



Beca de introducción a la investigación en el CSIC

El CSIC ha publicado recientemente la convocatoria “JAE INTRO” 2025 (plazo de solicitud ampliado hasta el 9/5/2025), en la cual se ofertan 200 becas de introducción a la investigación. Las becas JAE INTRO están dirigidas a estudiantes de último curso de grado o máster, y tienen una duración de 7 meses, con dedicación de 20 horas a la semana y una dotación de 600 euros al mes. La información completa de la convocatoria, incluyendo la descripción de todas las líneas de trabajo ofertadas, se encuentra en: <https://sede.csic.gob.es/tramites/programa-jae/jae-intro-2025>

A través de este anuncio se quiere dar difusión entre los estudiantes de la UGR a una de dichas líneas de trabajo, a realizar bajo la dirección del Dr. Daniel Muñoz Santiburcio (daniel.munoz@csic.es) en el Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra (línea disponible a través de las áreas globales del CSIC “Vida” o “Materia”, ver texto en la convocatoria):

Simulación mediante Dinámica Molecular de procesos físicos y químicos en agua e interfaces agua/mineral

Este plan de formación se enmarca dentro de una amplia y variada línea de trabajo dedicada al estudio de diversos procesos físicos y químicos que tienen lugar en agua e interfaces agua/mineral en diversas condiciones, mediante simulaciones computacionales de Dinámica Molecular de diferentes tipos (DM *ab initio* o DM con campos de fuerza clásicos), así como mediante cálculos de estructura electrónica. Ejemplos de los procesos que hemos estudiado en el pasado o que ocupan nuestro interés actual son:

- Difusión de agua e iones hidronio e hidróxido en agua bulk y nanoconfinada en condiciones de P y T ambiente y extremas.
- Disociación de agua bulk y nanoconfinada en condiciones de P y T ambiente y extremas.
- Reacciones químicas en agua bulk y nanoconfinada en diversas condiciones, con énfasis en procesos relevantes para el origen de la vida.
- Daño por radiación de protones de alta energía en sistemas acuosos o minerales.

El/la estudiante podrá elegir entre diversos temas relacionados con este tipo de procesos. El trabajo a desarrollar se concretará en función de su formación y conocimientos previos, apoyándose en éstos y complementando y avanzando su formación científica. De esta forma, cualquier estudiante con formación previa en Química, Física o cualquier otra rama científico-técnica podrá adquirir o perfeccionar las siguientes habilidades, tanto específicas como transversales:

- Conocimiento de técnicas de simulación atomística, desde DM clásica hasta DM *ab initio* en sus diversas formulaciones (Born-Oppenheimer, Car-Parrinello, Ehrenfest).
- Conocimiento de métodos computacionales de cálculo de estructura electrónica, especialmente dentro de la Teoría del Funcional de la Densidad.
- Uso de diversos paquetes de software científico para realizar dichas simulaciones y cálculos (p.ej. CP2K, DL_POLY).
- Uso de recursos de supercomputación, incluyendo acceso a superordenadores como MareNostrum (Barcelona Supercomputing Center).
- Uso de sistemas Linux, programación, análisis y visualización de datos. Elaboración de programas propios para análisis y procesamiento de datos. Programación paralela para supercomputación.
- Elaboración de textos y presentaciones científicas, manejo del inglés científico-técnico, habilidades de presentación y exposición en público.