



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Estudio de fuerzas intermoleculares mediante técnicas de dinámica molecular

Descripción general (resumen y metodología):

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.

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

Objetivos planteados:

- 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.

Bibliografía básica:

https://ergodic.ugr.es/cphys/index.php?id=lec_sistemasolar
Molecular Modelling for Beginners. A. Hinchliffe, Wiley Ed. 2008.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: DANIEL MANZANO DIOSDADO

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

Correo electrónico: dmanzano@ugr.es

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

Nombre y apellidos:

Ámbito de conocimiento/Departamento:

Correo electrónico:

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:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: