



BECA DE PROJECTE

PREDICTION OF CO₂ SOLUBILITY IN IONIC LIQUIDS BY COMPUTATIONAL MODELING

TASQUES FORMATIVES DE LA BECA

La persona candidata donarà suport en el desenvolupament de models moleculars amb l'equació d'estat SAFT per a estudiar la solubilitat de CO₂ i altres gasos d'efecte hivernacle en líquids iònics i altres solvents sostenibles. També participarà en el desenvolupament de models d'intel·ligència artificial per a descriure propietats de fase i interfacials de líquids iònics i solvents orgànics. La persona candidata rebrà formació en l'ús d'equacions d'estat moleculars avançades i en tècniques d'estimació de propietats interfacials. Així mateix, participarà en activitats relacionades en l'acoblament d'algoritmes d'intel·ligència artificial amb eines de termodinàmica clàssica. Finament, també rebrà formació en la utilització del software COSMO-RS per a la determinació de les interaccions de compostos en base a càlculs DFT. 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 d'elements bàsics de Termodinàmica, Mecànica Estadística i Equilibri de Fases
Capacitat per desenvolupar codis en llenguatge de programació
Comprensió d'eines d'intel·ligència artificial (Xarxes Neuronals, Algoritmes XRG Boost).

PERFIL DE LA PERSONA CANDIDATA

Doctorand en programes d'Enginyeria Química o similar

REQUISITS

Domini de l'ús d'equacions d'estat amb base molecular
Domini de llenguatges de programació, preferentment Python

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
Es valoraran coneixements en estudis de gasos d'efecte hivernacle

CARACTERÍSTIQUES DE LA CONVOCATÒRIA

Nº de beques: **1**

Retribució bruta mensual: **1100.0 €**

Hores setmanals: **32:00 h**

Data inici: **01/03/2026** Data final: **30/09/2026** (durada màxima: 12 mesos)

Ubicació desenvolupament: **Departament d'Enginyeria Química**

Perfil d'Activitat URV: **7. Activitat de gestió**

EPI's: **NO**

Correu electrònic on rebre els Cv's: **felix.llovell@urv.cat**

Data límit recepció Cv's: **22/02/2026**