

PLAN DE FORMACIÓN JAEIntro-2021-IFF-03

1. **Proyecto ofertado:** Simulaciones cuánticas y clásicas de materiales 2D: grafeno nanoporoso y grafinos
2. **Tutor responsable:** Dr. José Campos Martínez
3. **Email tutor:** j.campos.martinez@csic.es
4. **Fecha de inicio:** 1 de septiembre o 1 de octubre de 2021
5. **Requisitos específicos:** Estudios de Grado en Física o Química, con nota media igual o mayor que 7,50 en escala de 0-10. Se valorará cualquier experiencia o formación relevante al tema de la beca.

6. Resumen del proyecto

Existe un gran interés en el estudio de materiales laminares, como el grafeno y otros cristales bidimensionales, para su aplicación en nuevas tecnologías en las que el uso de estos nanomateriales pueden aportar ventajas significativas sobre los que se usan actualmente. Entre las diferentes aplicaciones de estos materiales, nuestro grupo de investigación estudia principalmente membranas para la filtración a nivel molecular (para separar una molécula o isótopo específicos, como los de He o H₂), así como el diseño de materiales laminares para el almacenamiento óptimo de gases, como el CO₂ o el H₂, de interés ambiental y energético (ver <http://intermol.iff.csic.es/> para más información sobre el grupo de investigación).

La formación incluirá la iniciación a las simulaciones computacionales de las interacciones gas-sustrato para calibrar el rendimiento en las mencionadas aplicaciones. Esto incluye un primer paso en las técnicas computacionales, grandes ordenadores y algunos programas de uso público y común así como algunos propios desarrollados en nuestro grupo. Un punto en el que se hará más hincapié será sobre los efectos cuánticos (efecto túnel, energía de punto cero etc.) a nivel nanoscópico y en los que el grupo de investigación trabaja en la actualidad.

