



Universidad de Valladolid

Facultad de Ciencias
Sección de Física

Oferta de temas de Trabajos de Fin de Grado (TFG) de Física, en el curso académico 2018-19

La siguiente lista de temas de TFG ha sido aprobada por la Comisión Académica del Grado en Física para el curso académico 2018-19. Podrán optar a solicitar uno de los TFG todos los alumnos matriculados en la asignatura TFG y los inscritos, de acuerdo a la normativa de la Facultad de Ciencias.

Los alumnos podrán dirigirse a los tutores de los TFG para solicitarles cualquier aclaración, si fuera necesaria, antes de realizar su solicitud, con el propósito de realizar una elección fundamentada.

La solicitud será enviada por email al coordinador del Grado en Física, a la dirección presidente.fisica.cie@uva.es, haciendo constar una lista priorizada de, como mínimo, 3 TFG. La Comisión Académica realizará la adjudicación de acuerdo a la normativa, mediante los criterios: i) solicitud del alumno y ii) expediente académico.

Las solicitudes deberán realizarse antes del 31 de octubre de 2018.

Valladolid, a 17 de octubre de 2018

Fdo. Ismael Barba García
Presidente de la Sección de Física
(Aprobado por el Comité de Título)

1. Título: “Efecto de microporosidad en la fractalidad de superficies poliméricas mediante AFM”

Tutores: Pedro Prádanos, Laura Palacio.

Tema:

La Microscopía de Fuerza Atómica (AFM) es una técnica que permite el estudio de superficies de materiales desde la microescala hasta la escala atómica, basada en la fuerza de interacción de una sonda afilada a escala atómica (punta o "tip") y la muestra. Esto permite la obtención de una imagen tridimensional de una superficie. La rugosidad de estas superficies se puede relacionar con su dimensión fractal; y esta dimensión fractal permite clasificar el tipo de superficie que estamos analizando. En este trabajo se pretende determinar cómo influye la presencia de microporos en la fractalidad de una superficie polimérica.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Es incompatible hacerlo a distancia ya que tiene una carga experimental a realizar en el laboratorio.

2. Título: “Determinación de tamaño de nanoporos por Espectroscopía de impedancias”.

Tutores: Laura Palacio Martínez, Pedro Prádanos.

Tema:

La caracterización estructural de materiales, necesita ir evolucionando y mejorando a medida que se pretende llegar al estudio de tamaños cada vez más pequeño. En este trabajo, se pretende comprobar la validez de la espectroscopía de impedancias, una técnica ampliamente usada en otros ámbitos, para el estudio de la distribución de tamaños de poro de materiales nanoporosos.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Es incompatible hacerlo a distancia ya que tiene una carga experimental a realizar en el laboratorio.

3. Título: “Aplicación del modelo WRF a predicción meteorológica”

Tutora: M^a Luisa Sánchez Gómez.

Tema:

Análisis y estudio del modelo WRF para su uso como sistema de predicción meteorológica. El objetivo principal será hacer simulaciones de fechas pasadas, pero a modo de predicción, con el fin de poder comparar los resultados obtenidos en las simulaciones con lo sucedido realmente y analizar la fiabilidad y error del modelo en distintos entornos geográficos, épocas del año y condiciones.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Es incompatible hacerlo a distancia

Observaciones adicionales:

Continuación de prácticas de empresa. Son necesarios conocimientos en programación C++, Phyton y saber utilizar el software asociado a las simulaciones mediante WRF.

4. Título: “Algoritmo de detección de nubes a partir de redes neuronales perceptrón multicapa en imágenes satelitales”

Tutora: M^a Luisa Sánchez Gómez.

Tema:

Uno de los graves problemas de la observación desde el espacio son las nubes. Cuando se trata de nubes de desarrollo vertical, cúmulos o las correspondientes a frentes de evolución la distinción de los píxeles contaminados es relativamente fácil. Sin embargo, en el caso de neblinas, velos cirrosos de escaso espesor o bordes de nubes más grandes el problema se complica. En este trabajo se intentará implementar un algoritmo que sea capaz de detectar nubes en diversas imágenes satelitales, con especial énfasis en nubes tenues o nubes en el borde de las nubes. Las imágenes que se utilizarán serán MODIS, NOAA y SNPP y el método será un método computacional basado en redes neuronales. Finalmente se procederá al cálculo del error de entropía cruzada para estimar la eficacia del entrenamiento de dicha red utilizando como referencia datos de AEMET. El resultado final se espera que pueda ser utilizado de forma operacional en observaciones rutinarias.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Es incompatible hacerlo a distancia

5. Título: “Análisis de la distribución espacial y de la evolución de la precipitación”

Tutores: Isidro A. Pérez, M^a Ángeles García.

Tema:

La precipitación es una variable meteorológica de gran interés medioambiental. El presente trabajo consiste en un tratamiento de datos obtenidos de una base de acceso libre. Inicialmente se realizará un tratamiento estadístico con los datos globales, seguido de una distribución espacial de diferentes estadísticos. Al ser una base de datos con una amplia extensión temporal, se investigará la evolución global de la precipitación para conocer en detalle su tendencia. Por último, se realizará un análisis espacial de dicha tendencia.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Es incompatible hacerlo a distancia

6. Título: “Estudio de la isla urbana de calor”

Tutores: Isidro A. Pérez y M^a Ángeles García.

Tema:

Es conocido el hecho de que la respuesta de un medio urbano ante la radiación solar es distinta de la de un medio rural. La menor cubierta vegetal, la presencia de focos de calor y la existencia de edificios de gran tamaño determinan un contraste térmico entre la ciudad y sus alrededores. En este trabajo se plantea analizar dicho contraste mediante el uso de una base de datos de acceso libre. Para ello, se seleccionará una región entorno a una ciudad. Se estudiará la distribución topográfica y de población y se analizará su relación con la temperatura. También se cuantificarán el contraste térmico entre el centro y la periferia y la evolución de dicho contraste.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Es incompatible hacerlo a distancia

7. Título: “Leyes de escala: tamaño, forma y vida”

Tutores: José Carlos Cobos Hernández, Ana Cobos Huerga, Luis Fernando Hevia de los Mozos.

Tema:

Se estudiarán algunos conceptos y leyes físicas necesarios para comprender los fenómenos estudiados en Biología, ya que los seres vivos siguen las mismas leyes generales que rigen el comportamiento de cualquier sistema físico (gravedad, tensión superficial, intercambios de energía, etc.).

En la naturaleza se da una gran variedad de formas y tamaños. Desde la descomunal ballena azul, hasta el micoplasma, hay 21 órdenes de magnitud. ¿Podemos encontrar relaciones generales que nos permitan extrapolar o comparar propiedades o fenómenos de una escala a otra? La clave para responder estas y otras preguntas nos las proporcionan el análisis dimensional y las leyes de escala. Las leyes de escala nos permiten estudiar cómo dependen las propiedades y funciones de los seres vivos de su tamaño. El tamaño está relacionado con la función de los seres vivos; a mayor tamaño mayor complejidad. También está relacionado con la forma. No es posible tener una célula tan grande como una hormiga, ni una hormiga tan grande como una persona. Para determinar la variación de una propiedad con el tamaño utilizaremos el principio de semejanza establecido por Arquímedes, combinado, en el caso de los seres vivos, con alguna hipótesis biológica, ya que ya Galileo, dos mil años después, se dio cuenta de que este principio presenta limitaciones.

Conviene insistir desde el principio en que NO existen leyes de escala generales, sino que, para poder comparar fenómenos físicos de organismos de diferente tamaño siempre hay que establecer una hipótesis biológica (no lineal, casi siempre). Y, que lo más importante de dichas leyes es, precisamente, el exponente con el que una magnitud se relaciona con otras. Se estudiarán como ejemplos: La fuerza relativa, la división celular, la tasa, velocidad o ritmo metabólico....

