



**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 2019-20**

---

La siguiente lista de temas de TFG ha sido aprobada por la Comisión Académica del Grado en Física para el curso académico 2019-20. 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](mailto: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 podrán realizarse hasta el día 25 de octubre de 2019.

Valladolid, a 11 de octubre de 2019.

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

**FA1. Título: Análisis espacio-temporal de las concentraciones de distintos contaminantes**

**Tutor/es:** Isidro A. Pérez y M<sup>a</sup> Ángeles García

**Resumen:**

En este trabajo se estudiarán las concentraciones de NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub> y partículas a partir de datos diarios de estas sustancias que se encuentran disponibles, con gran detalle, en una base de datos de acceso libre. Para ello, se investigará la distribución espacial de los estadísticos mensuales con el propósito de identificar las zonas de concentraciones más altas y se procurará analizar el origen de dichas concentraciones. Asimismo, se estudiará su ciclo anual y se propondrán modelos armónicos sencillos. Por tanto, se trata de un trabajo de análisis de datos, cuya parte principal puede realizarse en una hoja de cálculo del tipo Excel, aunque pueden ser muy útiles los conocimientos de fundamentos de programación.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No**

---

**FA2. Título: Análisis de los contrastes de temperatura en la superficie terrestre**

**Tutor/es:** M<sup>a</sup> Ángeles García e Isidro A. Pérez

**Resumen:**

La temperatura es una de las variables meteorológicas típicas. Hoy en día se dispone de una gran variedad de valores obtenidos tanto en estaciones de superficie como mediante teledetección. Este trabajo pretende abordar los contrastes de la temperatura entre los hemisferios norte y sur, entre la tierra y el mar, entre el día y la noche, entre las latitudes altas y las bajas. Para ello, se dispone de una base de datos con adecuadas resoluciones espacial y temporal que permiten cuantificar estos contrastes y observar su evolución. Aunque el análisis de estos valores se puede realizar mediante una hoja de cálculo, como Excel, el desarrollo de programas informáticos sencillos puede facilitar el proceso.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No**

---

**FA3. Título: Estudio de índices de confort**

**Tutor/es:** Isidro A. Pérez y M<sup>a</sup> Ángeles García

**Resumen:**

En este trabajo se recopilarán distintos índices de confort que aparecen en la bibliografía y se compararán a través de una base de datos con resolución espacial y temporal suficiente para que el tratamiento sea correcto desde el punto de vista computacional con los medios disponibles. Se abordará la distribución geográfica de los valores con el objetivo de ver los dominantes y se analizará su evolución. Por consiguiente, es un estudio que puede hacerse con una hoja de cálculo como Excel, pero que también permite la elaboración de programas informáticos básicos.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No**

**FA4. Título: Análisis de las sensaciones térmicas de frío y calor**

**Tutor/es:** M<sup>a</sup> Ángeles García e Isidro A. Pérez

**Resumen:**

Con frecuencia se habla de la diferencia que existe entre la temperatura ambiente que marca un termómetro y la que se percibe. Este trabajo está orientado a cuantificar esta diferencia. Para ello, se dispone de una base de datos con importantes resoluciones espacial y temporal que permiten un estudio pormenorizado desde el punto de vista geográfico, pero también se espera investigar los ciclos de ambas sensaciones. El trabajo, por tanto, se centra en la recopilación de información sobre este tema, la obtención de la sensación térmica a partir de la base de datos antes mencionada y el análisis de los resultados. Serían recomendables conocimientos básicos de programación, aunque también se puede abordar este estudio a través de una hoja Excel.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No**

---

**FA5. Título: Análisis de la concentración de ozono en un área urbana**

**Tutores:** M. Ángeles García y Nuria Pardo

**Resumen:**

El ozono troposférico es considerado un importante contaminante secundario en el estudio de la calidad del aire de una zona urbana. Se forma mediante reacciones químicas que implican a otras especies precursoras en la atmósfera en presencia de una alta radiación solar. Este trabajo analizará los niveles de este contaminante en una ciudad en un determinado periodo de tiempo. A partir de los datos públicos disponibles, se realizará un análisis de la evolución de las concentraciones de ozono a diferentes escalas temporales. Posteriormente, se analizarán los episodios de ozono y la influencia de las condiciones atmosféricas. Además, se abordará el estudio de la relación de la concentración de ozono con la de otras especies químicas.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No**

---

**FA6. Título: Estudio termodinámico de sistemas formados por un componente asociado + un componente inerte. Medidas volumétricas y velocidades del sonido de Belcilamina + n-alcenos a varias temperaturas**

**Tutores:** Dres. I. García de la Fuente y J. A. González López

**Resumen:**

Se pretende que el alumno domine las técnicas de medida de densidad de líquidos y velocidad del sonido y a partir de esas medidas obtener las funciones termodinámicas de exceso con la precisión requerida. Igualmente se pretende que el alumno conozca y se familiarice con los métodos de reducción de datos mediante las técnicas de ajuste no lineal, lo que le permitirá obtener información acerca de la naturaleza y bondad de sus medidas. Igualmente se pretende, que el alumno sea capaz de interpretar a nivel microscópico los resultados experimentales obtenidos.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No**

---

**FA7. Título: Estudio termodinámico de sistemas formados por dos componentes asociados. Medidas volumétricas y velocidades del sonido de Belcilamina + n-alcoholes a varias temperaturas**

**Tutores:** Dres. I. García de la Fuente y J. A. González López

**Resumen:**

Se pretende que el alumno domine las técnicas de medida de densidad de líquidos y velocidad del sonido y a partir de esas medidas obtener las funciones termodinámicas de exceso con la precisión requerida. Igualmente se pretende que el alumno conozca y se familiarice con los métodos de reducción de datos mediante las técnicas de ajuste no lineal, lo que le permitirá obtener información acerca de la naturaleza y bondad de sus medidas. Igualmente, se pretende que el alumno sea capaz de interpretar a nivel microscópico los resultados experimentales obtenidos.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No**

**FA8. Título: Análisis de imágenes de AFM de Membranas Mixtas para separación de gases**

**Tutores:** Pedro Prádanos y Laura Palacio

**Resumen:**

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. Trabajando en el modo "Intermitente", las imágenes de contraste de fase obtenidas, además permiten detectar materiales de distintas propiedades viscoelásticas. Se pretende utilizar ambas imágenes para estudiar membranas mixtas, formadas por distintos materiales, las cuales se han embebido en resinas que favorezca ese contraste. Al mismo tiempo se analizará la estructura de las membranas antes y después de someterlas a tratamientos térmicos.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No**

---

**FA9. Título: Determinación de tamaño de nanoporos por Espectroscopía de impedancias**

**Tutores:** Pedro Prádanos y Laura Palacio

**Resumen:**

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: No**

---

### **FA10. Título: “MaxEnt: Puesta al día y revisión”**

**Tutores:** José Carlos Cobos Hernández, Ana Cobos Huerga.

#### **Resumen:**

Se estudiará la manera de introducir en las clases, de la forma lo más eficientemente posible, a los alumnos del Grado en Física el algoritmo (metodología) MaxEnt, para que comprendan y manejen con soltura los conceptos que se usan en la Física Estadística del Equilibrio.

Para ello se revisarán los (así llamados) apuntes “del diablo” (de Maxwell, claro), que se escribieron en 1996, y que han quedado en parte obsoletos, tanto porque la asignatura obligatoria ya no se imparte en el mismo curso —ahora se imparte tanto en 1º como en 3º de Grado, cuando antes se impartía en 4º curso de Licenciatura—, no tiene una asignatura optativa que la complementa —en 5 curso de Licenciatura—, etc., con lo que (obviamente) los conocimientos previos de los alumnos que la cursan son bastante diferentes.

Finalmente, se aprovechará para hacer un pequeño estudio de lo que significa en física la estadística bayesiana, en contraposición con la descripción estadística frecuentista que se utiliza habitualmente (lo que, en el fondo, obligará a estudiar y definir mejor el concepto de “realidad física”).

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** En este caso que no requiere trabajo de Laboratorio (experimental), podría hacerse a distancia. Por tanto: SI.

---

### **FA11. Título: Estudio de la variabilidad de la columna de ozono por medio de análisis armónico.**

**Tutores:** Pablo Salvador y Abel Calle.

#### **Resumen:**

En este trabajo se estudiará la distribución de la columna de ozono medida por distintas plataformas satelitales a lo largo de toda la Tierra. Las series de datos se encuentran disponibles en Internet y son de libre distribución. El objetivo es analizar la variabilidad espacial y temporal de este gas por medio de la transformada de Fourier y establecer relaciones entre distintas frecuencias y las variables que intervienen en el proceso de creación y destrucción del ozono, prestando especial atención al agujero de la capa de ozono.

El TFG propuesto guarda relación con asignaturas impartidas en el Grado de Física a lo largo de diferentes cursos como son: Física de la Atmósfera, Métodos Matemáticos de la Física IV, Física Computacional y Química.

Para llevar a cabo con éxito esta tarea serían recomendables conocimientos básicos de programación.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No**

---

## FÍSICA TEÓRICA (14)

---

### **FT1. Título: Aplicaciones de la teoría de scattering en teoría de cuántica de campos. El efecto Casimir**

**Tutor:** José M. Muñoz Castañeda

#### **Resumen:**

El trabajo trata de comprender cómo problemas de mecánica cuántica no relativista en una dimensión, pueden ser utilizados para resolver problemas en teoría cuántica de campos relativista. En particular se pretende que el alumno entienda cómo las amplitudes de scattering cuántico en problemas no relativistas de dimensión 1 permiten calcular la energía cuántica del vacío, que es a su vez una cantidad medible en un laboratorio. Se trata pues, de un trabajo estrictamente teórico que se desarrollará usando herramientas de cálculo simbólico como Mathematica. Como conocimientos previos se requiere haber aprobado las asignaturas de física cuántica y los métodos matemáticos I, II, y III. Además es deseable, aunque no estrictamente necesario que el alumno esté cursando las asignaturas de "Gravitación y cosmología" y "Simetrías, campos y partículas"

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** en principio el trabajo no presenta restricciones para alumnos en movilidad. No obstante es deseable que exista la posibilidad de tener reuniones periódicas para el seguimiento del trabajo.

---

### **FT2. Título: Representaciones de "espín continuo" del grupo de Poincaré**

**Tutores:** Mariano A. del Olmo y María Antonia Lledó (Univ. Valencia)

#### **Resumen:**

Las partículas elementales vienen clasificadas desde un punto de vista grupo-teórico por las representaciones unitarias irreducibles del grupo de Poincaré. Los fotones, partículas de masa nula en reposo y espín 1 aparecen relacionadas con ciertas representaciones unitarias irreducibles del grupo Euclídeo del plano. Sin embargo, existen otra familia de representaciones de dicho grupo que dan origen a las "mal llamadas" representaciones de "espín continuo" del grupo de Poincaré y que estarán ligadas a partículas sin masa y "espín infinito" o "espín continuo" y que fueron desechadas por Wigner por no haber signos experimentales de su existencia. Sin embargo en los últimos años han aparecido diversos estudios sobre ellas intentando conocer sus propiedades con el fin de poder encontrar evidencias en caso de que existan. Este trabajo pretende revisar los recientes avances en el campo y establecer el límite galileano de dichas representaciones y su versión supersimétrica.

La temática de este TFG está relacionada con la de la asignatura del grado en Simetrías, Campos y Partículas, donde se estudia el grupo de Poincaré y su relación con la Mecánica Cuántica relativista.

Es un trabajo de tipo teórico y de revisión bibliográfica. Es necesario tener conocimientos en teoría de grupos y a ser posible en mecánica cuántica relativista, por lo que se aconseja cursar la asignatura Simetrías, Campos y Partículas del grado de Física.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No está contemplada la movilidad en este TFG

---

**FT3: Título: Simetrías del sistema cuántico de Kepler-Coulomb en el plano**

**Tutor:** Javier Negro

**Resumen:**

El objetivo del trabajo es el estudio de sistemas unidimensionales y bidimensionales cuánticos y como las técnicas en una dimensión pueden ayudar en más dimensiones. En este trabajo se prestará especial atención al sistema cuántico de Kepler-Coulomb en el plano.

Trabajo teórico con ayuda de Mathematica.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No está contemplada la movilidad en este TFG

---

**FT4: Título: Simetrías del sistema cuántico del oscilador armónico en el plano**

**Tutor:** Javier Negro

**Resumen:**

El objetivo del trabajo es el estudio de sistemas unidimensionales y bidimensionales cuánticos y como las técnicas en una dimensión pueden ayudar en más dimensiones. En este trabajo se prestará especial atención al sistema cuántico del oscilador armónico en el plano.

Trabajo teórico con ayuda de Mathematica.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No está contemplada la movilidad en este TFG

---

**FT5: Título: Algebras de Lie en las simetrías de sistemas cuánticos**

**Tutor:** Javier Negro

**Resumen:**

El objetivo del trabajo es el estudio de las simetrías de los sistemas cuánticos mediante las algebras de Lie. Veremos varios ejemplos en los que intervienen las algebras  $\mathfrak{su}(2)$ ,  $\mathfrak{su}(1,1)$ ,  $\mathfrak{so}(4)$ ,  $\mathfrak{su}(3)$ , etc.

Trabajo teórico que necesitara ayuda de Mathematica.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No está contemplada la movilidad en este TFG

---

**FT6: Título: Formulación gauge de la gravedad**

**Tutor:** José Manuel Izquierdo Rodríguez

**Resumen:**

El trabajo consiste en tratar de describir el papel de las simetrías gauge en la formulación de la gravedad

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** Se puede ofertar

---

**FT7: Título: El Espacio de DeSitter y Espacios de Hilbert equipados**

**Tutor:** Manuel Gadella y Mariano del Olmo

**Resumen:**

El espacio de de Sitter tiene diversas aplicaciones. Se trata de construir un espacio de Hilbert equipado que haga continuas algunos elementos del algebra de DeSitter interesantes en electromagnetismo. Construir las topologías adecuadas es esencial y no es aparentemente un problema difícil, aunque las dificultades de una investigación aparecen en el transcurso de la misma. La idea está basada en una presentación de O. Lechtenberg titulada “From Yang-Mills in the Sitter space to electromagnetic knots”, en una reunión científica. El propio título de esta presentación nos indica el interés en Física del proyecto.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No está contemplada la movilidad en este TFG

---

**FT8: Título: Espacios de Hilbert equipados asociados a los armónicos esféricos en dimensión arbitraria**

**Tutor:** Manuel Gadella y Mariano del Olmo

**Resumen:**

En un trabajo previo (Spherical harmonics and rigged Hilbert spaces. E. Celeghini, M. Gadella, M.A. del Olmo. Journal of Mathematical Physics, 59 (5), 053502 (2018)), se estudian las equipaciones del espacio de Hilbert generado por los armónicos esféricos y que hacen continuos a los generadores de  $so(3,2)$  que no son operadores acotados y a ciertas funciones relevantes físicamente de los que sí están acotados. Se trataría de explorar generalizaciones de esta idea a armónicos esféricos de dimensiones de orden superior.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No está contemplada la movilidad en este TFG

---

**FT9: Título: Estudio de algunos aspectos recientes relacionados con la computación cuántica.**

**Tutor:** Juan Carlos García Escartín y Mariano Santander.

**Resumen:**

El objetivo es el estudio de algunos aspectos novedosos de la Computación cuántica.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No está contemplada la movilidad en este TFG

---



**FT10: Título: Representación de Fock-Bargmann y espacios de Hilbert de funciones analíticas en mecánica cuántica**

**Tutor:** Luis Miguel Nieto Calzada.

**Resumen:**

Se trata de familiarizarse con la representación de Fock-Bargmann, que es bastante usada en mecánica cuántica, y analizar el tipo de espacios de funciones analíticas que surgen al analizar diversos problemas. Es un trabajo teórico y no requiere conocimientos de programación.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** El TFG NO puede ofertarse a alumnos en movilidad.

---

**FT11: Título: Una introducción a las técnicas analíticas para la resolución de ecuaciones en derivadas parciales no lineales de interés en Física**

**Tutor:** Luis Miguel Nieto Calzada.

**Resumen:**

A lo largo de las últimas décadas se han desarrollado diversas técnicas sumamente interesantes para abordar la obtención de soluciones analíticas exactas de ecuaciones en derivadas parciales no lineales de interés en Física. En este trabajo se pretende efectuar una aproximación a estos procedimientos (propiedad de Painlevé, solitones, algoritmo de ARS, etc.) y aplicarlos a diversos modelos sencillos de interés en la actualidad. Es un trabajo teórico y no requiere conocimientos de programación.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** El TFG NO puede ofertarse a alumnos en movilidad

---

**FT12: Título: Cuantización Geométrica.**

**Tutor/es:** Justo Javier López Sarrión y Luis Miguel Nieto Calzada.

**Resumen:**

Los métodos canónicos de cuantización de una teoría clásica estándar son bien conocidos desde los primeros pasos de la historia de la Mecánica Cuántica, y no se encuentran grandes problemas salvo los conocidos sobre las ambigüedades de ordenación de operadores cuánticos. Sin embargo, cuando tratamos de cuantizar teorías que, bien, no tienen un equivalente clásico, o bien, el espacio de fases tiene una estructura geométrica no trivial, los métodos de cuantización canónica deben revisarse y tener un sentido claro en términos de espacios de Hilbert y operadores en el mismo. La cuantización geométrica es un intento por resolver principalmente el segundo caso. El rango de aplicabilidad de este formalismo va desde el estudio de fenomenología en Física del Estado Sólido, como en el efecto Hall cuántico, hasta las teorías más exóticas de Cosmología y gravedad cuánticas. El trabajo que se propone es revisar los rudimentos de la cuantización geométrica y aplicarlos a la cuantización de algunas superficies compactas. Es un trabajo teórico y no requiere conocimientos de programación.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** El TFG NO puede ofertarse a alumnos en movilidad

---

**FT13: Título: La edad del universo y los modelos cosmológicos.**

**Tutor/es:** Diego Sáez Gómez y Mariano Santander.

**Resumen:**

A pesar de que la edad del universo se estima en unos 13 mil millones de años, las pruebas observacionales así como los diferentes modelos teóricos muchas veces dan como resultado diferencias significativas en dicha predicción. El objetivo del presente trabajo es que el estudiante se familiarice con los fundamentos básicos de la cosmología moderna así como con el estudio de diferentes modelos cosmológicos y algunas de las predicciones de éstos, teniendo la edad del universo como el eje central del análisis. Se trata de un trabajo puramente teórico, en el que si bien algún conocimiento previo de Relatividad General y Cosmología sería de gran ayuda, no es del todo imprescindible. Es un trabajo teórico y no requiere conocimientos de programación.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** El TFG puede ofertarse a alumnos en movilidad

