



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA

## PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2021/2022



Facultad de Ciencias

### PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO

#### DATOS BÁSICOS DEL TFG

TÍTULO TFG	Estudio de fuerzas intermoleculares mediante técnicas de dinámica molecular		
CÓDIGO TFG <sup>(1)</sup>	EM-21/22-01	TIPOLOGÍA <sup>(2)</sup>	A1

<sup>(1)</sup> A rellenar por la dirección del dpto

OFERTADO POR	Profesor del Departamento	<input checked="" type="checkbox"/>
	Profesor del Departamento junto con Empresa o Institución	<input type="checkbox"/>

#### DATOS DE LA ENTIDAD (donde se va a realizar el TFG)

CENTRO (Departamento, institución o empresa)	Departamento de Electromagnetismo y Física de la Materia		
DIRECCIÓN POSTAL	Facultad de Ciencias. Av. Fuentenueva s/n.		
LOCALIDAD	Granada	C.P.	18071

#### DATOS DEL TUTOR

<b>TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)</b>			
NOMBRE Y APELLIDOS	Daniel Manzano Diosdado.		
DEPARTAMENTO	Departamento de Electromagnetismo y Física de la Materia		
CARGO <sup>(3)</sup>	Profesor Contratado Doctor Indefinido		
TELÉFONO	958241000 Ext: 20569	E-MAIL	manzano@onsager.ugr.es

Rellenar en caso de haber un segundo tutor

<b>TUTOR 2</b>			
NOMBRE Y APELLIDOS			
DEPARTAMENTO			
CARGO <sup>(3)</sup>			
TELÉFONO		E-MAIL	
<b>TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)</b>			
NOMBRE Y APELLIDOS			
EMPRESA			
TITULACIÓN			
TELÉFONO		E-MAIL	

<sup>(3)</sup> Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

## MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

### Introducción.

En este TFG se estudiarán los distintos tipos de fuerzas intermoleculares mediante técnicas de simulación de dinámica molecular. Para ello el alumno o alumna deberá desarrollar programas de simulación basados en algoritmos como el de Verlet o de dinámica de discos rígidos. Mediante estos algoritmos se analizarán las propiedades de compactación de distintos tipos de interacciones que ocurren entre iones, dipolos y dipolos inducidos.

### Objetivos.

- Desarrollar los algoritmos de Verlet y de dinámica de discos rígidos (en C, C++, Python o Matlab).
- Estudiar propiedades de compactación de partículas para distintos potenciales.
- Calcular las dimensiones fractales de sistemas bidimensionales.

### Resumen de los trabajos a realizar por el estudiante/Plan de trabajo.

- Desarrollo de los algoritmos.
- Aplicación de los mismos para los distintos potenciales en estudio.
- Calcular las dimensiones fractales así como los exponentes críticos.

---

**Una vez cumplimentado deberá ser enviado junto con el resto de propuestas del departamento en formato pdf al correo: [gradoquimica@ugr.es](mailto:gradoquimica@ugr.es). El nombre de cada fichero debe de coincidir con el código del TFG.**

---

### TIPOLOGÍA<sup>(2)</sup>

A. Trabajos de investigación con orientación básica o aplicada, cuya temática se relacione con los contenidos de la titulación, como:

- A1.** Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado, a partir de material ya disponible en los Centros.
- A2.** Trabajos experimentales, de toma de datos de campo, de laboratorio, etc.
- A3.** Elaboración de guías prácticas relacionadas con la temática del Grado.

B. Trabajos científico-técnicos representativos del ejercicio profesional para el que capacita la titulación, como:

- B1.** Elaboración de un informe o un proyecto de naturaleza profesional.
- B2.** Elaboración de un plan de empresa.
- B3.** Simulación de encargos profesionales.

En ambas modalidades el TFG no podrá tener carácter exclusivamente bibliográfico, pero si podrá ser teórico, experimental, o combinación de éstos.