UNIVERSIDAD DE GRANADA

FACULTAD DE CIENCIAS

Propuesta TFG. Curso 2024/2025

GRADO: Grado en Física

CÓDIGO DEL TFG: 267-041-2024/2025

1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Dinámica Molecular de Fluidos Electroreológicos

Descripción general (resumen y metodología):

El estudiante realizará simulaciones por ordenador para investigar el comportamiento de fluidos complejos de nanopartículas anisótropas (nanorods) que, en presencia de un campo eléctrico, se polarizan y se agregan formando cadenas. Esta modificación estructural del nanomaterial, que pasa a formar una fase nemática, provoca un cambio en sus propiedades termodinámicas, mecánicas y térmicas. Utilizando Dinámica Molecular, el objetivo de este proyecto es investigar la cinética de respuesta de un fluido isótropo de nanorods en presencia de un campo eléctrico externo. Concretamente, calcularemos el tiempo de respuesta del sistema, es decir, el tiempo necesario para observar una transición isótropo-nemática, en función de la intensidad del campo, comparándolo con recientes resultados obtenidos en suspensiones de partículas cuboidales [1]. Además, determinaremos, el comportamiento de la viscosidad con campo apagado y encendido para corroborar el efecto práctico de la formación de las cadenas.

El estudio propuesto pretende utilizar conceptos de Física Estadística aplicados a técnicas de simulación numérica. Se utilizarán simulaciones de Dinámica Molecular para (i) comprobar la existencia de la fase nemática en sistemas de nanorods en presencia de un campo eléctrico y (ii) caracterizar los tiempos de respuesta del sistema. Además, se utilizará Dinámica Molecular fuera del equilibrio para calcular la viscosidad del material con y sin campo. A este fin, se utilizará el paquete de simulación Gromacs que permite ejecutar complejos cálculos numéricos en paralelo. Las simulaciones se correrán en Proteus, el clúster del Instituto Carlos I de Física Teórica, y Albaicín/Alhambra, de la UGR. Algunas propiedades se calcularán utilizando programas disponibles en el grupo.

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

Objetivos planteados:

1. Adquirir familiaridad con la física de materiales electroreológicos;
2. Aplicar las bases teóricas desarrolladas durante los estudios de grado a la investigación de fluidos complejos;
3. Desarrollar familiaridad con técnicas de simulación molecular (Dinámica Molecular) y paquetes avanzados de simulación (Gromacs);
4. Consolidar o desarrollar habilidades de programación;
5. Analizar y comunicar los resultados de investigación de forma crítica por escrito y oralmente;

Bibliografía básica:

[1] L. Tonti, F. A. García Daza, A. Patti, Kinetics of isotropic to string-like phase switching in electrorheological fluids of nanocubes, J. Chem. Phys., 157, 224906, **2022**.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Se recomienda repasar la teoría de colectividades introducida en el curso de Física Estadística y familiarizarse con los conceptos basicos de Dinamica Molecular.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: ALESSANDRO PATTI

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA APLICADA

Correo electrónico: apatti@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: ALVARO ITURBE JABALOYES

Correo electrónico: alvaroiturbe@correo.ugr.es