---

**FT14: Título: Sistema mecano-cuántico de Chern-Simons con derivadas de orden superior.**

**Tutor/es:** Justo Javier López Sarrión y Luis Miguel Nieto Calzada.

**Resumen:**

Los sistemas mecánicos cuyas ecuaciones de movimiento poseen derivadas temporales de orden superior a dos sufren, en general, de un tipo particular de inestabilidades, conocidas como la inestabilidad de Ostrogradski. Cuando estos sistemas son cuantizados, dichas inestabilidades producen estados cuánticos con normas negativas o "ghosts". Ello invalida toda interpretación sensata de la Mecánica Cuántica en términos probabilísticos. Estos modelos, por tanto, carecerían de todo interés físico si no fuera por sus buenas propiedades en el régimen ultravioleta, que permitirían, presumiblemente, dar con una teoría cuántica de la gravitación basada en dicho tipo de teorías si, bien se pudiera dar sentido a dichos estados, o bien pudiera encontrarse una clase de teorías que no presenten dicho tipo de inestabilidad o esta fuera evitable por algún tipo de mecanismo.

Por otro lado, el clásico problema de Landau (partícula cuántica moviéndose en el plano en presencia de un campo magnético uniforme) tiene una propiedad peculiar en el límite cuando la masa tiende a cero (modelo mecano-cuántico de Chern-Simons): su espacio de fases sufre una reducción dimensional y ocurre una degeneración infinita de estados en el primer nivel de Landau. Por tanto, este sistema es un claro candidato a tener un buen comportamiento cuando se incluyan términos adecuados con derivadas temporales altas, y esperamos que bajo cuantización dicho modelo no presente ghosts y sea una teoría susceptible de tener una interpretación física clara. Es un trabajo teórico y no requiere conocimientos de programación.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** El TFG NO puede ofertarse a alumnos en movilidad

---

**FAT1: Título: Simulaciones DFT de la reactividad de agregados bimetalicos de platino**

**Tutor:** Luis Miguel Molina Martín

**Resumen:**

El proyecto consiste en la realización de simulaciones ab initio DFT para el estudio de las propiedades catalíticas de nanoagregados de platino dopados con otros metales de transición. El objetivo es analizar el efecto que produce la presencia de estas impurezas en las características de diversos procesos catalíticos de interés, como la oxidación del monóxido de carbono, ó la producción de hidrógeno mediante water-gas-shift (WGS). Tras analizar la influencia de los elementos dopantes en las energías de reacción, 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.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No**

---

**FAT2: Título: Absorción de hidrógeno en nanocatalizadores bimetalicos de aluminio**

**Tutor:** Luis Miguel Molina Martín

**Resumen:**

El proyecto consistirá en usar métodos de primeros principios (DFT) para estudiar la absorción y disociación de moléculas de hidrógeno en nanopartículas de aluminio dopadas con diversos metales de transición. Éstos métodos permiten la resolución con gran precisión de la ecuación de Schrödinger para sistemas con un gran número de electrones. Se tratará de encontrar elementos dopantes que disminuyan la barrera para la disociación de H<sub>2</sub>, entendiendo en detalle sus propiedades físico-químicas. La meta del trabajo es el diseño de nuevos y mejores materiales para el almacenamiento de hidrógeno.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No**

---

**FAT3: Título: Propiedades estructurales y dinámicas del metal cobre 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 cobre 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 cobre líquido será caracterizado mediante un modelo consistente en unos 120 átomos y cuyas interacciones se describirán resolviendo la ecuación de Schrödinger 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: No**

---

**FAT4: Título: Simulaciones de primeros principios de la adsorción/disociación de hidrógeno en nanoaleaciones de paladio**

**Tutora:** María José López Santodomingo

**Resumen:**

La disociación del hidrógeno es un proceso clave tanto para el almacenamiento de hidrógeno en materiales de carbono porosos como para la obtención de energía a partir del hidrógeno en celdas de combustible. En ambos casos se utilizan nanopartículas metálicas, principalmente de platino y paladio, para reducir la barrera energética para disociar el hidrógeno molecular. Se propone el uso de nanoaleaciones como alternativa a las nanopartículas de Pt y Pd con el objetivo de reducir la cantidad necesaria de estos metales preciosos. El alumno estudiará la adsorción y disociación de hidrógeno molecular en pequeñas nanoaleaciones de paladio mediante técnicas de simulación computacional basadas en el formalismo del funcional de la densidad (DFT). Con este trabajo el alumno tendrá la oportunidad de profundizar y aplicar sus conocimientos de la DFT, una técnica actual avanzada para el cálculo de estructuras electrónicas.

**Observaciones:** Este trabajo es continuación de una práctica de empresa

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No**

---

**FAT5 Título: Dopado con nanopartículas metálicas y adsorción de hidrógeno en materiales bidimensionales**

**Tutoras:** María José López Santodomingo y Estefanía Germán

**Resumen:**

Desde el descubrimiento del grafeno, distintos laboratorios han sintetizado nuevos materiales bidimensionales también basados en el carbono, con características muy atractivas para novedosas aplicaciones tecnológicas. Con el objetivo de explorar las posibilidades de estos nuevos materiales bidimensionales para el almacenamiento de hidrógeno, se estudiará su dopado con nanopartículas metálicas, ya que se sabe que las nanopartículas aumentan la capacidad de almacenamiento de hidrógeno en otros materiales relacionados, como los carbones porosos. El alumno estudiará algunos materiales laminares dopados con pequeñas nanopartículas de paladio y la adsorción de hidrógeno en esos materiales, mediante técnicas de simulación computacional basadas en el formalismo del funcional de la densidad (DFT). Con este trabajo el alumno tendrá la oportunidad de profundizar y aplicar sus conocimientos de la DFT, una técnica actual avanzada para el cálculo de estructuras electrónicas.

