



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Modelado y simulación de polímeros 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.

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: