

FICHA DESCRIPTIVA JAEIntroICU-2021-IFF-07

1. Tutor/a:

Dra. Aristeia Prosmiiti / Dr. Tomás González Lezana

2. email tutor/a:

rita@iff.csic.es / t.gonzalez.lezana@csic.es

3. Tema de trabajo ofertado:

Simulaciones moleculares en agregados y colisiones reactivas

4. Duración/remuneración (el tiempo máximo semanal es de 20 horas):

3 meses, 600 euros/mes

5. Fecha de inicio: 01/09/2022 ó 01/10/2022

6. Requisitos específicos:

- a) estar cursando en el momento de la solicitud el último o el penúltimo curso de grado (tener completados al menos 50% de créditos ECTS) o un máster universitario oficial.
- b) Rama de Licenciatura o Grado: Física o Química
- c) Nota media del expediente académico de Grado: igual o mayor que 7,00 (sobre 10)
- d) Se valorará cualquier experiencia o formación relevante al tema de la beca: modelización o simulaciones en sistemas físico-químicos.

7. Texto explicativo del tema de la estancia, formación que se adquirirá, etc.:

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 enfoques teóricos rigurosos basados en primeros principios y nuevas tecnologías en computación, así como métodos avanzados en el área de la ciencia de datos. 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 estructuras del sistema considerado.