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Es incompatible hacerlo a distancia

8. Título: “Aprendiendo física en ambientes informales con smartphones”

Tutores: Manuel Ángel González Delgado, Miguel Ángel González Rebollo

Tema:

El TFG consiste en diseñar experimentos de física que se puedan realizar en actividades diarias utilizando como instrumento de medida un smartphone y alguna aplicación ya desarrollada que permita acceder a los sensores del dispositivo (acelerómetro, giróscopo, magnetómetro, sensor de sonido, sensor de luz, sensor de proximidad, barómetro, ...). El alumno debe identificar situaciones y experimentos susceptibles de poderse realizar de dicha manera, establecer la metodología, realizar medidas de ejemplo, analizar los resultados tanto desde un punto de vista experimental (exactitud, repetibilidad, ...) como teórico (comparación con modelos o teorías) y escribir un breve resumen o guion que permita orientar a otros alumnos para que puedan

repetirla con sus propios dispositivos. Este breve resumen de cada práctica diseñada será ya una parte de la memoria que se debe entregar del TFG.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Es incompatible hacerlo a distancia

9. Título: “Desarrollo de prácticas de física de bajo coste mediante sensores”

Tutores: Manuel Ángel González Delgado, César Llamas Bello

Tema:

El TFG consiste en adaptar una práctica de un laboratorio de física basada en el estudio del movimiento en un carril de aire. Esta adaptación se basará en el uso de sensores baratos (acelerómetros, giróscopos, ultrasonidos o infrarrojos) que permitan obtener las posiciones, velocidades y aceleraciones de los cuerpos que se desplazan sobre el carril. El dispositivo electrónico (sensores, arduino o raspberry pi) están adquiridos y funcionando, de manera que el TFG se basará en los aspectos de estudio y adaptación de la práctica de laboratorio, detección de errores o puntos débiles y mejora de los mismos, análisis de las medidas, propuesta de montaje y redacción de las memorias de trabajo para que cualquier otro alumno pueda repetir las medidas con dichos sensores.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:

Es incompatible hacerlo a distancia

10. Título: “Desarrollo de prácticas de física usando smartphones”

Tutores: Manuel Ángel González Delgado, Miguel Ángel González Rebollo

Tema:

El TFG consiste en adaptar diferentes prácticas de física de laboratorio para que puedan ser realizadas usando los sensores incluidos en un smartphone o tableta (acelerómetro, giróscopo, magnetómetro, sensor de sonido, sensor de luz, sensor de proximidad, barómetro, ...) como herramientas de medida. El alumno debe identificar algunas prácticas del laboratorio de TEF I susceptibles de poderse realizar usando smartphones, establecer la metodología, realizar medidas de ejemplo, analizar los resultados comparándolas con la técnica tradicional de realización y escribir un breve resumen o guion de la práctica para realizarla con el smartphone. Este breve resumen de cada práctica diseñada será ya una parte de la memoria que se debe entregar del TFG.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Es incompatible hacerlo a distancia

11. Título: “Medida de las curvas de coexistencia del equilibrio líquido-líquido en sistemas formados por un componente aromático polar + un alcano”

Tutores: Isaías García de la Fuente, Juan Antonio González López

Tema:

Se pretende que el alumno domine la técnica de medida del equilibrio líquido-líquido (ELL). Para ello, determinará curvas de coexistencia del ELL de mezclas de interés tanto teórico como industrial. En particular, se estudiarán sistemas donde el componente polar posea el grupo funcional carbonilo ó éster. Asimismo, a lo largo del trabajo, el alumno se familiarizará con la Termodinámica de los equilibrios de fase, prestando especial atención al ELL y con los métodos de reducción de datos mediante la técnica de ajustes no lineales, lo que le permitirá obtener información sobre los exponentes críticos.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Es incompatible hacerlo a distancia.

12. Título: “Determinación experimental de las curvas de coexistencia del equilibrio líquido-líquido mediante el método de la opalescencia crítica en sistemas formados por un hidroxiéter + un alcano”

Tutores: Juan Antonio González López, Isaías García de la Fuente

Tema:

El objetivo que se pretende es que el alumno domine la técnica de medida del equilibrio líquido-líquido (ELL). Para ello, determinará curvas de coexistencia del ELL de mezclas de interés tanto teórico como industrial. En particular, se estudiarán sistemas donde el componente polar posea varios grupos oxígeno. Asimismo, a lo largo del trabajo, el alumno se familiarizará con la Termodinámica de los equilibrios de fase, prestando especial atención al ELL y con los métodos de reducción de datos mediante la técnica de ajustes no lineales, lo que le permitirá obtener información sobre los exponentes críticos.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Es incompatible hacerlo a distancia.

FÍSICA TEÓRICA (6)

13. Scattering no relativista en una dimensión y su aplicación al potencial Pöschl-Teller

Tutores: Manuel Gadella Urquiza y José María Muñoz Castañeda

Resumen:

En primer lugar se trata de desarrollar la teoría general del scattering cuántico no relativista (matriz y estados de scattering, continuación analítica de la matriz S -polos y estados ligados-, el teorema de Levinson y el problema de los "modos cero"). A continuación se aplicará todo lo anterior al potencial de Pöschl-Teller (ya sea en su versión clásica o en la más general) y se discutirán los diversos ámbitos de la Física en los que este potencial juega un papel importante. Son suficientes conocimientos a nivel de grado de mecánica cuántica. El trabajo es puramente teórico.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No.

14. El modelo de Friedrichs para resonancias en mecánica cuántica no relativista

Tutor: Manuel Gadella Urquiza

Resumen:

En el modelo de Friedrichs se estudia una interacción entre un átomo con un nivel y un campo externo. Esta interacción hace que el átomo se vuelva inestable. Estados cuánticos inestables se pueden representar mediante funciones de Gamow, y en el modelo de Friedrichs se pueden obtener exactamente. Por otro lado, resonancias se estudian en un tipo de proceso de difusión (scattering) resonante. Curiosamente, el modelo de Friedrichs se adapta bien a esta descripción mediante difusión resonante. Se pueden explicitar los operadores de Moller y el operador S de scattering en este modelo. Podría hacerse una extensión a más de un nivel. Son suficientes conocimientos a nivel de grado de mecánica cuántica. El trabajo es puramente teórico.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No.

15. Operadores escalera para algunos potenciales solubles

Tutores: Manuel Gadella Urquiza y Javier Negro Vadillo

Resumen:

Los operadores escalera relacionan las funciones de onda de los estados ligados para algunos potenciales solubles, tales como el oscilador armónico. Cabe preguntarse si existen operadores escalera que relacionen estados resonantes y estados virtuales (generalmente llamados antibound en la literatura) entre sí. Los estados resonantes describen la parte puramente exponencial de los estados cuánticos inestables, y son por lo tanto muy interesantes. Los modelos que pueden estudiarse son unidimensionales, pues ellos nos combinan la solubilidad (no siempre, pero son siempre más sencillos que sus modelos similares en más de una dimensión) con una buena información sobre procesos cuánticos. En el caso del potencial Pöschl-Teller hiperbólico repulsivo (potencial proporcional al inverso del coseno hiperbólico al cuadrado), se han encontrado dichos operadores escalera. Se trataría de investigar si otros tipos de potenciales unidimensionales solubles admiten una construcción similar. Una de las posibles aplicaciones sería la potencial construcción de estados coherentes usando estados resonantes.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No.

16. Estados no clásicos de la luz: fundamentos matemáticos y aplicaciones físicas

Tutor: Luis Miguel Nieto Calzada

Resumen:

Se pretende familiarizar al estudiante con los diversos tipos de estados no clásicos de la luz, que fueron introducidos por R. Glauber, el premio Nobel de Física en 2005. Deberá entenderse adecuadamente el fundamento matemático que hay detrás de este tipo de estados y exponer algunos de los ejemplos bien conocidos de estados coherentes y estados comprimidos (squeezed). La ayuda de programas de cálculo simbólico permitirá obtener interesantes representaciones gráficas y animaciones. Este trabajo es puramente teórico.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No.

