

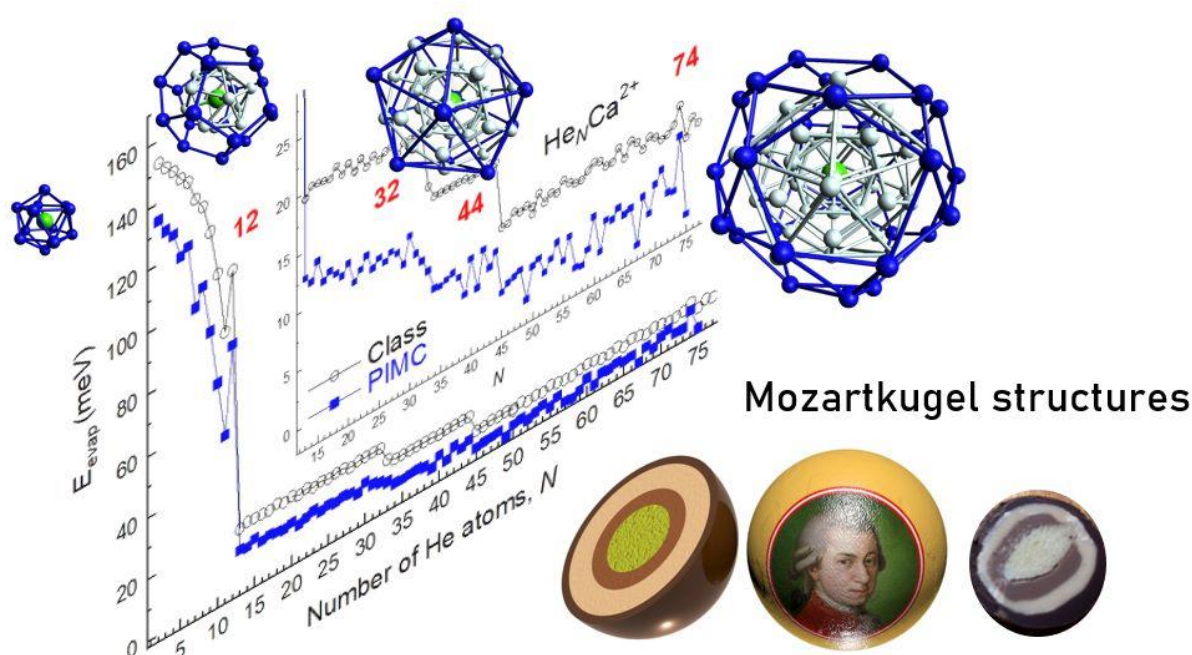
MEMORIA DEL PROGRAMA DE FORMACIÓN

Referencia: **JAEINT23_EX_0491**

Tutor: Dr. Tomás González Lezana

E-mail: t.gonzalez.lezana[at]csic.es

“Simulaciones cuánticas en agregados moleculares y procesos reactivos”



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. El candidato participaría activamente en una de las líneas desarrollada en la actualidad que se centra en el estudio de agregados dopados con impurezas iónicas rodeadas de hasta cientos de átomos de Helio. En particular se buscarán sistemas en los que dichos átomos de He sean capaces de formar varias estructuras ordenadas con cierta rigidez, en colaboración directa con el grupo experimental de la Universidad de Innsbruck (Austria) con el que recientemente se han publicado resultados novedosos con agregados de dicaciones de Calcio. Se pretende 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.