

## 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 origen:** <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](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](http://www.unex.es/unex/departamentos/ficha_estructura?idDpto=Y063&estructura=1)

[3] <http://www.unex.es>