



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Modelado y simulación polímeros naturales para aplicaciones sostenibles

Descripción general (resumen y metodología):

Resumen

Este trabajo tiene como objetivo utilizar modelos computacionales de grano grueso (coarse-grained) para estudiar polímeros de origen natural y evaluar su potencial para aplicaciones sostenibles.

Metodología

Al inicio del proyecto, se llevará a cabo una revisión bibliográfica exhaustiva para comprender el estado actual en el campo de la simulación de polímeros y sus diversas aplicaciones, con un énfasis particular en aquellos estudios enfocados en la sostenibilidad de productos poliméricos.

Se realizarán simulaciones de dinámica molecular con solvente implícito utilizando el software HOOMD-blue, implementado como una librería de Python, para analizar la disolución de polímeros naturales y caracterizarlos. Posteriormente, se incorporará una superficie en las simulaciones para investigar la dinámica de adsorción de los polímeros.

Se desarrollarán códigos específicos para analizar distintas propiedades de los polímeros, tales como el radio de giro y los perfiles de densidad, con el propósito de caracterizarlos y evaluar su potencial para formar recubrimientos poliméricos.

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

- Comprender el modelado de grano grueso de moléculas.
- Aprender técnicas de simulación como la dinámica molecular.
- Ejecutar códigos complejos de simulación.
- Desarrollar programas sencillos para analizar los resultados obtenidos.

Bibliografía básica:

1. Smit, B., & Frenkel, D. (2002). Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. Academic Press.
2. Grest, G. S., & Kremer, K. (1986). Molecular dynamics simulation for polymers in the presence of a heat bath. Physical Review A, 33(5), 3628(R). doi:10.1103/PhysRevA.33.3628.
3. Anderson, J. A., Glaser, J., & Glotzer, S. C. (2020). HOOMD-Blue: A Python Package for High-Performance Molecular Dynamics and Hard Particle Monte Carlo Simulations. Computational Materials Science, 173, 109363. doi:10.1016/j.commatsci.2019.109363.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Este trabajo es adecuado para aquellas personas que disfrutan programando, se sienten a gusto trabajando con ordenadores y tienen interés por la física aplicada. Se recomienda tener conocimientos de Python o tener interés por aprenderlo, ya que será útil para las simulaciones. Haber disfrutado la asignatura de Métodos Numéricos y Simulación es una buena señal. Asimismo, haber cursado la asignatura optativa de Física Computacional será de gran ayuda.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: Irene Adroher Benítez

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA APLICADA

Correo electrónico: iadroher@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos: ARTURO MONCHO JORDÁ

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA APLICADA

Correo electrónico: moncho@ugr.es

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: