



BECA DE PROJECTE

RECERCA ENGINYERIA QUIMICA DR. BONET AVALOS, JOSE

TASQUES FORMATIVES DE LA BECA

(2) Desenvolupament de potencials mesoscòpics per a aplicacions del model GenDPDE.

-La persona candidata donarà suport en la tasca de l'equip de recerca Simulació Molecular en el desenvolupament de coarse-grain potentials per a la simulació de líquids en gradients tèrmics. La candidata o candidat adequat rebrà formació en mètodes avançats de Mecànica Estadística de sistemes mesoscòpics modelats mitjançant Dinàmica de Partícules Dissipativa Generalitzada amb Conservació d'Energia (GenDPDE), necessaris per derivar equacions d'estat mesoscòpiques a partir dels paràmetres del model.

-Per dur a terme aquesta tasca, se li proporcionaran els codis existents per a simulacions GenDPDE d'equilibri i no equilibri, i rebrà instrucció en els principis físics que fonamenten les simulacions mesoscòpiques basades en equacions tipus Langevin, en particular l'impacte del Balanç Detallat. Així mateix, es requerirà i/o s'adquirirà durant el període de la beca l'ús d'eines de programació paral·lela OpenMP.

-En conjunt, en finalitzar la beca, la persona candidata haurà assolit un coneixement intermedi de la Mecànica Estadística de sistemes fluids en equilibri i fora de l'equilibri.

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 dels elements bàsics de Termodinàmica i Mecànica Estadística, tan d'equilibri com de no-equilibri.

Capacitat per usar tècniques de simulació molecular i mesoscòpica i, en particular, dinàmica molecular i Dissipative Particle Dynamics.

PERFIL DE LA PERSONA CANDIDATA

Doctorat en Nanociència, Materials i Enginyeria

REQUISITS

Es requereix fluïdesa en anglès i coneixements informàtics de Fortran95, Linux i Matlab. Coneixements de Python, el programa LAMMPS, i la gestió de cues SLURM.

OBSERVACIONS

Es valorarà haver publicat treballs de recerca originals en revistes internacionals en els quals s'hagi hagut d'aplicar les competències descrites en la convocatòria.

CARACTERÍSTIQUES DE LA CONVOCATÒRIA

Nº de beques: 1

Retribució bruta mensual: 1045.0 €

Hores setmanals: 35:30 h

Data inici: 02/02/2026 Data final: 16/02/2026 (durada màxima: 12 mesos)

Ubicació desenvolupament: LABORATORI 221 DEQ _ CAMPUS SESCELADES

Perfil d'Activitat URV: 7. Activitat de gestió

EPI's: No és necessari

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

Data límit recepció Cv's: 25/01/2026