17. Análisis cuántico de hamiltonianos unidimensionales dependientes del tiempo

Tutor: Luis Miguel Nieto Calzada

Resumen:

Se abordará la resolución de diversos problemas unidimensionales en los cuales el potencial cuántico correspondiente depende del tiempo de manera relativamente sencilla, analizando las propiedades físicas más relevantes que aparezcan. Se utilizarán diversas técnicas matemáticas, tanto analíticas, como numéricas y gráficas. La ayuda de programas de cálculo simbólico permitirá obtener interesantes representaciones de los resultados. Este trabajo es puramente teórico.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No.

18. Oscilaciones de placas: soluciones de la ecuación biarmónica

Tutor: Luis Miguel Nieto Calzada

Resumen:

Se propone la resolución detallada de la ecuación que rige las oscilaciones de una placa metálica, que no es la ecuación de Laplace, sino la ecuación biarmónica. Los resultados son más complejos que en el conocido caso de las oscilaciones de una membrana, y deberán abordarse de forma analítica, pero también numérica y usando métodos variacionales. La ayuda de programas de cálculo simbólico permitirá obtener interesantes representaciones gráficas de las figuras de Chladni así como animaciones. Este trabajo es puramente teórico.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No.

19. Título: Modelización de propiedades estructurales y electrónicas en nano-agregados de magnesio

Tutor: Andrés Aguado Rodríguez

Resumen:

El objetivo de este trabajo es que el alumno aprenda a manejar un código de primeros principios y que lo aplique a la determinación de las propiedades estructurales, energéticas y electrónicas de pequeños agregados homoatómicos del tipo Mg_N , donde N es el número total de átomos. En concreto, utilizaremos el código SIESTA (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms), que resuelve las ecuaciones de Kohn-Sham de la Teoría del Funcional de la Densidad para obtener la estructura electrónica, la energía, y las fuerzas interatómicas en los agregados de magnesio. La meta de estos cálculos (sobre agregados de tamaño pequeño) será el obtener datos fiables acerca de la estructura de mínima energía adoptada por dichos agregados, en la medida de lo posible tratando de reproducir medidas experimentales (espectros de masas, espectros fotoelectrónicos, etc.) El trabajo servirá para que el alumno tenga un primer contacto con métodos cuánticos y también con métodos aproximados de simulación en Física Molecular, y para que aprecie la importancia de dichos métodos en la interpretación fundamental de experimentos actuales en el campo de investigación de nano-agregados y nano-partículas metálicas.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Este TFG no se oferta a alumnos en movilidad.

20. Título: El vehículo de Gas Natural Adsorbido, GNA. Materiales nanoporosos para almacenamiento reversible de metano y gas natural

Tutor: Iván Cabria Álvaro

Resumen:

Los vehículos de gas natural son mucho menos contaminantes que los vehículos de gasolina y diésel. Recorrer 100 km con un vehículo de gas natural es más barato que con vehículos de gasolina y diésel. Su autonomía, sin embargo, es mucho menor: 300-400 km los vehículos de gas y 600-1500 km los de gasolina y diésel. Los vehículos habituales de gas natural son vehículos de Gas Natural Comprimido, GNC: Almacenan el gas natural por compresión a altas presiones (200-250 bares). Una alternativa es el vehículo de GNA, que almacena el gas natural por adsorción a menores presiones (50-65 bares) en materiales nanoporosos. El vehículo o tecnología de GNA se está desarrollando hoy en día, con dos objetivos: Almacenar la misma cantidad en un depósito de GNA que un depósito de GNC, usando el mismo volumen utilizable del vehículo, y alcanzar una autonomía de al menos 500-600 km. Las investigaciones se dirigen a mejorar los materiales nanoporosos, entre otras vías.

Este Trabajo de Fin de Grado se enmarca dentro de las mencionadas investigaciones para mejorar la tecnología de GNA y tiene dos tareas principales: a) Realizar una búsqueda bibliográfica y resumir el estado actual de la tecnología de almacenamiento de metano y gas natural en vehículos de GNA, centrada en los materiales nanoporosos que se usan para almacenar estos gases. b) Realizar y analizar simulaciones de Monte Carlo-Metrópolis del almacenamiento de metano y gas natural en materiales nanoporosos y en comparar las simulaciones con los experimentos. Los materiales nanoporosos que se estudiarán en las simulaciones son: Nanoporos de carbono plano-paralelos, nanotubos, fullerenos, torusenos de carbono y schwarzitas de diferentes tamaños y MOFs (Metal-Organic Frameworks). Estos materiales se usan para almacenar metano y gas natural en los vehículos de GNA (Gas Natural Adsorbido) a temperatura ambiente y a presiones entre 5 y 250 bares. Por tanto, las simulaciones se harán a esa misma temperatura y presiones.

Las interacciones entre las moléculas y entre las moléculas y los átomos de los materiales nanoporosos se simularán mediante potenciales de Lennard-Jones. Se simulará el conjunto macrocanónico (potencial químico, temperatura y volumen constantes) y se calcularán las capacidades gravimétricas y volumétricas de almacenamiento de los materiales nanoporosos. Finalmente, se analizarán dichas capacidades y se explicará el origen físico de su dependencia de la temperatura, la presión, el tamaño y la forma de los materiales nanoporosos. Se proporcionará al alumno un código que hace este tipo de simulaciones de Monte Carlo-Metrópolis. No se necesitan conocimientos de programación.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Este TFG también se oferta a alumnos en movilidad

21. Título: El vehículo de Hidrógeno. Materiales nanoporosos para almacenamiento reversible de hidrógeno

Tutor: Iván Cabria Álvaro

Resumen:

Una alternativa a los vehículos basados en combustibles fósiles son los vehículos de hidrógeno. Estos vehículos no emiten CO₂, ni NO_x, ni partículas contaminantes. Su principal problema es su baja autonomía: 100-200 km. Los vehículos de gasolina y diésel tienen una autonomía de 600-1500 km. Una de las formas de almacenar hidrógeno a bordo de un vehículo es el almacenamiento en materiales nanoporosos mediante adsorción. El objetivo tecnológico y de ciencia básica es obtener un material nanoporoso que almacene suficiente hidrógeno como para recorrer 600 km. Este Trabajo de Fin de Grado se enmarca dentro de las mencionadas investigaciones del vehículo de hidrógeno y tiene dos tareas principales:

- a) Realizar una búsqueda bibliográfica y resumir el estado actual de la tecnología del vehículo de hidrógeno, centrada en el almacenamiento de hidrógeno en materiales nanoporosos.
- b) Realizar y analizar simulaciones de Monte Carlo-Metrópolis del almacenamiento de hidrógeno en materiales nanoporosos y en comparar las simulaciones con los experimentos.

Los materiales nanoporosos que se estudiarán en las simulaciones son: Nanoporos de carbono plano-paralelos, nanotubos, fullerenos, torusenos de carbono y schwarzitas de diferentes tamaños y MOFs (Metal-Organic Frameworks). Los grupos de investigación básica y aplicada estudian el almacenamiento de hidrógeno en estos materiales a temperatura ambiente y a presiones entre 5 y 250 bares. Por tanto, las simulaciones se harán a esa misma temperatura y presiones. Las interacciones entre las moléculas y entre las moléculas y los átomos de los materiales nanoporosos se simularán mediante potenciales de Lennard-Jones. Se simulará el conjunto macrocanónico (potencial químico, temperatura y volumen constantes) y se calcularán las capacidades gravimétricas y volumétricas de almacenamiento de los materiales nanoporosos. Finalmente, se analizarán dichas capacidades y se explicará el origen físico de su dependencia de la temperatura, la presión, el tamaño y la forma de los materiales nanoporosos. Se proporcionará al alumno un código que hace este tipo de simulaciones de Monte Carlo-Metrópolis. No se necesitan conocimientos de programación.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Este TFG también se oferta a alumnos en movilidad.

