



Becas colaboración curso 2020/2021

Fecha: 19 Junio 2020

Vicerrectorado de Investigación, Innovación y Transferencia

Subcomisión de I+D+i

Propuesta del departamento *INGENIERÍA QUÍMICA Y NUCLEAR*

Núm Proyecto: 2020/23/00026

Responsable

Gozálvez Zafrilla, José Marcial

E-mail

jmgz@iqn.upv.es

Ext.

76333

Título proyecto

Aplicación del modelado molecular a la separación por membranas.

Valoración proyecto

4

Descripción proyecto

La simulación dinámico molecular (MDS) es una herramienta muy útil en la determinación de propiedades de disoluciones difícilmente obtenibles experimentalmente. Muchas de estas propiedades son útiles en los modelos de membranas. No obstante, estos códigos deben integrarse de forma adecuada para la modelización del comportamiento de disoluciones iónicas en sistemas confinados útiles para simular membranas, así como validarse con resultados experimentales.

La parte conceptual físico-química quedaría en un segundo plano pues se parte de códigos hechos, no obstante, un alumno con interés podrá aprender bastante en el campo.

Actividades a realizar por el alumno

- Testeo y montaje de códigos existentes.
- Exploración del potencial de programas de modelado molecular.
- Aprendizaje del lenguaje más apropiado.
- Participación en la discusión de los resultados.

Horario

El número total de horas establecido en la convocatoria para cada semana se realizará mañanas o tardes de forma compatible entre el horario del profesor y el alumno mediante conexión online.