



Becas colaboración curso 2022/2023

Fecha: 01 Junio 2022

Vicerrectorado de Investigación

Subcomisión de I+D+i

Propuesta del departamento *INGENIERÍA QUÍMICA Y NUCLEAR*

Núm Proyecto: 2022/23/00011

Responsable

Gozálvez Zafrilla, José Marcial

E-mail

jmgz@iqn.upv.es

Ext.

76333

Título proyecto

Simulación dinámica molecular en espacios confinados

Valoración proyecto

4

Descripción proyecto

La simulación dinámica molecular (MDS) es una herramienta muy útil en la determinación del comportamiento de disoluciones difícilmente de estudiar experimentalmente. En concreto existen propiedades que deben conocerse en espacios confinados como son los poros de membranas. Existen diversos códigos libres de propiedades de conjuntos de moléculas Julia, Python, etc. que pueden utilizarse. Matlab resulta una herramienta conveniente para integrar y explotar estos códigos así como para el análisis de sus resultados.

Actividades a realizar por el alumno

- Testeo y adaptación de códigos existentes.
- Realización de cálculos en clúster UPV.
- Preparación de ficheros Matlab para el análisis de resultados.
- Participación en la discusión de los resultados.

Localización de la actividad (Campus)

Laboratorio de Simulación de Procesos Químicos (ed. 5L)

Horario

El número total de horas establecido en la convocatoria para cada semana se realizará mañanas o tardes de forma compatible con el horario del profesor, huecos del alumno y ocupación del aula de Simulación.