22. Título: Simulaciones dinámicas de la reactividad de agregados metálicos

Tutor: Luis Miguel Molina Martín

Resumen:

El proyecto consistirá en aplicar simulaciones de dinámica molecular al estudio de reacciones catalíticas de interés (oxidación de CO, disociación de oxígeno, etc..) en nanocatalizadores metálicos. Se investigará la forma en que el calor liberado en este tipo de reacciones químicas se transfiere al catalizador, y los potenciales efectos estructurales y dinámicos que puedan tener lugar. Las simulaciones se realizarán empleando métodos de primeros principios, basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT), y usando el código GPAW.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: El trabajo de fin de grado puede ser realizado sin problemas por alumnos en movilidad.

23. Título: Propiedades estructurales y dinámicas del metal oro en su fase líquida

Tutores: David J. González Fernández y Luis Enrique González Tesedo

Resumen:

Se trata de realizar un cálculo teórico de ciertas propiedades estructurales del metal oro en su fase líquida y a unas condiciones termodinámicas de presión y temperatura cercanas a las correspondientes a su punto triple. Este estudio se realizará mediante la técnica de simulación donde el oro líquido será caracterizado mediante un modelo consistente en unos 150 átomos y cuyas interacciones se describirán resolviendo la ecuación de Schroedinger para los electrones de valencia. De esta forma se generarán unos cuantos miles de configuraciones, las cuales servirán posteriormente para evaluar diferentes propiedades estáticas, dinámicas, así como algunos coeficientes de transporte.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Este TFG no se oferta a alumnos en movilidad.

Observaciones:

Se requieren conocimientos del entorno Linux.

24. Título: Estudio de primeros principios de la difusión del deuterio en la aleación líquida de litio-plomo.

Tutores: David J González Fernández y Luis Enrique González Tesedo

Resumen:

Un problema importante en la tecnología de reactores de fusión nuclear es el desarrollo de materiales de separación entre el plasma y los componentes estructurales del reactor para evitar su degradación. Además, la extracción de calor, la generación de tritio y la consecución de un flujo neutrónico adecuado también son aspectos esenciales. En este contexto se han propuesto diversos metales líquidos, entre ellos la aleación líquida de Li y Pb. El objetivo del presente proyecto es estudiar el comportamiento de isótopos del hidrógeno (presentes en el plasma) al ser absorbidos por la aleación líquida. Este estudio se realizará mediante simulaciones de dinámica molecular de primeros principios, analizando la estructura estática y el comportamiento dinámico.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Este TFG no se oferta a alumnos en movilidad.

Observaciones:

Se requieren conocimientos del entorno Linux.

25. Título: Determinación de alfa y beta total en aguas continentales y residuales mediante espectrometría de centelleo líquido

Tutoras: Pilar Iñiguez de la Torre y Marta Hernández Revilla

Resumen:

En este trabajo se pondrá a punto la determinación de alfa y beta total mediante un equipo de centelleo líquido aplicando las normas UNE-EN ISO 11704:16 y ATM D7283:13. Inicialmente se optimizarán determinados parámetros instrumentales como el PSA (Pulse ShapeAnalyzer), ventana de medida, tipo de vial, tiempo de conteo y proporción muestra/centelleador. Una vez establecidos estos parámetros se construirán las curvas de eficiencia tanto alfa como beta las cuales incluirán los límites de potabilidad incluidos en el Real Decreto 314/2016. Finalmente se validará el método estableciendo su repetibilidad, precisión e incertidumbre. Para esto último se realizará un diseño de experimentos con unas fuentes de control tanto reales como preparadas “in house”. A la par se realizarán estudios de corrección por extinción y estabilidad de fuentes, muestras y blancos. El trabajo requiere una dedicación alta a las medidas experimentales. Por ello sería conveniente que un elevado número de asignaturas para finalizar los estudios de Grado no representase un obstáculo.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Este TFG no se oferta a alumnos en movilidad.

26. Título: Nanoaleaciones especiales

Tutores: Julio Alfonso Alonso Martín y María José López Santodomingo

Resumen:

En casos especiales, dos metales inmiscibles en la fase macroscópica forman, sorprendentemente, algunos agregados atómicos bimetálicos muy estables. En este trabajo se propone investigar la razón de esta sorprendente miscibilidad que ocurre en la escala nanométrica, para así diseñar criterios de miscibilidad que permitan la síntesis de nuevas nanoaleaciones con propiedades especiales. Este tipo de agregados binarios es muy adecuado para constituir la unidad elemental de materiales nanoestructurados ya que, modificando su forma, tamaño y composición, permite alcanzar una gran versatilidad en las propiedades finales. La metodología de cálculo que se empleará para llevar a cabo este estudio es el Formalismo del Funcional de la Densidad (DFT), basado en la aplicación de la mecánica cuántica a sistemas de muchas partículas, que aúna precisión en los cálculos y versatilidad en el tratamiento de sistemas de complejidad creciente.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Este TFG no se oferta a alumnos en movilidad.

27. Título: Estudio comparativo de la adsorción y disociación de hidrógeno en nanopartículas de distintos metales de transición: aplicaciones en almacenamiento de hidrógeno y en pilas de combustible.

Tutores: María José López Santodomingo y Julio Alfonso Alonso Martín

Resumen:

El dopado de materiales de carbono porosos con nanopartículas metálicas (por ejemplo de paladio) mejora la capacidad de estos materiales para almacenar hidrógeno. El mecanismo propuesto en los estudios experimentales para justificar esta mejora se conoce con el nombre de “spill-over” (o desbordamiento) y consiste en la adsorción y disociación del hidrógeno molecular en la nanopartícula metálica y la posterior difusión del hidrógeno atómico hacia el soporte de carbono. Sin embargo, las evidencias teóricas muestran que este mecanismo no es viable en paladio debido a la alta energía con la que el paladio liga al hidrógeno atómico. Esto explica que el aumento encontrado experimentalmente en la capacidad de almacenamiento de carbones dopados con paladio sea pequeño. En este trabajo se propone el estudio teórico y computacional de la adsorción de H₂ y la disociación $H_2 \rightarrow H+H$ sobre pequeñas nanopartículas libres (de tamaño y estructura determinados) de metales del período 4 (que incluye los metales de transición 3d). El objetivo es comparar las barreras de disociación de los distintos metales e investigar si algún metal disocia fácilmente la molécula H₂ (baja barrera) y a la vez la energía de adsorción de la molécula disociada, H+H, es baja, con lo cual el spill-over sería más fácil que en Pd. El alumno tendrá la oportunidad de aprender y aplicar el método del funcional de la densidad, que es una técnica actual avanzada para el cálculo de estructuras electrónicas.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Este TFG no se oferta a alumnos en movilidad.

28. Desarrollo de un sistema para la monitorización del índice ultravioleta

Tutor: Carlos Toledano, Ramiro González

Resumen:

Se pretende desarrollar un prototipo de instrumento de bajo coste para la medida de índice ultravioleta en diversos entornos. Se partirá de elementos básicos y se desarrollará el instrumento a nivel de hardware y software. Así mismo se validarán las medidas frente a los equipos standard de medida de radiación ultravioleta de los que dispone el GOA-UVa. Se recomienda tener conocimientos de electrónica y programación.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No

29. Diferencias entre métodos para estimar las propiedades ópticas y físicas de las partículas suspendidas en la atmósfera

Tutores: David Mateos y Cristian Velasco

Resumen:

Los aerosoles se definen como las partículas, sólidas o líquidas, en suspensión en la atmósfera. Estas partículas tienen un gran impacto sobre la salud humana (calidad del aire) y sobre el clima, siendo los aerosoles el componente sobre el mayor incertidumbre se tiene en el estudio del cambio climático. Por tanto, es de gran interés conocer las propiedades de los aerosoles, tanto ópticas como físicas, para comprender su interacción con la atmósfera y la radiación solar y terrestre. Una forma para estimar estas propiedades es aplicando un modelo de inversión a las medidas de un fotómetro que mide la radiación solar y del cielo, como hace la establecida red de referencia AERONET (NASA). El Grupo de Óptica Atmosférica (GOA-Uva) ha desarrollado un nuevo método para estimar estas mismas propiedades juntando medidas de un ceilómetro a las del fotómetro para poder calcular además perfiles verticales de estas propiedades (y no sólo en columna). El trabajo que se propone consistirá en cuantificar las diferencias entre las propiedades obtenidas con este nuevo método y las suministradas por AERONET para poder validar la nueva metodología. El trabajo planteado no es de carácter experimental, si no que se trabajará directamente con los datos previamente medidos, por lo que unos conocimientos mínimos de programación serían recomendados.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: sí