**Observaciones:** Este trabajo es continuación de una práctica de empresa

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No**

---

## **FAT6. Título del TFG: El vehículo de hidrógeno. Simulaciones de Monte Carlo-Metrópolis del almacenamiento de hidrógeno en schwarzitas.**

**Tutores:** Iván Cabria Álvaro y Begoña Torres Cabrera (Universidad de Burgos)

### **Resumen:**

Una alternativa a los vehículos basados en combustibles fósiles son los **vehículos de hidrógeno**. Estos vehículos no emiten CO<sub>2</sub>, ni NO<sub>x</sub>, 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 sólidos nanoporosos mediante adsorción. El objetivo tecnológico y de ciencia básica es obtener un material sólido nanoporoso que almacene suficiente hidrógeno como para recorrer 600 km sin repostar.

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, y de la economía del 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 sólidos nanoporosos y en comparar las simulaciones con los experimentos.

Los materiales sólidos nanoporosos que se estudiarán en las simulaciones son schwarzitas de diferentes tipos y tamaños. Las schwarzitas son un tipo de carbón nanoporoso. Los grupos de investigación básica y aplicada estudian el almacenamiento de hidrógeno a temperatura ambiente y a presiones entre 5 y 250 bares. Por tanto, las simulaciones se harán a esa misma temperatura y presiones. También se harán simulaciones a temperaturas criogénicas, 80.15 K. Se compararán los resultados teóricos con los resultados experimentales de almacenamiento de hidrógeno de carbones nanoporosos.

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 las schwarzitas. Finalmente, se analizarán dichas capacidades y se explicará el origen físico de su dependencia de la temperatura, la presión, el tipo y el tamaño de las schwarzitas.

Se proporcionará al alumno un código que hace este tipo de simulaciones de Monte Carlo-Metrópolis. No se necesitan conocimientos de programación. **Se necesitan conocimientos de Linux a nivel de usuario.**

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

---

## **FAT7. Título del TFG: El vehículo de Hidrógeno. Simulaciones de Monte Carlo-Metrópolis del almacenamiento de hidrógeno en carbones nanoporosos.**

**Tutor:** Iván Cabria Álvaro

### **Resumen:**

Una alternativa a los vehículos basados en combustibles fósiles son los **vehículos de hidrógeno**. Estos vehículos no emiten CO<sub>2</sub>, ni NO<sub>x</sub>, 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 sólidos nanoporosos mediante

adsorción. El objetivo tecnológico y de ciencia básica es obtener un material nanoporoso que almacene suficiente hidrógeno como para recorrer 600 km sin repostar.

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 y de la economía del hidrógeno**. Esta búsqueda debe incluir los cuatro pilares de una economía basada en el hidrógeno: Producción, distribución, almacenamiento y uso del hidrógeno. La búsqueda debe estar centrada en el almacenamiento de hidrógeno en materiales sólidos 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 de diferentes anchuras**. En este trabajo se considerará **la distribución experimental del tamaño o anchura de los poros** y se estudiará **la convergencia de las simulaciones de Monte Carlo** de estos nanomateriales en función de los parámetros, la presión y la temperatura de las simulaciones. 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. También se harán simulaciones a temperaturas criogénicas, 80.15 K. Los resultados teóricos se compararán con los resultados experimentales de almacenamiento de hidrógeno de carbones nanoporosos.

Las interacciones entre las moléculas se simularán mediante potenciales de Lennard-Jones. Las interacciones entre las moléculas y las superficies de los poros plano-paralelos se simularán mediante potenciales Steele. Se simulará el conjunto macrocanónico (potencial químico, temperatura y volumen constantes) y se calcularán las capacidades gravimétricas y volumétricas de almacenamiento de los carbones nanoporosos. Finalmente, se analizarán dichas capacidades y se explicará el origen físico de su dependencia de la temperatura, la presión, el tamaño y el tipo de distribución del tamaño de los poros.

Se proporcionará al alumno un código que hace este tipo de simulaciones de Monte Carlo-Metrópolis. No se necesitan conocimientos de programación. **Se necesitan conocimientos de Linux a nivel de usuario.**

Este TFG también se oferta a alumnos en movilidad

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

---

## **FAT8. Título del TFG: Detección de neutrones**

**Tutores:** Pilar Iñiguez de la Torre y Roberto Méndez Villafañe

### **Resumen:**

La detección de neutrones tiene interés en una gran diversidad de aplicaciones. Lo que se detecta realmente son las partículas cargadas o radiación gamma producidas en determinadas reacciones nucleares que sufren los neutrones en los materiales que atraviesan. Estas reacciones pueden producirse en el propio detector o en materiales denominados convertidores que van acoplados al mismo. Entre los detectores de alfas y gammas utilizados en las prácticas de laboratorio del cuarto curso hay varios detectores sensibles a neutrones. Se propone en este Trabajo el estudio de las respuestas de diferentes detectores, tanto de tipo activo como pasivo, irradiados en las fuentes de neutrones del Laboratorio de Patrones Neutrónicos del CIEMAT en Madrid. Aunque posiblemente se realicen simulaciones MonteCarlo no son necesarios conocimientos de programación.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** El TFG NO es apto para programas de movilidad

---

## **FAT9. Título: Estudio del popgrafeno en el contexto de adsorción de hidrógeno para su almacenamiento**

**Tutores:** Andrés Vega Hierro y Pablo Álvarez Zapatero (Becario UVA)

### **Resumen:**

El hidrógeno es una fuente de energía limpia y abundante que quizás podría reemplazar a los combustibles fósiles en el futuro [1-5]. Uno de los principales problemas para lograr ese objetivo es encontrar medios seguros, rentables y prácticos para almacenar hidrógeno. Dos de los principales factores establecidos por el Departamento de Energía de EEUU (DOE) para los nuevos materiales de almacenamiento de hidrógeno son una buena densidad gravimétrica (el objetivo del DOE es aproximadamente 6% en peso) y una energía de adsorción de en torno a 0.2-0.6 eV por molécula H<sub>2</sub> [6,7], es decir, entre el rango de fisisorción y quimisorción atómica, lo que permitiría que el almacenamiento y la descarga se ciclaran en condiciones ambientales. Otro criterio es la estabilidad estructural de la matriz almacenadora bajo ciclos de carga. Entre los numerosos materiales que se han propuesto como medios de almacenamiento de hidrógeno, se ha prestado especial atención a las nanoestructuras de carbono, como los fullerenos, los nanotubos de carbono y el grafeno, porque son livianos, económicos y tienen una gran superficie, alta estabilidad térmica y propiedades mecánicas excepcionales (véase, por ejemplo, Ref. [8] y referencias citadas en ésta).

