

BASES ESPECÍFIQUES	CODI CONVOCATÒRIA LI2422085
<p>Convocada per la Resolució del rector de 26 de gener de 2024</p> <p>Termini de presentació de sol·licituds: 8 de febrer de 2024, inclòs.</p> <p>Taxes d'inscripció: Import a ingressar d'acord amb el punt 5 de les bases generals.</p> <p>Descripció del lloc de treball: Tècnic mitjà o tècnica mitjana de suport a un projecte de recerca.</p> <p>Grup/categoria professional: Grup II -clt U</p> <p>Nombre de places: 1</p> <p>Unitat d'adscripció: Departament de Química Física i Inorgànica</p> <p>Grup de recerca: Grup de Química Quàntica</p> <p>Línia de recerca: Química Quàntica</p>	
Projecte	
<p>Nom del projecte: Nuevos horizontes en la química de los polioxometalatos y las nanoformas de carbono: modelización de propiedades fundamentales y aplicaciones tecnológicas.</p> <p>Codi del projecte: PID2020-112762GB-I00 QMC Codi UXXI: 2021/00318/001</p> <p>Organisme finançador: MCIN/AEI</p> <div data-bbox="151 1232 454 1332"></div> <p>Aquest contracte està finançat pel projecte PID2020-112762GB-I00 QMC</p> <p>Aquest contracte es part del projecte d'I+D+i PID2020-112762GB-I00QMC, finançat per MCIN/AEI/10.13039/50</p> <p>En compliment de les disposicions en matèria d'informació i publicitat establertes en les convocatòries dels ajuts, citem, de forma expressa, aquests organismes com a entitats finançadores d'aquesta contractació. Així mateix, tant la URV com el/la treballador/a, si s'escau, citarem aquestes entitats finançadores en el contracte de treball, publicacions, ponències, activitats de difusió i altres resultats de la investigació segons estableix el Reglament 821/2014."</p> <p>Codificació pressupostària: • Orgànica: • Funcional: • Econòmica: • RC: 2023/0009357</p>	
Característiques de la contractació	
<p>Tipus de contracte: Contracte d'activitats científicotècniques</p> <p>Jornada: Temps parcial: 20 hores setmanals</p> <p>Horari: de dilluns a divendres de 10h a 14h</p> <p>Previsió inicial de durada: 6 mesos aproximadament*</p> <p>Data prevista inici contracte: 01/03/2024</p>	

*D'acord amb l'apartat 3 de les bases generals de la convocatòria.

Tasques

Principals tasques a realitzar:

- Desenvolupar un codi (python) que permeti incloure els efectes dels contraions, a partir de simulacions de dinàmica molecular, en càlculs estàndard DFT amb solvent implícit (COSMO).
- Anàlisi de l'agregació polioxometal·lat-contraió en solucions aquoses i no aquoses, en funció de l'estat de reducció de l'analit.
- Simulació de líquids iònics basats en polioxometal·lats (DFT, dinàmica molecular).
- Comunicació dels resultats de forma oral i escrita.

Coneixements

- Mètodes d'estructura electrònica més comuns de la Química Quàntica (especialment DFT i mètodes de solvatació implícita).
- Mètodes de simulació per dinàmica molecular aplicada a l'estudi d'òxids metàl·lics moleculars en solució.
- Programació en python i bash Shell.
- Propietats fisico-químiques de polioxometal·lats d'elevada complexitat.
- Ús del programari Visual Molecular Dynamics (VMD).

Mèrits

- Titulació acadèmica relacionada amb l'àmbit de coneixement del lloc de treball.
- Formació addicional relacionada amb l'àmbit de coneixement del lloc de treball.
- Experiència en l'ús de programari d'estructura electrònica (ADF) i de dinàmica molecular (Gromacs).
- Habilitats comunicatives en anglès
- Experiència laboral relacionada amb els coneixements i tasques requerits en les bases d'aquesta convocatòria

Comissió de selecció

President/a titular:	Xavier López Fernández
President/a suplent:	Josep Maria Poblet Rius
Vocal titular:	Antonio Rodríguez Fortea
Vocal suplent:	Maria Besora Bonet
Vocal titular:	Pendent de designació
Vocal suplent:	Pendent de designació

Data de publicació: 29/01/2024