30. Caracterización geométrica de una cámara de cielo

Tutores: Roberto Román, Juan Carlos Antuña

Resumen:

Las cámaras de cielo son dispositivos que capturan imágenes completas del cielo comúnmente a través de una lente ojo de pez. Estas imágenes se suelen utilizar con diferentes propósitos: detección de nubes y predicción de su posición; estimación de la calidad del aire; detección de bólidos, etc. Para todas estas aplicaciones es necesario conocer las coordenadas de la bóveda celeste que ve cada pixel. Para ello se necesita de una caracterización geométrica, que en este trabajo consistirá en la búsqueda de estrellas y cuerpos celestes conocidos en imágenes nocturnas capturadas por una cámara de cielo instalada en Valladolid. Una vez localizadas las estrellas necesarias, sus posiciones se correlacionaran con la posición de los píxeles que ven éstas. Se intentará automatizar este proceso para otro tipo de cámaras instaladas en otras localidades. El trabajo planteado no es de carácter experimental, si no que se trabajará directamente con las imágenes de cielo de una cámara y con software específico, por lo que unos conocimientos mínimos de programación (a poder ser Python o Matlab) serían recomendados.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: sí

31. Título: Implementación de un algoritmo de solución de las ecuaciones de movimiento en dinámica molecular clásica en Unidades de Procesado Gráfico (GPU).

Tutor: M.A. Gigosos

Resumen:

Se trata de implementar un algoritmo de las ecuaciones de movimiento de un conjunto de partículas cargadas encerradas en una caja cúbica con condiciones periódicas. Este sistema ya está operativo en sistemas GPU (software CUDA) pero sin considerar sincronismo entre bloques de cálculo. Las nuevas unidades de procesado gráfico ya incluyen esa posibilidad. Con el trabajo se busca transformar el software actual para aprovechar esa nueva prestación y permitir simulaciones con mayor número de partículas.

Requisitos: Programación en C++. Buen nivel de Física estadística.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No

32. Título: Modelado del cambio de la reflectancia, bajo la acción de un pulso láser, de un vidrio con capa superficial de alúmina dopada con bismuto.

Tutor: M.A. Gigosos

Resumen:

El objetivo del trabajo es desarrollar un programa de simulación de dinámica molecular clásica que permita reproducir los cambios de la reflectancia/transmitancia de nanopartículas de Bismuto embebidas en una lámina delgada de óxido de aluminio amorfo (alúmina), depositadas sobre vidrio (o cristal) cuando se someten a cambios de temperatura bruscos inducidos por irradiación láser de nanosegundos. Se deberán tener en cuenta los procesos de calentamiento, fusión del Bi, su difusión en el sistema y posterior solidificación. Todos estos procesos dan lugar a cambios de las propiedades ópticas de la lámina, en particular su transmitancia, objeto del estudio.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No

Observaciones adicionales:

Se requiere programación en C++. Buen nivel de Óptica y Física Estadística.

33. Título: Estudio de un metasuperficie mediante simulación numérica.

Tutor: Ismael Barba García.

Resumen:

Las Metasuperficies son el equivalente bidimensional de los Metamateriales, es decir, estructuras artificiales que presentan propiedades (electromagnéticas) inusuales, propiedades que proceden de la estructura diseñada y no de su composición, es decir, son distintas a las de sus materiales constituyentes; de esta manera, podemos diseñar propiedades efectivas que no encontramos en la naturaleza. En este trabajo, partiremos de una estructura metamaterial previamente conocida, y obtendremos las características de su comportamiento electromagnético mediante simulaciones numéricas.

Las simulaciones se realizarán a través de la interface de usuario del software comercial CST® MWS®, disponible en el Grupo de Investigación de Electromagnetismo Computacional, pudiendo ser necesario un postprocesado de resultados en un lenguaje de programación. También existe una versión libre para estudiantes en <https://www.cst.com/academia/student-edition>.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No

34. Título: Modelado numérico de la propagación de ondas electromagnéticas mediante métodos de Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo incondicionalmente estables

Tutora: Ana Grande Sáez.

Resumen:

La formulación clásica del método de las diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD) permite resolver numéricamente las ecuaciones de Maxwell en el dominio del tiempo. Este método da lugar a un algoritmo condicionalmente estable, es decir, el tamaño del paso temporal utilizado en el proceso de integración tiene un límite máximo por encima del cual el método es inestable. Cuando el tamaño de la celda espacial es muy pequeño el método resulta poco eficiente ya que el paso temporal de integración resulta innecesariamente pequeño. Este trabajo considera la posibilidad de emplear métodos alternativos de tipo incondicionalmente estable (ADI-FDTD). En este método el tamaño máximo del paso temporal no está limitado por razones de estabilidad, sólo por consideraciones de exactitud.

El trabajo a realizar consiste en la formulación y desarrollo de un algoritmo ADI-FDTD en dos dimensiones (TEz). La implementación del código se realizará en MatLab. Una vez desarrollada la formulación se realizará un estudio de la dispersión numérica, comparando los resultados obtenidos con el método FDTD convencional.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No

35. Título: Física de la Radioterapia

Tutores: Ana Cristina López Cabeceira, Diego Antón García

Resumen:

La radiofísica hospitalaria es una especialidad sanitaria bien desarrollada que tiene su origen en el uso de radiaciones ionizantes en los tratamientos médicos y en la protección radiológica para prevenir sus efectos dañinos. El trabajo se centrará en el estudio de aspectos teóricos y técnicos de la radiofísica aplicada a la radioterapia: interacción de la radiación con la materia, efectos sobre los seres vivos, dosimetría clínica, protección radiológica, equipos de imagen, ...

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Es incompatible hacerlo a distancia.

Otras consideraciones: Se plantea como la continuación de prácticas de empresa realizadas en el Hospital Campo Grande.

36. Título: Magnetometría: Estudio de los magnetómetros Fluxgate.

Tutores: José María Muñoz, Carlos Torres.

Resumen: Los magnetómetros fluxgate son dispositivos capaces de medir campos magnéticos débiles con resoluciones del orden de fracciones de nanotesla. Se basan en la medida de la imanación de materiales con coercitividades extremadamente bajas, generalmente aleaciones amorfas. Compiten en resolución con dispositivos mucho más complejos basados en resonancias magnetoópticas de átomos alcalinos en fase gaseosa, pero su simplicidad hace que sean los preferidos en multitud de aplicaciones, por ejemplo en los sensores magnéticos de sondas espaciales. Asimismo se emplean frecuentemente en el análisis de las perturbaciones del campo magnético terrestre producidas por fenómenos que ocurren más allá de la ionosfera.

En este trabajo se tratará de analizar y eventualmente construir un magnetómetro fluxgate. Inicialmente se abordará un estudio bibliográfico del funcionamiento y antecedentes de este peculiar tipo de dispositivo. Posteriormente se realizarán medidas sobre cintas de aleaciones tipo Metglas, tanto en el dominio del tiempo como en el de la frecuencia.

Por último se puede intentar la construcción de un instrumento funcional, inicialmente usando equipamiento básico de laboratorio (Amplificador Lock-In, generadores...) para, si fuese posible, acabar con un instrumento portátil usando un microcontrolador programado al efecto.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No

Otras consideraciones:

Se trata de un trabajo teórico – práctico. Se potenciarán competencias relacionadas con la investigación bibliográfica, la destreza en el trabajo en laboratorio y eventualmente la habilidad para usar microcontroladores en el diseño de instrumentos científicos.

37. Título: Electroacústica: análisis y síntesis de sonidos musicales.

Tutores: Oscar Alejos, José María Muñoz.

