
Simulación de Procesos Químicos

Researchers:

- [Santiago Tolosa Arroyo](#) [1] del Departamento de Ingeniería Química y Química Física de la [Universidad de Extremadura](#) [2]

Language Undefined

Objectives:

- Se realiza la simulación de sistemas y procesos químicos de interés químico, biológico e industrial haciendo uso de mecánica molecular para su estudio tanto en fase gas como en disolución.

Methodology:

Utilización de potenciales ab initio y de simulación con dinámica molecular. Construcción de curvas de energía libre.

Funding sources:

- [Junta de Extremadura](#) [3]

Source URL: <https://web.computaex.es/en/proyectos/simulacion-procesos-quimicos>

Links

[1] <http://www.unex.es/unex/grupos/grupos/eisqdm> [2] <http://www.unex.es> [3] <http://www.gobex.es>