



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2021/2022



Facultad de Ciencias

PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO/EMPRESA

DATOS BÁSICOS DEL TFG

TÍTULO TFG	SIMULACIÓN MOLECULAR DE FLUIDOS ESFEROCILÍNDRICOS		
CÓDIGO TFG ⁽¹⁾	QF-21/22-02	TIPOLOGÍA ⁽²⁾	A2

⁽¹⁾ A rellenar por la dirección del dpto que vendrá dado como: código del dpto-Nº de orden

⁽²⁾ Al final del documento se encuentran las diferentes tipologías

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 QUÍMICA FÍSICA		
DIRECCIÓN POSTAL ⁽³⁾			
LOCALIDAD ⁽³⁾		C.P. ⁽³⁾	

⁽³⁾ A rellenar en el caso de realizarse en una empresa

DATOS DEL TUTOR

TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
NOMBRE Y APELLIDOS	FRANCISCO GÁMEZ MÁRQUEZ		
DEPARTAMENTO	QUÍMICA FÍSICA		
CARGO ⁽⁴⁾	PROFESOR CONTRATADO DOCTOR		
TELÉFONO	618121026	E-MAIL	FGAMMAR@GMAIL.COM

Rellenar en caso de haber un segundo tutor

TUTOR 2			
NOMBRE Y APELLIDOS			
DEPARTAMENTO			
CARGO ⁽⁴⁾			
TELÉFONO		E-MAIL	
TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
NOMBRE Y APELLIDOS			
TITULACIÓN			
TELÉFONO		E-MAIL	

⁽⁴⁾ Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

Introducción.

El estudio de sistemas fluidos mediante Dinámica Molecular clásica permite obtener propiedades de no equilibrio de modelos moleculares sencillos. En particular, los métodos de Green-Kubo y de Einstein permiten obtener estos parámetros como funciones de correlación de diferentes propiedades moleculares que se pueden calcular durante trayectorias evaluadas mediante el algoritmo de Dinámica Molecular. Por su parte, el método de Monte Carlo en el colectivo de Gibbs permite establecer las fronteras del equilibrio líquido-vapor, así como otras propiedades térmicas de equilibrio.

La incorporación de anisotropía geométrica, de masa y de carga (multipolos) introduce grados de libertad adicionales e interacciones atractivas que modifican sustancialmente tanto la estructura como la energética del fluido. Algunas de estas modificaciones pueden ser la variación de los coeficientes de transporte con el momento de inercia (relaciones de Hubbard) o del equilibrio líquido-vapor con el dipolo molecular, lo que abre un amplio abanico de fenómenos de interés fundamental.

Objetivos.

En este trabajo se propone el uso de Dinámica Molecular en el colectivo canónico (NVT) para estudiar el efecto del momento de inercia en los coeficientes de transporte de un modelo de fluido esferocilíndrico que interactúa mediante un potencial de tipo Kihara multipolar, todo ello en una fase isotrópica.

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

- Búsqueda bibliográfica de resultados relevantes previos.
- Familiarización con la técnica de Dinámica Molecular y sus algoritmos.
- Simulación de las trayectorias y cálculo de los parámetros dinámicos de interés.
- Determinación de las relaciones de Hubbard y comparativa con el modelo apolar.

Una vez cumplimentado deberá ser enviado junto con el resto de las 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.

C. Trabajos bibliográficos (**C**)