Yildirim y Ciraci [9] demostraron, en el marco de teoría del funcional de la densidad (DFT), que los nanotubos de carbono de pared simple (SWCNT) decorados con Ti son medios potenciales de almacenamiento de hidrógeno de alta capacidad. También se han realizado extensos estudios DFT sobre la absorción de hidrógeno en varias nanoestructuras de carbono, como cadenas lineales, grafeno y SWCNT dopadas con metales de transición, por Durgunetal [10], Rojas y Leiva [11], Xiao et al. [12], López-Corral et al. [13], y Liu et al. [14]. Lebon et al. [15] demostraron una capacidad gravimétrica superior al 6% en nanohilos de grafeno dopados con Ti a temperatura y presión cero. Desde el punto de vista experimental también se han realizado estudios sobre este tipo de sistemas, aunque son más escasos que los teóricos debido a los desafíos que deben superarse [16]. El trabajo pionero en este área fue el de Dillon et al. [17], quienes investigaron el almacenamiento de H<sub>2</sub> en sistemas de SWCNT y carbón activado poroso, obteniendo una densidad de hidrógeno lo suficientemente alta como para cumplir con el requisito del DOE. Más recientemente, Ghosh et al. [18] han investigado la adsorción de H<sub>2</sub> en muestras de grafeno preparadas por exfoliación de óxido grafitico y conversión de nanodiamante, obteniendo captaciones de H<sub>2</sub> de 1.7% y 3.1% en peso a (1 atm, 77 K) y (100 atm, 298 K), respectivamente. Estudios experimentales recientes sobre compuestos SWCNTs-Ti han encontrado una absorción eficiente de hidrógeno de hasta 4.74% en peso, mostrando una desorción del 100% en el rango de temperatura de 433-583 K y una energía de enlace promedio de hidrógeno de 0.4 eV [19].

Muy recientemente, Wang et al. han predicho teóricamente, por medio de la DFT, un nuevo alótropo estable de carbono, el popgrafeno [20]. Se trata una nanoestructura plana de carbono formada por pentágonos y octógonos alternados, con grupo de simetría  $c_{2mm}$ . Estos autores han demostrado su estabilidad mecánica a partir del estudio de su espectro de fonones. También han mostrado que es posible su dopado con átomos de Li sin que se produzca una alteración estructural, y han demostrado que presenta propiedades excepcionales para su posible uso en baterías de ión litio de última generación. El potencial de este nuevo sistema bidimensional de carbono en el ámbito del almacenamiento de  $H_2$  no se ha explorado hasta el momento, aunque sus propiedades estructurales permiten intuir que podría ser un muy buen candidato. Este es, precisamente, el objetivo general del presente Trabajo de Fin de Grado, cuyo desarrollo implica varias etapas:

1.- Puesta a punto de la metodología y cálculos para reproducir los resultados de Wang et al. para popgrafeno puro y dopado con Li.

Usaremos la DFT en su implementación dentro del código VASP (Vienna ab-initio simulation package) [21,22], el mismo que usaron Wang et al. [20] en su predicción del popgrafeno. VASP resuelve las ecuaciones de Kohn y Sham describiendo las interacciones de los electrones del core en la aproximación PAW (projector augmented waves) [23] y usa una base de ondas planas. El estudiante tendrá que dedicar un tiempo a aprender la base teórica y el código de computación, a realizar un setup del mismo y los tests pertinentes para popgrafeno y popgrafeno litiado.

2.- Estudio de adsorción de una molécula de  $H_2$  en popgrafeno puro.

Habrá que probar las diferentes posiciones de adsorción y determinar la más estable, teniendo en cuenta la relajación estructural de todo el sistema para ver el grado de deformación del popgrafeno, que se espera despreciable. Hay que determinar el tipo de adsorción y la energía de adsorción de la molécula de hidrógeno, y analizar si cumple el criterio del DOE. Hay que comprobar si los efectos de dispersión y correlaciones electrónicas no locales a largo alcance son necesarias. Para ello es necesario utilizar, además de un funcional de intercambio y correlación no local GGA standard como el de Perdew, Burke y Ernzenhof [24] uno de los funcionales no locales de van der Waals existentes, como el optB88-vdW de Klimes et al. [25].

3.- Estudio de adsorción de  $H_2$  en popgrafeno dopado con Li.

La configuración de popgrafeno litiado se tendrá tras haber completada la etapa 1, ya que es una configuración predicha por Wang et al. Se procederá como en la etapa 2, y una vez adsorbida la primera molécula de  $H_2$  en la vecindad de los átomos de Li, se estudiará cuántas moléculas puede adsorber cada átomo de Li y el sistema completamente litiado (por las dos caras).

4.- Estudio de adsorción de  $H_2$  en popgrafeno dopado con Ti.

Se procederá como en 3, una vez hayamos determinado la configuración más estable del popgrafeno dopado con Ti, la cual no se conoce. Esto implica probar las mejores posiciones de adsorción de Ti (mayor energía de adsorción en popgrafeno) y la máxima concentración posible de Ti sin que este se aglomere. Esta configuración de popgrafeno saturado será la que optimizará la capacidad gravimétrica y volumétrica de adsorción de  $H_2$  en el sistema. Los resultados podrán compararse con los obtenidos para grafeno y SWCNT dopados con Ti.

Aparte de los análisis desde el punto de vista energético, se realizarán análisis del tipo de enlace que se produce a nivel electrónico a partir de la estructura electrónica y de la densidad de carga, así como de la ELF (electron localization function) si fuera necesario.

El estudiante avanzará en el tiempo disponible hasta completar el mayor número de etapas que pueda, lo que constituirá su TFG. Una buena parte del tiempo estará dedicada a entender el problema y los objetivos que buscamos, así como a aprender la metodología necesaria. Su paso por la asignatura de Física Cuántica el curso pasado, que constituye la base teórica de la metodología a utilizar y de las propiedades estructurales y electrónicas de estos sistemas nanoestructurados, augura una buena preparación para afrontar el problema, y le servirá para aplicar muchos de conceptos aprendidos.



