

GRADO EN FÍSICA- CURSO 2015/16

Ficha Trabajo Fin de Grado

Departamento:

FÍSICA APLICADA I

Título del tema:

Modelización de materia condensada

Plazas:

5

Objetivos:

Las simulaciones por ordenador constituyen una herramienta en el estudio de la materia condensada, junto a la teoría y los experimentos. Las simulaciones nos pueden ayudar tanto a confirmar predicciones teóricas como a entender y predecir resultados experimentales.

En este trabajo se pretende dar a conocer al alumno las modernas técnicas utilizadas en la modelización de materia condensada. Utilizando conceptos básicos de Física Estadística, el estudiante se familiarizará con técnicas de simulaciones como la Dinámica Molecular o el Monte Carlo.

Dependiendo del interés del alumno, se realizarán simulaciones de algunos de los siguientes sistemas de actualidad:

- Nucleación de cristales de coloides cargados
- Nucleación de burbujas en un fluido metaestable
- Simulaciones de bacterias
- Cálculo de la energía interfacial en el modelo de Ising
- Nucleación heterogénea

Metodología:

El estudiante estudiará la bibliografía sugerida, familiarizándose con las Bases teóricas.

Aprendizaje y utilización de un código de simulación opensource (como LAMMPS o GROMACS), el estudiante aprenderá los fundamentos de las técnicas de simulación de Dinámica Molecular y Monte Carlo, obteniendo resultados numéricos, contextualizándolos e interpretándolos.

Si fuese necesario el estudiante, bajo la supervisión del profesor responsable del TFG, escribirá códigos numéricos, tanto de simulación como de análisis de datos.

Bibliografía:

Se incluyen referencias de interés para el desarrollo de los objetivos.

Los artículos científicos:

Los libros:

1. "Understanding Molecular Simulations", D. Frenkel and B. Smit, Academic Press, London, (2001).
2. "Computer simulations of liquids", M. P. Allen and D. J Tildesley, Oxford University Press, (1989).

Los artículos:

1. "Detecting vapour bubbles in simulations of metastable water"; M.A.Gonzalez, G.Menzl, J.L.Aragones, P.Geiger, F.Caupin, J.L.F.Abascal, C.Dellago and C.Valeriani, J. Chem. Phys. 141 18C511 (2014).
2. "Bubble nucleation in simple and molecular liquids via the largest spherical cavity method"; M.A.Gonzalez, J.L.F.Abascal, C.Valeriani and F.Bresme, JChem Phys 142 154903 (2015).
3. "Nucleation free-energy barriers using molecular dynamics umbrella sampling"; M.A.Gonzalez, E.Sanz, C.Mcbride, J.L.F.Abascal, C.Vega and C.Valeriani, Phys.Chem.Chem.Phys. 16 24913 (2014).
4. "Homogeneous ice nucleation at moderate supercooling from molecular simulations"; E. Sanz, C. Vega, J.R. Espinosa, R. Bernal, J. Abascal and C. Valeriani J. Am. Chem. Soc, 135 15008 (2013) [Spotlight article DOI: 10.1021/ja410682n]
5. "The crystal-fluid interfacial free-energy and nucleation rate of NaCl from different simulation methods"; J.R.Espinosa, C.Vega, C.Valeriani and E.Sanz, in press JChem Phys (2015).
6. "Avalanches mediate crystallization in a hard-sphere glass"; E. Sanz, C. Valeriani, E. Zaccarelli, W.C.K. Poon, M. Cates and P.N. Pusey PNAS 75 111 (2014).
7. "Chemotactic clusters in confined run-and-tumble bacteria: a numerical investigation"; E.J. Marsden, C. Valeriani, I. Sullivan, M.E. Cates and D. Marenduzzo Soft Matter, 10 157 (2014).
8. "Living clusters and crystals from low density suspensions of active colloids"; B. Mognetti, A. Saric, S. Angioletti-Uberti, A. Cacciuto, C. Valeriani and D. Frenkel Phys.Rev.Lett., 111 245702 (2013) Focus article by Philip Ball Physics 6 134 (2013).
9. "Phase-separation and rotor self-assembly in active particle suspensions"; J. Schwarz-Linek, C. Valeriani, A. Cacciuto, M.E. Cates, D. Marenduzzo, A. Morozov and W.C.K. Poon PNAS 106, 4052 (2012).

Una vez que el estudiante se haya iniciado en el tema, se le proporcionará bibliografía adicional.