



## Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

**Tutor/a:** Pablo I. Hurtado Fernández

**Departamento y Área de Conocimiento:** Electromagnetismo y Física de la Materia

**Cotutor/a:**

**Departamento y Área de Conocimiento:**

**Título del Trabajo:** Leyes de escala y transporte anómalo en una dimensión

**Tipología del Trabajo:** Teórico o práctico

### Breve descripción del trabajo:

La ley de Fourier establece la proporcionalidad entre la corriente de energía y el gradiente de temperatura en un material, donde la constante de proporcionalidad define la conductividad térmica  $k$ , una propiedad fundamental del material en cuestión. En sistemas de baja dimensionalidad la conductividad  $k$  presenta un comportamiento anómalo, creciendo con el tamaño del sistema y por tanto divergiendo en el límite termodinámico. El interés de esta anomalía es doble, ya que por un lado se espera que su comprensión ofrezca luz sobre los ingredientes fundamentales necesarios para deducir la ley de Fourier desde un punto de vista microscópico, siendo también de gran interés tecnológico por su relevancia en materiales reales de baja dimensionalidad efectiva, como por ejemplo el grafeno, los nanotubos de carbono, las fibras poliméricas y las cadenas moleculares, etc.

En este trabajo se estudiará el transporte de energía en un modelo canónico de cristal unidimensional, el modelo de Fermi-Pasta-Ulam (FPU), con el objetivo de caracterizar numéricamente la anomalía de la ley de Fourier en este sistema. Para ello se usarán simulaciones por dinámica molecular del modelo FPU en interacción con baños térmicos a diferentes temperaturas. Se medirá la corriente de energía promedio en el sistema para diferentes gradientes, así como los perfiles estacionarios de temperatura, densidad, etc., para obtener estimaciones numéricas del coeficiente de conductividad térmica. Se investigará la dependencia de los observables anteriores con el tamaño del sistema, con el objeto de medir el exponente que caracteriza la anomalía en la conductividad. También se estudiará la dependencia de esta anomalía con diferentes parámetros de control, para así determinar la universalidad de la anomalía.

### Objetivos planteados:

- (1) Caracterizar el transporte de energía anómalo en el modelo de Fermi-Pasta-Ulam en una dimensión.
- (2) Obtener promedios estadísticos para diferentes tamaños de red de los observables descritos anteriormente.
- (3) Analizar estos datos numéricos para obtener una estimación de la conductividad térmica y el exponente de la anomalía.

### Metodología:

Física estadística, física computacional, simulación por dinámica molecular, leyes de escala, análisis de tamaño finito

### Bibliografía:

- S. Lepri (ed.), *Thermal transport in low dimensions: From statistical physics to nanoscale heat transfer*, Springer (2016).  
A. Dhar, *Heat transport in low-dimensional systems*, Adv. Phys. **57**, 457–537 (2008).

**A rellenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG**

**Alumno/a propuesto/a:** Rubén Hurtado Gutiérrez

Granada, 11 de Mayo de 2016