Resumen:

Actualmente, la mayoría de los instrumentos musicales electrónicos se basan en la reconstrucción de los sonidos mediante el uso de formas de onda almacenadas y modificadas según las necesidades. La calidad de estos sonidos depende de manera crítica de estas transformaciones o extrapolaciones, dado que la percepción del sonido es un asunto nada trivial.

En este trabajo se tratará de seguir el proceso conducente a la generación de un sonido musical que sea lo más similar posible al de un instrumento clásico. Para ello se representará, tanto en el dominio del tiempo como en el de la frecuencia el sonido de algunos instrumentos. Así se analizarán las variaciones temporales de la amplitud y frecuencia producidas por diversos tipos de ataque (Staccato...) y por diversas modulaciones (Vibrato, tremolo...), interpretándolas mediante modelos físicos simples.

Posteriormente se intentará sintetizar ese sonido mediante técnicas numéricas usando instrumentos de laboratorio (generadores de forma de onda arbitraria). Se buscará la estructura más simple de forma de onda y modulación que produzca sonidos semejantes perceptualmente a los originales. Si es posible, se tratará de implementar estos procedimientos en un microcontrolador sencillo a fin de obtener un generador económico con al menos una octava de extensión.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No

Otras consideraciones:

Se trata de un trabajo teórico – práctico. Se potenciarán competencias relacionadas con la investigación bibliográfica, el análisis numérico, el trabajo en laboratorio y eventualmente la habilidad para escribir programas en entornos tanto de ordenador como de microcontrolador.

38. Título: Fabricación y caracterización de cerámicas ferrimagnéticas

Tutores: Pablo Hernández Gómez

Resumen:

Los materiales magnéticos cerámicos son utilizados desde los años 40 en diversos campos tecnológicos y en la actualidad aún poseen importantes aplicaciones en campos como la conversión de potencia y dispositivos de microondas. En este trabajo se plantea la fabricación, mediante el método cerámico, de una serie de muestras ferrimagnéticas, así como la caracterización estructural, mediante difracción de rayos X, y la caracterización magnética mediante la medida del ciclo de histéresis, la susceptibilidad magnética transversal y/o la magnetoabsorción en el rango de frecuencias de microondas. El trabajo irá precedido de una revisión bibliográfica de las principales características de estos materiales y de sus métodos de fabricación más habituales. Es muy recomendable que el alumno haya cursado o esté cursando la asignatura optativa "Propiedades eléctricas y magnéticas de materiales"

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No

39. Título: Modelado atomístico de la señal de nanocalorimetría asociada a la eliminación de defectos en silicio irradiado.

Tutores: Pedro López Martín y Lourdes Pelaz Montes - Iván Santos Tejido

Resumen:

La implantación iónica es la técnica utilizada por excelencia para dopar los semiconductores y así fabricar los dispositivos electrónicos que tan extendidos están en todos los ámbitos. Los iones dopantes con elevada energía inciden sobre el silicio y durante la interacción con los átomos de la red cristalina van transfiriéndoles parte de la energía que llevan. Esto da lugar a desplazamientos de los átomos de su red cristalina formando defectos cristalográficos que almacenan energía potencial.

La diversa topología de los defectos formados (pequeños defectos puntuales, extensas dislocaciones, regiones amorfas, etc.) afecta negativamente a las prestaciones de los dispositivos fabricados o degradan el funcionamiento de los dispositivos en funcionamiento. Para eliminar este daño se aplica un tratamiento térmico al semiconductor irradiado, de forma que la activación térmica permite a los defectos evolucionar hacia configuraciones más estables o finalmente eliminarse completamente. Durante ese proceso los defectos van liberando energía en forma de calor, que puede medirse utilizando técnicas de nanocalorimetría. De esta manera las curvas obtenidas experimentalmente pueden informar sobre la tipología del daño que había en el semiconductor. No obstante, esta asignación es difícil de realizar a menos que se disponga de información sobre las energías de formación de los defectos y de la dinámica de los mismos.

El principal objetivo de este TFG es modelar desde un punto de vista atomístico la evolución de los defectos y la liberación de energía asociada, de forma que se puedan correlacionar las señales experimentales de nanocalorimetría de muestras de Si irradiado con el estado microscópico del material. Para ello se utilizará un código de Monte Carlo Cinético desarrollado en el Departamento de Electricidad y Electrónica que permite modelar la formación de defectos en Si durante la irradiación y su evolución durante el tratamiento térmico.

En el trabajo propuesto, el alumno se familiarizará con la fenomenología asociada a la interacción de partículas energéticas con una red cristalina y con la metodología de las simulaciones atomísticas. El candidato realizará pequeños desarrollos de modelos y los implementará en el programa de simulación, realizará simulaciones e interpretará los resultados de las simulaciones en base a las señales experimentales de calorimetría.

Se recomienda tener cierta predisposición a la programación.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: El TFG no puede realizarse en movilidad.

40. Título: Modelado atomístico del crecimiento epitaxial de SiGe.

Tutores: Luis Alberto Marqués Cuesta e Iván Santos Tejido

Resumen:

El crecimiento de películas delgadas es esencial en la fabricación de circuitos integrados, lo que ha dado lugar a avances sustanciales en esta tecnología durante los últimos 50 años. Para muchas aplicaciones es necesario formar una superficie atómicamente plana, pero para otros objetivos es interesante obtener grupos de átomos regularmente espaciados (quantum dot array) o estructuras tridimensionales facetadas para mejorar la absorción óptica.

En el caso de la heteroepitaxia, proceso en el que se crece un material distinto al del sustrato, el desajuste de red entre el material depositado y el sustrato hace que la morfología de la capa crecida no sea del todo plana. Este es el caso del SiGe sobre sustratos de Si. El contenido en Ge de la capa crecida determina el desajuste de red entre el material depositado y el sustrato de Si (el parámetro de red del Ge es un 4.2% superior al de Si), y por tanto la cantidad de strain existente. En condiciones de poco strain (bajo contenido en Ge) la capa crecida es plana. A medida que aumenta el strain, la capa crecida se ondula gradualmente durante el crecimiento, pudiéndose formar abultamientos.

El principal objetivo de este TFG es estudiar el strain en capas crecidas de SiGe sobre Si, y los procesos físicos a los que da lugar (interdifusión, ondulación de la superficie ...).

En este TFG se empleará el código de simulación paralelo LAMMPS (desarrollado en el Laboratorio Nacional de Sandía de EE.UU). Los cálculos que se lleven a cabo se ejecutarán en los servidores multiprocesador del grupo “Multiscale Materials Modeling” del GIR de Electrónica de la Universidad de Valladolid (<https://www.ele.uva.es/~mmm>).

En el trabajo propuesto, el alumno se familiarizará con la metodología de las simulaciones atomísticas, manejará equipos computacionales de altas prestaciones y software paralelo y realizará pequeños programas y scripts para el análisis y visualización de los resultados de los cálculos.

Se recomienda estar familiarizado con el sistema operativo GNU/Linux, y tener cierta predisposición a la programación.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: El TFG no puede realizarse en movilidad.

41. Título: Termodinámica de defectos en semiconductores mediante simulaciones atomísticas

Tutores: María Aboy Cebrián e Iván Santos Tejido

Resumen:

Los materiales semiconductores son sometidos a irradiación de forma intencionada (durante la fabricación de dispositivos electrónicos), o no intencionada (durante el funcionamiento de los dispositivos fabricados en entornos con radiación como en los detectores de partículas). Las partículas energéticas que inciden en el semiconductor pueden generar defectos en la red cristalina. La acumulación e interacción de estos defectos puede resultar en la formación de defectos más extensos que afectan negativamente a las prestaciones de los dispositivos fabricados o degradan el funcionamiento de los dispositivos en funcionamiento.

Para evitar o minimizar estos problemas es necesario, por un lado, optimizar los procesos de fabricación en los futuros nodos tecnológicos, y por otro lado predecir la degradación de los dispositivos para conocer su vida útil. En ambos casos se requiere un conocimiento detallado de los mecanismos de formación y crecimiento de los defectos extensos.