## BIBLIOGRAFIA

- [1] Schlapbach L, Zuttel A. Hydrogen-storage materials for mobile applications. *Nature* 2001;414:353-9.
- [2] Crabtree GW, Dresselhaus MS, Buchanan MV. Hydrogen economy. *Phys Today* 2004;57:39-44.
- [3] Coontz R, Hanson B. Toward a hydrogen economy. *Science* 2004;305:957.
- [4] Dinca M, Long JR. Hydrogen storage in microporous metalorganic frameworks with exposed metal sites. *Angew Chem Int Ed* 2008;47:6766-79.
- [5] Jena P. Materials for hydrogen storage: past, present, and future. *J Phys Chem Lett* 2011;2:206-11.
- [6] [http://www1.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/storage/pfs/targets\\_onboard\\_hydro\\_storage\\_explanation.pdf](http://www1.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/storage/pfs/targets_onboard_hydro_storage_explanation.pdf); 2009.
- [7] Kim Y-H, Zhao Y, Williamson A, Heben MJ, Zhang SB. Nondissociative adsorption of H<sub>2</sub> molecules in light-element-doped fullerenes. *Phys Rev Lett* 2006;96:016102-4.
- [8] Singh AK, Yakobson BI. First principles calculations of H storage in sorption materials. *J Mater Sci* 2012;47:7356-66.
- [9] Yildirim T, Ciraci S. Titanium-decorated carbon nanotubes as a potential high-capacity hydrogen storage medium. *Phys Rev Lett* 2005;94:175501e4.
- [10] Durgun E, Ciraci S, Yildirim T. Functionalization of carbon-based nanostructures with light transition-metal atoms for hydrogen storage. *Phys Rev B* 2008;77:085405-9.
- [11] Rojas MI, Leiva EPM. Density functional theory study of a graphene sheet modified with titanium in contact with different adsorbates. *Phys Rev B* 2007;76:155415-8.
- [12] Xiao H, Li SH, Cao JX. First-principles study of Pd-decorated carbon nanotube for hydrogen storage. *Chem Phys Lett* 2009;483:111-4.
- [13] López-Corral I, Germán E, Juan A, Volpe MA, Brizuela GP. DFT study of hydrogen adsorption on palladium decorated graphene. *J Phys Chem C* 2011;115:4315-23.
- [14] Liu Y, Ren L, He Y, Cheng H-P. Titanium-decorated graphene for high-capacity hydrogen storage studied by density functional simulations. *J Phys Condens Matter* 2010;22:445301-5.
- [15] Lebon A, Carrete J, Gallego LJ, Vega A. Ti-decorated zigzag graphene nanoribbons for hydrogen storage. A van der Waals-corrected Density-functional study. *Int J Hydrogen Energy* 2015; 40:4960-8.
- [16] Spyrou K, Gournis D, Rudolf P. Hydrogen storage in graphene-based materials: efforts towards enhanced hydrogen absorption. *ECS J Solid St Sci Tech* 2013;2:M3160-9.
- [17] Dillon AC, Jones KM, Bekkedahl TA, Kiang CH, Bethune DS, Heben MJ. Storage of hydrogen in single-walled carbon nanotubes. *Nat Lond* 1997;386:377-9.
- [18] Ghosh A, Subrahmanyam KS, Krishna KS, Datta S, Govindaraj A, Pati SK, et al. Uptake of H<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub> by graphene. *J Phys Chem C* 2008;112:15704-7.
- [19] Silambarasan D, Surya VJ, Vasu V, Iyakutti K. One-step process of hydrogen storage in single walled carbon nanotubes-tin oxide nanocomposite. *Int J Hydrogen Energy* 2013;38:14654-60.

[20] Wang S, Yang B, Chen H, Ruckenstein E. Popgraphene: a new 2D planar carbon allotrope composed of 5-8-5 carbon rings for high-performance lithium-ion battery anodes from bottom-up programming. *J Mat Chem A* 2018; 6:6815-7. Correction: *J Mat Chem A* 2018; 6:6687.

[21] Kresse G, Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals. *Phys Rev B* 1993;47:558-61.

[22] Kresse G, Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys Rev B* 1996;54:11169-86.

[23] Blöchl PE. Projector augmented-wave method. *Phys Rev B* 1994;50:17953-79.

[24] Perdew JP, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made Simple. *Phys Rev Lett* 1996;77:3865-8.

[25] Klimes J, Bowler DR, Michaelides A. Chemical accuracy for the van der Waals density functional. *J Phys Condens Matter* 2010;22:022201-5.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad: No**

---

## ÓPTICA (5)

---

### **OP1. Algoritmos de inversión para la obtención de propiedades del aerosol atmosférico**

**Tutores:** David Mateos y Roberto Román

#### **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:** No

---

### **OP2. Cámaras de cielo: ¿más allá de las nubes?**

**Tutores:** Roberto Román y 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 para identificación y detección de nubes y predicción de su posición. Sin embargo, el potencial de estos instrumentos podría ser mayor, ya que en un tiempo mínimo son capaces de capturar la radiancia proveniente de todos los puntos del cielo y en distintas bandas espectrales. Esta información es muy valiosa para obtener: la radiación que llega a la tierra; propiedades de las partículas en la atmósfera (aerosoles); la contaminación lumínica; etc. En este trabajo se van a usar imágenes del cielo capturadas a distintos tiempos de exposición para formar mapas lineales de la radiancia del cielo. Estos mapas se van a calibrar a través de un modelo de transferencia radiativa y de medidas independientes y, una vez calibrados, se van a utilizar para intentar obtener propiedades de los aerosoles atmosféricos.

