanoscópico o procesos de interacción entre átomos y sustratos o superficies. El candidato participaría en las diferentes etapas de la investigación, desde la construcción de superficies de potencial electrónico ab initio para describir las interacciones internas hasta el desarrollo de las herramientas computacionales requeridas en el tratamiento tanto de la dinámica como de la caracterización de estructura y geometría del sistema considerado.

