

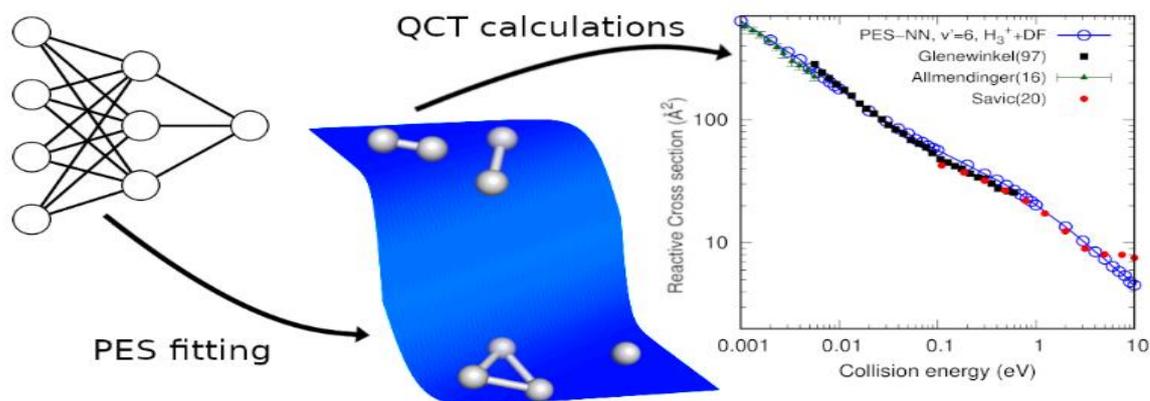
MEMORIA DEL PROGRAMA DE FORMACIÓN

Referencia: **JAEINT23_EX_0873**

Tutor: Dr. Octavio Roncero Villa

E-mail: octavio.roncero[at]csic.es

“Métodos cuánticos y semiclásicos para la determinación de constantes de velocidad de reacciones moleculares en fase gas”



Se trabajará sobre moléculas observadas por el grupo de Astrofísica Molecular del instituto de Física Fundamental, en aspectos relacionados con la obtención teórica de las constantes de velocidad de formación y destrucción de dichas moléculas en colisiones, fotodisociación, etc. Se adquirirá formación teórica, de programación y práctica en los métodos necesarios para la consecución de los objetivos concretos: cálculo de estructura electrónica y superficies de energía potencial, dinámica cuántica y clásica, métodos estadísticos (RRKM, AS,...), todo ello enfocado a la temática de astroquímica. Para ello, se requiere una formación previa en los grados de física o química. Se enseñará a realizar cálculos de estructura electrónica de alto nivel (CCSD(T), MRCI, etc) mediante el uso del paquete de programas MOLPRO para realizar cálculos de la energía del estado electrónico fundamental, así como de estados excitados. Posteriormente se enseñará el uso de los programas propios de ajuste, para generar superficies de energía potencial analíticas, sobre las que hacer posteriormente cálculos de la dinámica de las reacciones. Para esto último se usarán métodos clásicos, cuánticos y semi-clásicos usando métodos desarrollados en el grupo de investigación (métodos de trayectorias quasiclásicas con el código miQCT, métodos cuánticos de propagación temporal de paquetes de onda con el programa MADWAVE3, métodos basados en la dinámica molecular de integrales de camino aplicados a la dinámica real como el de "Ring Polymer Molecular Dynamics", con el programa dRPMD, etc), para lo que se enseñará su manejo, así como su adaptación a nuevos problemas. Los resultados serán utilizados en modelos astrofísicos, labor realizada dentro en colaboración con otros miembros del grupo de investigación, por lo que se adquirirá formación adicional en el área de Astrofísica Molecular. Durante su estancia se manejarán los fondos bibliográficos adecuados para el trabajo y se participará en los seminarios del grupo, y se fomentará el diálogo con el resto de miembros (estudiantes o no) para complementar su formación. Todo ello se aplicará a un sistema concreto a determinar con el estudiante y según las novedades y cuestiones de actualidad en el área.