

Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a:	Alessandro Patti
Departamento y Área de Conocimiento:	Departamento de Física Aplicada
Correo electrónico:	apatti@ugr.es
Cotutor/a:	Irene Adroher Benítez
Departamento y Área de Conocimiento:	Departamento de Física Aplicada
Correo electrónico:	iadroher@ugr.es

Título del Trabajo: *Dinámica Molecular de Cristales Líquidos*

Tipología del Trabajo: (Segun punto 3 de las Directrices del TFG aprobadas por Comisión Docente el 10/12/14)	(Marcar con X)	1. Revisión bibliográfica		4. Elaboración de nuevas prácticas de laboratorio	
		2. Estudio de casos teórico-prácticos	X	5. Elaboración de un proyecto	
		3. Trabajos experimentales		6. Trabajo relacionado con prácticas externas	

Breve descripción del trabajo:

El estudiante realizará simulaciones por ordenador para investigar el comportamiento fásico de moléculas biaxiales que forman cristales líquidos nemáticos. Estas moléculas contienen un corazón central formado por antraquinona, un compuesto orgánico aromático derivado del antraceno, sustituido por cuatro grupos feniletílicos [1]. El interés en esta familia de moléculas reside sobretudo en su potencial capacidad de dar lugar a cristales líquidos nemáticos biaxiales que presentan dos ejes ópticos independientes y entonces especialmente atractivos de un punto de vista tecnológico. Estudios previos en nuestro grupo sugieren que estas fases podrían más probablemente formarse en mezclas antes que en sistemas puros [2-4]. El objetivo de este estudio es aplicar dinámica molecular para investigar este comportamiento, seleccionando primero los sistemas puros más prometedores y estudiando de forma sistemática sus mezclas.

Objetivos planteados:

1. Adquirir familiaridad con la física de los cristales líquidos;
2. Aplicar las bases teóricas desarrolladas durante los estudios de grado a la investigación de fluidos complejos;
3. Desarrollar familiaridad con técnicas de simulación molecular (Dinámica Molecular);
4. Consolidar o desarrollar habilidades de programación;
5. Analizar y comunicar los resultados de investigación de forma crítica por escrito y oralmente;

Metodología:

El estudio propuesto pretende utilizar conceptos de física estadística aplicados a técnicas de simulación numérica. Se utilizarán simulaciones de Dinámica Molecular para (i) comprobar la existencia de la fase nemática en sistemas monocomponentes y en mezclas y (ii) caracterizar la estructura de esta fase calculando parámetros de orden orientacional y funciones de correlación espacial. A este fin, se utilizará el paquete de simulación Gromacs que permite ejecutar complejos cálculos numéricos en paralelo. Las simulaciones se correrán en Proteus, el cluster del Instituto Carlos I de Física Teórica. Algunas propiedades se calcularán utilizando programas en Fortran disponibles en el grupo.

Bibliografía:

- [1] M. Lehman *et al.*, *Soft Matter*, **2019**, *15*, 8496
- [2] A. Cuetos *et al.*, *Soft Matter*, **2017**, *13*, 4720
- [3] A. Patti and A. Cuetos, *Mol. Sim.*, **2018**, *44*, 516

[4] E. M. Rafael et al., *Soft Matter*, **2020**, *16*, 5565

A rellenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG
Alumno/a propuesto/a: Eduardo Avilés Tejada

Granada, 28 de Abril de 2023

Sello del Departamento