



## **BECA DE PROJECTE**

RETRO-ENGINEERING OF ACTIVE SITES USING TOPOLOGICAL DESCRIPTORS AND LARGE-SCALE REACTIVE FORCE FIELDS

## **TASQUES FORMATIVES DE LA BECA**

Realitzar tasques de suport en els càlculs basats en la química computacional, en sistemes periòdics complexos per estudiar sistemes catalítics.

Realitzar tasques de suport en els estudis experimentals de processos catalítics.

Analitzar tasques de suport en els resultats i proposar la seva publicació en revistes científiques.

Totes aquestes tasques complementaran la seva formació acadèmica i estaran directament supervisades per l'investigador principal, així com relacionades amb l'assoliment de les competències bàsiques definides al pla d'estudis.

## **COMPETÈNCIES ASSOCIADES A LES TASQUES FORMATIVES**

Comprensió sistemàtica d'un camp d'estudi i domini de les habilitats i mètodes de recerca relacionats amb aquest camp.

Capacitat de concebre, dissenyar o crear, posar en pràctica i adoptar un procés substancial de recerca o creació.

Capacitat per a contribuir a l'ampliació de les fronteres del coneixement a través d'una recerca original.

Capacitat de realitzar una anàlisi crítica i d'avaluació i síntesi d'idees noves i complexes.

Capacitat de comunicació amb la comunitat acadèmica i científica i amb la societat en general sobre els seus àmbits de coneixement en els modes i idiomes d'ús habitual en la seva comunitat científica internacional.

Capacitat de fomentar, en contextos acadèmics i professionals, l'avanç científic, tecnològic, social, artístic o cultural dins d'una societat basada en el coneixement.

## **PERFIL DE LA PERSONA CANDIDATA**

Estudiant del Doctorat en Ciència i Tecnologia Química de la URV:

## **REQUISITS**

Coneixement d'anglès.

Coneixement de programes de la química computacional: Gaussian, VASP i ReaxFF

Coneixement de tècniques experimentals per abordar problemes de catàlisi heterogènia.

## **OBSERVACIONS**

## **CARACTERÍSTIQUES DE LA CONVOCATÒRIA**

Nº de beques: 1

Retribució bruta mensual: 1400.0 €

Hores setmanals: 37:30 h

Data inici: 01/01/2024      Data final: 31/07/2024      (durada màxima: 12 mesos)

Ubicació desenvolupament: **Departament de Química Física i Inorgànica, Facultat de Química.**

Perfil d'Activitat URV:      **4. Activitat experimental química.**

**4.1. Activitat experimental amb nanomaterials.**

EPI's: **Les usuals al laboratori.**

Correu electrònic on rebre els Cv's: **josep.ricart@urv.cat**

Data límit recepció Cv's: **28/11/2023**