



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA

## PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2023/2024



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-23/24-01   | 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 las propuestas del departamento en formato pdf (Word transformado en pdf, NO escaneado) 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.

C. Trabajos bibliográficos (C)