



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 ⁽¹⁾	EM-21/22-01	TIPOLOGÍA ⁽²⁾	A1

⁽¹⁾ 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

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

Rellenar en caso de haber un segundo tutor

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

⁽³⁾ 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. El nombre de cada fichero debe de coincidir con el código del TFG.

TIPOLOGÍA⁽²⁾

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.