Química Computacional

Researchers:

- José Carlos Corchado Martín-Romo [1] del departamento de Ingeniería Química y Química Física [2] de la Universidad de Extremadura [3].

Idioma Indefinido

Objectives:

- Desarrollar metodologías para la simulación de procesos de reactividad química en fase gaseosa y en disolución.
- Estudio de propiedades fisico-químicas de moléculas en fase líquida, gaseosa o en disolución.

Methodology:
Aplicación al estudio de reacciones de interés atmosférico o biológico en fase gaseosa o condensada mediante la aplicación de metodologías cinéticas (teorías del estado de transición) y dinámicas (cálculos de trayectorias clásicas, cuasiclásicas o cuánticas, cálculos de dinámica molecular).

Para ello será necesario emplear y desarrollar programas principalmente en lenguajes Fortran y C.

URL de origem:https://www.cenits.es/pt-pt/proyectos/quimica-computacional

Ligações
[1] http://www.unex.es/unex/departamentos/ficha_personal?idDpto=Y063&personal=1&idPersonal=68BEE5C275162286D79BCF02FA6C9D42 [2] http://www.unex.es/unex/departamentos/ficha_estructura?idDpto=Y063&estructura=1 [3] http://www.unex.es