UNIVERSIDAD DE GRANADA

FACULTAD DE CIENCIAS

Propuesta TFG. Curso 2026/2027

GRADO: Grado en Física

CÓDIGO DEL TFG: 267-089-2026/2027

1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Trayectorias y fractalidad en sistemas de partículas cercanos a una transición líquido-sólido

Descripción general (resumen y metodología):

El transporte microscópico en sistemas de partículas cercanos a una transición líquido-sólido evoluciona desde una dinámica difusiva (característica del estado líquido) a una “dinámica a saltos”, que aparece cuando el sistema se acerca al estado sólido. Esta última dinámica ha sido documentada en una amplia variedad de sistemas regulados por diferentes parámetros de control. Entre estos sistemas se encuentran: los líquidos moleculares controlados por temperatura, los sistemas de partículas coloidales regulados mediante fracción de volumen, los medios granulares controlados por esfuerzos mecánicos, los medios biológicos complejos condicionados por el pH y los sistemas activos, en los que el transporte es a menudo conducido por energía química de origen metabólico.

La dinámica difusiva ideal, propia de un sistema líquido, está caracterizada, según la teoría clásica de Einstein, por una distribución de desplazamientos gaussiana cuya varianza crece linealmente con el tiempo. Esta manifestación dinámica ideal es abandonada a medida que el sistema se acerca a la transición, apareciendo distribuciones de desplazamientos con largas colas exponenciales (y por tanto no gaussianas), además de amplias regiones en las que las partículas muestran una dinámica cooperativa, donde el movimiento de una partícula presenta una correlación de larga distancia con el de otras partículas. Estas correlaciones de largo alcance dan lugar a la presencia de heterogeneidades dinámicas, donde el sistema se muestra como un “mosaico dinámico”, que evoluciona en el tiempo, formado por amplias regiones activas (con dinámica significativamente rápida) y amplias regiones pasivas (con dinámica significativamente lenta).

Este Trabajo de Fin de Grado (TFG) se centra en el estudio de esta heterogeneidad dinámica y en cómo ésta puede manifestarse a través de la topología de las trayectorias de las partículas. En un régimen líquido ideal (difusivo), la dimensión fractal de las trayectorias de las partículas posee un valor prescrito igual a 2 (para un espacio tridimensional). Es de esperar, en cambio, que la convergencia a dicho valor se vea afectada por la presencia de heterogeneidad dinámica, a medida que el sistema se acerque a la transición de fase. En este sentido, las trayectorias de las partículas no alcanzarían el valor prescrito hasta haber consumado un “viaje ergódico”, que haya llevado a las partículas a recorrer tanto regiones activas como pasivas. Así, los rangos espaciales y temporales asociados a una trayectoria ergódica crecerían a medida que el sistema se acercase a la transición, como crece el tamaño de esas regiones heterogéneas. Pensamos, por tanto, que un estudio de la evolución de la dimensión fractal de estas trayectorias puede arrojar luz sobre la extensión de la dinámica cooperativa en una amplia variedad de sistemas.

METODOLOGÍA

En una primera fase, la estudiante se familiarizará con la base teórica asociada tanto a la difusión ideal como a la difusión anómala. En esta primera fase, la estudiante adquirirá, además, formación sobre la fenomenología empírica y los distintos modelos teóricos asociados a la transición de fase líquido-sólido en sistemas desordenados (no cristalinos). Con esta formación, la estudiante comenzará, en una segunda fase, a trabajar con simulaciones de dinámica molecular, que

constituirán la principal fuente fenomenológica de este trabajo. Esto implicará aspectos puramente físicos, como la discriminación entre medidas ergódicas y no ergódicas, y aspectos meramente computacionales, como el acceso remoto y gestión asociados a una estación de trabajo o el uso y producción de códigos para el análisis de datos. En una tercera fase, la estudiante adquiriría una base teórica adecuada sobre geometría fractal, incluyendo el uso de algoritmos que permitan analizar las trayectorias obtenidas mediante dinámica molecular, así como la visualización de estas trayectorias mediante software de visualización (v.g. VMD). En una última fase, la estudiante trabajará en el desarrollo de modelos estocásticos esquemáticos con los que racionalizar los principales resultados empíricos.

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

Objetivos planteados:

Caracterización fractal de las trayectorias empíricas obtenidas mediante dinámica molecular. Interpretación de los resultados obtenidos en base a una representación de mosaico, en la que se buscará una caracterización de las regiones heterogéneas mediante escalas de longitud y tiempo. Formulación de modelos estocásticos esquemáticos que resuman la fenomenología empírica.

Bibliografía básica:

[1] L. Berthier and G. Biroli, Rev. Mod. Phys. 83, 587 (2011).
[2] J.M. Miotto, S. Pigolotti, A.V. Chechkin, and S. Roldán-Vargas, Phys. Rev. X, 11, 031002 (2021).
[3] T. Vicsek, Fractal Growth Phenomena, 2nd Edition, World Scientific, Singapore (1992).
[4] N. G. van Kampen, Stochastic Processes in Physics and Chemistry, 2nd Edition, Elsevier, Amsterdam (2004).
[5] D.C. Rapaport, J. Stat. Phys. 40, 751 (1985).
[6] J. P. Bouchaud and A. Georges, Phys. Rep. 195, 127 (1990).
[7] R. Metzler and J. Klafter, Phys. Rep. 339, 1 (2000).

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Formación en física estadística. Competencia en análisis de datos. Nociones de computación. Capacidad para el desarrollo de modelos teóricos.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: SÁNDALO ROLDÁN VARGAS

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA APLICADA

Correo electrónico: sandalo@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:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos: JULIA LOPEZ MARTIN

Correo electrónico: julialmartin@correo.ugr.es