

# Posición Ofertada: PREDOCTORAL

## Proyecto: *INVESTIGACIÓN COMPUTACIONAL ASISTIDA POR APRENDIZAJE AUTOMÁTICO DE CATALIZADORES DE ÓXIDOS METÁLICOS PARA APLICACIONES DE BUCLE QUÍMICO*

**Ámbitos tecnológicos o científicos:** Nuevos Materiales, Computación de Alto Rendimiento, Inteligencia Artificial

**Localización:** Valencia, Comunidad Valenciana, Instituto de Tecnología Química (ITQ)  
<https://itq.upv-csic.es/>

**Grupo de Investigación / IP:** Diseño molecular de catalizadores / Mercedes Boronat Zaragoza

### RESUMEN DEL PROYECTO

En este período de transición hacia una sociedad sostenible es necesario desarrollar nuevas tecnologías para la producción eficiente de energía y productos químicos. En los procesos de bucle químico, una reacción química se divide en dos pasos separados mediados por un compuesto metálico que reacciona y se regenera de forma reversible en ciclos, permitiendo condiciones de reacción más suaves y la separación de gases que consume mucha energía. El diseño de materiales a medida para aplicaciones de bucle químico, basado en un profundo conocimiento de la evolución estructural del catalizador en condiciones de funcionamiento, requiere el desarrollo de métodos computacionales nuevos y más rápidos capaces de alcanzar escalas de tiempo y longitud lo suficientemente grandes. Es necesario incorporar técnicas de Inteligencia Artificial y, más concretamente, de Machine Learning para reproducir la precisión de la química cuántica a un coste computacional mucho menor. El objetivo de esta propuesta es desarrollar potenciales precisos de aprendizaje automático para predecir el rendimiento de los óxidos metálicos en aplicaciones de bucle químico. El estudio teórico de la termodinámica y la cinética de transformaciones tan profundas de materiales sólidos (reducción completa y oxidación en diferentes condiciones) abrirá la posibilidad de realizar predicciones computacionales más precisas del comportamiento del catalizador en condiciones realistas, para estos óxidos y para otros tipos de materiales sólidos.

### PERFIL PROFESIONAL

#### Requisitos mínimos:

Titulación académica requerida:

- Grado en Química

#### Méritos valorables:

Se valorará Master en Química Teórica, Materiales o temas relacionados, experiencia previa en estudios computacionales relacionados con catálisis y/o materiales, y conocimiento básico de lenguajes de programación.

### QUÉ SE OFRECE

Incorporación en un grupo multidisciplinar para cursar el Programa de Doctorado en Química Sostenible de la Universitat Politècnica de València (UPV). Aprendizaje de métodos computacionales aplicados a catálisis y técnicas de machine learning. Se prevén dos estancias formativas en centros de investigación de prestigio. 150 ECTS al final del proyecto.

#### Condiciones de contrato:

Contrato Predoctoral de 4 años de duración. Salario anual bruto de 23.871,33 €.

**Inicio del contrato: antes del 31 de diciembre de 2024**

### CONTACTO DEL INVESTIGADOR PRINCIPAL

E-mail: boronat@itq.upv.es

Teléfono: +34 96 387 9445

[momentum@csic.es](mailto:momentum@csic.es) | <https://momentum.csic.es/>