El principal objetivo de este TFG es estudiar la formación y crecimiento de defectos de tipo intersticial en silicio cristalino mediante simulaciones atomísticas. Para ello se identificarán y caracterizarán los precursores de los defectos extensos observados experimentalmente en términos de su energía, estructura, simetría, modos normales de vibración, niveles electrónicos que introducen en el gap del semiconductor. Esta información se utilizará para estudiar cómo se forman los defectos extensos.

En este TFG se emplearán los códigos de simulación paralelos LAMMPS (desarrollado en el Laboratorio Nacional de Sandía de EE.UU), y VASP (desarrollado en la Universidad Técnica de Viena). Los cálculos que se lleven a cabo se ejecutarán en los servidores multiprocesador del grupo “Multiscale Materials Modeling” del GIR de Electrónica de la Universidad de Valladolid (<https://www.ele.uva.es/~mmm>).

En el trabajo propuesto, el alumno se familiarizará con la metodología de las simulaciones atomísticas, manejará equipos computacionales de altas prestaciones y software paralelo y realizará pequeños programas y scripts para el análisis y visualización de los resultados de los cálculos.

Se recomienda estar familiarizado con el sistema operativo GNU/Linux, y tener cierta predisposición a la programación.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: El TFG no puede realizarse en movilidad.

42. Título: Estudio de fenómenos de conmutación resistiva en dieléctricos crecidos por ALD.

Tutor: Salvador Dueñas Carazo

Resumen:

El fenómeno de conmutación resistiva consiste en el cambio súbito y no volátil de la resistencia eléctrica de una capa de material dieléctrico, como consecuencia de la aplicación de una tensión o corriente eléctricas. Este fenómeno está siendo objeto de una intensa investigación por su posible aplicación en dispositivos de memoria resistiva (ReRAM), basados en configuraciones metal-aislante-metal (MIM). La técnica de crecimiento Atomic Layer Deposition (ALD) es una de las más convenientes para este tipo de materiales y la elegida para este Trabajo.

La propuesta de realización de TFG se enmarca en este contexto, y consistirá en la realización de experimentos de medida de las características de las muestras basadas en diferentes dieléctricos de alta permitividad con objeto de cualificar su idoneidad para futuras tecnologías de memoria.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Debido a su grado de experimentalidad, este trabajo NO se oferta a alumnos en movilidad.

Observaciones:

El trabajo se llevará a cabo en el Laboratorio de Caracterización Eléctrica del departamento de Electricidad y Electrónica, ubicado en el Edificio de Tecnologías de la Información y las Comunicaciones del campus Miguel Delibes.

43. Título: Comportamiento ferroeléctrico en dieléctricos crecidos por ALD.

Tutor: Salvador Dueñas Carazo

Resumen:

Es un hecho experimental comprobado que muchos dieléctricos presentan comportamiento ferroeléctrico. Este fenómeno está siendo objeto de una intensa investigación por su posible aplicación en dispositivos de memoria (FeRAM), basados en configuraciones metal-aislante-metal (MIM). La técnica de crecimiento Atomic Layer Deposition (ALD) es una de las más convenientes para este tipo de materiales y la elegida para este Trabajo.

La propuesta de realización de TFG se enmarca en este contexto, y consistirá en la realización de experimentos de medida de las características de las muestras basadas en diferentes dieléctricos de alta permitividad con objeto de cualificar su idoneidad para futuras tecnologías de memoria.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: Debido a su grado de experimentalidad, este trabajo NO se oferta a alumnos en movilidad.

Observaciones:

El trabajo se llevará a cabo en el Laboratorio de Caracterización Eléctrica del departamento de Electricidad y Electrónica, ubicado en el Edificio de Tecnologías de la Información y las Comunicaciones del campus Miguel Delibes.

44.- Título: Generación y detección de ondas acústicas en matrices hidrogel preformadas mediante microelementos piezoeléctricos para su uso en mecanobiología celular.

Tutores: José Carlos Rodríguez Cabello, Luis Quintanilla Sierra y Ángel Carmelo Prieto Colorado

Resumen:

TFG de índole experimental en el que se desarrollará una tecnología que permita la generación de ondas mecánicas y su detección mediante microelementos piezoeléctricos insertados en un hidrogel. En una primera fase se optimizará la integración y continuidad entre el elemento piezoeléctrico y el gel y luego se determinarán los rangos dinámicos de generación y propagación de tales ondas.

El interés de este trabajo se centra en el futuro empleo de estos sistemas y de esas señales mecánicas como potencial medio de intercomunicación celular, lo que abriría las puertas a nuevos métodos de condicionamiento de la actividad celular.

No se requiere del alumno/a ninguna formación específica previa.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: El proyecto es experimental y presencial, pero puede ofertarse también a alumnos en movilidad.

45.- Título: Determinación de tamaños de nanopartícula y su distribución mediante técnicas de dispersión dinámica de luz en micelas autoensambladas de recombinaremos anfífilicos en bloque.

Tutores: José Carlos Rodríguez Cabello, Jesús Medina García

Resumen:

TFG de índole experimental en el que se utilizarán técnicas analíticas basadas en dispersión de la luz para cuantificar los parámetros geométricos y electrostáticos (potencial Z) de sistemas nanoparticulados autoensamblados. Los materiales que tienen estas propiedades han sido desarrollados previamente por nuestro grupo y este TFG no requiere ninguna actividad de síntesis. La parte experimental se centra fundamentalmente en el uso del equipo Z-sizer de Malvern para la mencionada determinación experimental.

El interés de este trabajo se centra en la determinación de estas propiedades físicas de sistemas que posteriormente pueden tener una futura aplicación en diversos campos de la nanomedicina.

No se requiere del alumno/a ninguna formación específica previa.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: El proyecto es experimental y presencial, pero puede ofertarse también a alumnos en movilidad.

46. Título: Estudio de la interacción luz / nanohilos semiconductores

Tutores: José Luis Pura, Juan Jiménez, Ángel Carmelo Prieto Colorado

Resumen:

La interacción entre la luz y los nanohilos semiconductores presenta efectos de amplificación electromagnética. Los nanohilos se comportan como nanoantenas ópticas. Si además están nanoestructurados aparecen resonancias de absorción/scattering. El estudio de estas resonancias se hace mediante espectroscopia microRaman. El estudio experimental se complementa con simulaciones electromagnéticas de la interacción nanohilo / Láser, mediante el programa COMSOL Multiphysics

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: El trabajo es experimental y presencial, pero puede ser realizado por alumnos en movilidad siempre que puedan hacer experimentación. El TFG tiene un elevado carácter experimental y el estudiante deberá realizar una parte relevante del TFG en laboratorio.

47. Título: Desarrollo de polímeros nanocelulares basados en geles de PMMA

Tutores: Victoria Bernardo García, Judith Martín de León, Miguel Ángel Rodríguez Pérez.

Resumen:

Objetivo:

El objetivo del presente trabajo de fin de grado consiste en desarrollar polímeros nanocelulares en base polimetilmetacrilato (PMMA) utilizando una nueva aproximación basada en la generación de un gel polimérico y su posterior expansión utilizando CO₂ en estado supercrítico. Con esta finalidad se producirán geles poliméricos en base PMMA utilizando diferentes grados del polímero y diferentes concentraciones del solvente y partiendo de estos geles se generarán materiales celulares utilizando diferentes condiciones de proceso (presión de saturación, temperatura de saturación y velocidad de despresurización). Además, se analizará la estructura de los materiales sólidos y de los materiales celulares para evaluar y cuantificar el efecto de la composición química del gel y de las condiciones de proceso en la densidad y tamaño de celda del material final. El reto es lograr fabricar materiales de baja densidad y que tengan tamaños de celda en la escala nanométrica.

