
Simulación de Procesos Químicos

Investigadores:

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

Idioma Sin definir

Objetivos:

- 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.

Metodología:

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

Fuentes de financiación:

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

URL del envío:<https://web.computaex.es/proyectos/simulacion-procesos-quimicos>

Enlaces

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