Motivación:

Hoy en día existe una clara necesidad de mejorar la eficiencia energética de los edificios para reducir las emisiones de CO₂ a la atmósfera. De hecho, las normativas de la Unión Europea relacionadas con este tema se están volviendo cada vez más restrictivas. Para cumplir estas normativas con los aislantes térmicos que actualmente se encuentran en el mercado sería necesario incrementar el espesor de las paredes hasta 3 veces, reduciendo por lo tanto el espacio habitable de las viviendas.

Estas razones han provocado que la comunidad científica se vea en la necesidad de desarrollar nuevos materiales aislantes con propiedades térmicas y mecánicas mejoradas. Algunos de estos nuevos aislantes térmicos de alto rendimiento serían los VIPs y los aerogeles, los cuales aún se encuentran lejos de ser considerados como una solución real debido a su elevado precio y a sus pobres propiedades mecánicas.

Una de las vías en este proceso son los materiales que incorporan una estructura celular (porosa). Es bien sabido que cuanto menor sea el tamaño de poro (llegando incluso al rango nanocelular) y menor sea la

densidad de dichos materiales celulares mejores serán sus propiedades de aislamiento térmico. Obtener estas características estructurales es un reto científico de gran dificultad que requiere de un trabajo sistemático y de profundas investigaciones. En este trabajo se tratará de desarrollar polímeros nanocelulares (en base PMMA) de bajas densidades que puedan ser utilizados como super-aislantes térmicos utilizando la nueva aproximación descrita previamente.

Aspectos formativos:

El estudiante que realice este trabajo tendrá la oportunidad de formarse en aspectos relacionados con la nanotecnología, ya que tanto las propiedades como las aplicaciones de los materiales a desarrollar están condicionadas por la escala nanométrica de sus celdas y paredes celulares. Podrá además manejar equipos de laboratorio de última generación para la caracterización de las formulaciones sólidas y de los polímeros nanocelulares y trabajar dentro de un equipo multidisciplinar.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: El trabajo no puede ser realizado por alumnos en movilidad, ya que tiene un elevado carácter experimental

Otras consideraciones:

Al ser un trabajo con una fuerte base experimental al estudiante deberá gustarle el trabajo de laboratorio.

48. Título: Caracterización del comportamiento retrógrado del sistema PMMA-CO₂ mediante visualización directa a altas presiones

Tutores: Javier Pinto Sanz, Daniel Cuadra Rodríguez y Miguel Ángel Rodríguez Pérez

Resumen:

Objetivo:

El objetivo del presente trabajo de fin de grado consiste en el estudio del conocido como “comportamiento retrógrado” del sistema polimetilmetacrilato (PMMA)-CO₂, que debido a la elevada afinidad del PMMA por el CO₂ hace que este sistema presente dos transiciones entre los estados gomoso y vítreo para una misma presión de CO₂, en vez de una única transición como es habitual en sistemas de un polímero amorfo con CO₂.

Este comportamiento, aún conocido, no ha sido estudiado de manera general, y se desconoce tanto el efecto del peso molecular del PMMA en la forma del diagrama de estados Presión-Temperatura, como la forma exacta de este diagrama a temperaturas por debajo de temperatura ambiente. Este trabajo fin de grado abordará estas cuestiones, empleando para ello una novedosa metodología basada en la observación directa del sistema PMMA-CO₂ a diferentes presiones y temperaturas, con el objetivo de proporcionar los diagramas de estados del sistema PMMA-CO₂ más detallados obtenidos hasta la fecha.

Motivación:

Hoy en día existe una clara necesidad de mejorar la eficiencia energética de los edificios para reducir las emisiones de CO₂ a la atmósfera. De hecho, las normativas de la Unión Europea relacionadas con este tema se están volviendo cada vez más restrictivas. Para cumplir estas normativas con los aislantes térmicos que actualmente se encuentran en el mercado sería necesario incrementar el espesor de las paredes hasta 3 veces, reduciendo por lo tanto el espacio habitable de las viviendas.

Estas razones han provocado que la comunidad científica se vea en la necesidad de desarrollar nuevos materiales aislantes con propiedades térmicas y mecánicas mejoradas. Algunos de estos nuevos

aislantes térmicos de alto rendimiento serían los VIPs y los aerogeles, los cuales aún se encuentran lejos de ser considerados como una solución real debido a su elevado precio y a sus pobres propiedades mecánicas.

Una de las alternativas más prometedoras para desarrollar materiales aislantes de gran eficiencia y bajo coste son los materiales que incorporan una estructura celular (porosa). Es bien sabido que cuanto menor sea el tamaño de poro (llegando incluso al rango nanocelular) y menor sea la densidad de dichos materiales celulares mejores serán sus propiedades de aislamiento térmico. Obtener estas características estructurales es un reto científico de gran dificultad que requiere de un trabajo sistemático y de profundas investigaciones. En los últimos años el PMMA ha sido identificado como uno de los polímeros más prometedoros para la obtención de materiales aislantes nanocelulares, siendo con frecuencia ligadas las ventajas que ofrece para la obtención de esos materiales con el “comportamiento retrógrado” que presenta el sistema PMMA-CO₂. Sin embargo, si bien la investigación en polímeros nanocelulares basados en PMMA ha crecido enormemente en los últimos años, no se ha profundizado lo suficiente en entender el comportamiento del sistema PMMA-CO₂, siendo necesario terminar de definir su diagrama de fases para comprender los resultados obtenidos hasta ahora en la fabricación de aislantes nanocelulares y definir el rumbo de investigaciones futuras en ese ámbito.

Aspectos formativos:

El estudiante que realice este trabajo recibirá formación sobre la fabricación de piezas plásticas mediante moldeo por compresión, trabajo con sistemas de alta presión, fenómenos físicos en sistemas polímero-gas, y análisis de imagen. Empleando dichos conocimientos y equipos de última generación para la fabricación y experimentación disponibles procederá a estudiar las interacciones entre el polimetilmetacrilato (PMMA) y el dióxido de carbono (CO₂) poniendo particular énfasis en la detección de cambios en transiciones a nivel molecular del polímero inducidos por el gas. Concretamente se espera que el alumno sea capaz de determinar el diagrama de fases del sistema PMMA-CO₂ en base a la presión, temperatura y el peso molecular del polímero.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: El trabajo no puede ser realizado por alumnos en movilidad, ya que tiene un elevado carácter experimental

Otras consideraciones:

Al ser un trabajo con una fuerte base experimental al estudiante deberá gustarle el trabajo de laboratorio.

CRISTALOGRAFÍA Y MINERALOGÍA (1)

49.- Título: "Análisis mediante espectroscopía Raman de salmueras de relevancia para la misión Europa Lander"

Tutores: Guillermo López Reyes, José Antonio Manrique Martínez y Jesús Medina García

Resumen:

NASA se encuentra actualmente en la fase de diseño de un aterrizador que analizará la superficie del satélite de Júpiter, Europa. Dicho aterrizador llevará un espectrómetro Raman para estudiar el satélite y tratar de detectar los posibles orgánicos que pueda haber. Sabemos que su superficie es un mar de hielo con presencias de algunos sulfatos y sales, el trabajo propuesto estudiará diferentes disoluciones de compuestos de interés para describir métodos que permitan estimar concentraciones de estos compuestos mediante espectroscopía Raman.

Nociones básicas de MatLab serán bienvenidas.

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No ofertable para alumnos en movilidad.

50.- Título: " Álgebras de operadores en Física"

Tutores: Fernando Gómez Cubillo

Resumen:

La teoría de álgebras de operadores en espacios de Hilbert se inicia con una serie de publicaciones de von Neumann y Murray en la década de 1930. Las motivaciones principales de estos autores estaban relacionadas con la teoría de representaciones de grupos y ciertos aspectos del formalismo de la mecánica cuántica. "Estados" y "observables" y "simetrías" son actualmente conceptos básicos en la descripción, tanto clásica como cuántica, de un sistema físico.

El formalismo matemático de la teoría cuántica se fundamenta en la teoría de álgebras de operadores (observables), la construcción de Gelfand-Naimark-Segal (estados) y el teorema de Wigner (simetrías).

Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No ofertable para alumnos en movilidad.