El trabajo planteado no tiene una gran componente de carácter experimental, si no que se trabajará principalmente 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:** No

---

### **OP3. Transporte de contaminación hacia el Polo Norte: rastreo de cambios en las propiedades del aerosol atmosférico**

**Tutor:** David Mateos y Cristian Velasco

#### **Resumen:**

Los aerosoles juegan un papel complejo y relevante en el clima, en particular sobre la región Ártica. Sin embargo, aún falta un conocimiento detallado sobre la distribución espacio-temporal de los aerosoles atmosféricos polares. Dado que los aerosoles están relacionados con el balance radiativo del Ártico, es necesario comprender claramente cómo la interacción aerosol-radiación se modifica por las propiedades del aerosol. Durante los últimos años se ha visto aumentada la ocurrencia de fenómenos de transporte de aerosol, desde grandes incendios en Canadá y Rusia hasta masas de aire tropicales que acaban llegando al Ártico Europeo. Este TFG tratará sobre dichos eventos, determinando su origen y cuantificando su impacto sobre el clima del Ártico Europeo. Utilizando las estaciones de la red AERONET se determinará el cambio o no de las propiedades del aerosol atmosférico durante su transporte a largas distancias.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No

---

### **OP4. Impacto de intrusiones Saharianas sobre la calidad del aire en la ciudad de Valladolid**

**Tutores:** David Mateos y Roberto Román

Debido al gran impacto que causan las intrusiones de polvo desértico en la calidad del aire de zonas de todo el planeta, se plantea estudiar cómo varían los niveles de partículas registrados en la ciudad de Valladolid durante los días en los que dichas intrusiones ocurren. El Grupo de Óptica Atmosférica posee instrumentación que permite identificar el aerosol Sahariano, así como caracterizar sus principales propiedades radiativas. Se pretende combinar estos registros con los realizados por la Red de Control de Contaminación Atmosférica del Ayuntamiento de Valladolid (RCCAVA), para cuantificar el impacto del aerosol sahariano sobre los niveles típicos de contaminación de la ciudad.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No

---

### **OP5. Medida del contenido de vapor de agua atmosférico distintas técnicas. Análisis de variabilidad a distintas escalas temporales.**

**Tutor:** Carlos Toledano

El trabajo consiste en la extracción del contenido de vapor de agua en la columna atmosférica a partir medidas de GPS y fotómetro solar y lunar, con el objetivo de analizar la variabilidad de este parámetro clave en distintas escalas temporales: horaria, diaria, mensual, estacional. Este análisis se realizará sobre un conjunto representativo de estaciones españolas y, por su interés climático, en regiones polares.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No

### **EM1. Título: Magnetometría: Construcción de un magnetómetro de muestra vibrante.**

**Tutores:** José María Muñoz, Carlos Torres Cabrera.

#### **Resumen:**

Entre los dispositivos para la medida de las propiedades magnéticas de los materiales, probablemente el más clásico es el magnetómetro de muestra vibrante. Mediante el mismo, se puede medir la imanación de una pequeña partícula magnética sometida a un campo estático haciéndola vibrar en las proximidades de un sistema más o menos complejo de bobinas y midiendo la fuerza electromotriz inducida en ellas.

A pesar de tener un fundamento sencillo y publicado ya en 1959, los sistemas comerciales actuales no resultan en absoluto asequibles. Es por ello por lo que proponemos la construcción de uno de estos equipos en nuestro laboratorio.

En una primera etapa se analizará la factibilidad de la construcción usando instrumentos disponibles en el laboratorio (amplificador lock-in, generador de funciones vectorial, electroimán controlable...). Se optimizará el diseño de la unidad vibrante y del sistema de bobinas. Se escribirá un programa que controle todos estos equipos y que realice las necesarias etapas de calibración.

En una segunda etapa, si resulta posible, se tratará de prescindir de algunos instrumentos construyendo versiones del generador y del lock-in contraladas con microcontroladores y adaptadas a este uso.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No

#### **Tipología:**

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 escribir programas en entornos tanto de ordenador como de microcontrolador en el diseño de instrumentos científicos.

---

### **EM2. Título: Desacomodación magnética: Diseño de un sistema para su medida.**

**Tutores:** José María Muñoz, Pablo Hernández Gómez.

#### **Descripción:**

Una propiedad de los materiales magnéticos poco conocida pero de considerable utilidad tanto para el estudio del magnetismo del sólido como para el diseño de materiales con uso industrial es la desacomodación magnética. Este fenómeno consiste en la variación transitoria de algunas propiedades magnéticas, usualmente la permeabilidad, después de un evento que cambie sustancialmente la estructura de dominios del material. Es fuertemente dependiente de la temperatura y está relacionado con la existencia de transiciones electrónicas entre iones en posiciones cristalinas no homólogas magnéticamente.

El sistema de medida del que disponemos en el laboratorio ha ido quedando en parte obsoleto por el envejecimiento natural de alguno de sus componentes y por la aparición de instrumentos de mayor sensibilidad y rango de frecuencias de trabajo. El objetivo de este proyecto es reconstruir el viejo sistema empleando equipo nuevo. Utilizaremos un nuevo criostato, con su sistema de control de temperatura, un nuevo medidor de impedancia y un nuevo sistema de vacío. Todo ello obligará a re-escribir todos los programas de control y rediseñar el sistema de desimanación. Asimismo, esperamos que la elevada sensibilidad del medidor de impedancia nos permita realizar medidas con muestras mucho más pequeñas que en la implementación anterior.

En una última etapa, se validará el funcionamiento de todo el equipo midiendo muestras conocidas.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No

**Tipología:**

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 en el diseño de instrumentos científicos.

---

**EM3. Título: Desarrollo de Applets en Processing para la visualización de campos y otros fenómenos de carácter electromagnético**

**Tutor:** Óscar Alejos Ducal

**Resumen:**

El trabajo propuesto consiste en la implementación de código en entorno Processing para la visualización de líneas de campo y otros fenómenos de carácter electromagnético, todo ello como applets ejecutables en navegadores compatibles con HTML5. Para ello se utilizarán las bibliotecas p5.js, creadas por Lauren McCarthy y desarrolladas en comunidad, con el apoyo de la Processing Foundation y NYU ITP.

Aunque no se consideran imprescindibles conocimientos del entorno Processing en sí, el candidato deberá tener, en cualquier caso, especial habilidad a la hora de trabajar con lenguajes de programación.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** Sí

---

**EM4. Título: Electroacústica: análisis y síntesis de sonidos musicales.**

**Tutores:** Óscar Alejos Ducal, José María Muñoz 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 que sea lo más similar posible al producido por instrumentos de percusión. Para ello se estudiarán estos sonidos tanto en el dominio del tiempo como en el de la frecuencia, mediante un mapeo de los diferentes puntos del elemento vibrante, considerando diferentes puntos de ataque. Así se analizará la dinámica de vibración interpretándola 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.

Se plantea como la continuación de prácticas de empresa realizadas en el Área de Electromagnetismo del Dpto. de Electricidad y Electrónica.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No

**Tipología:**

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.

---

**EM5. Título: Estudio numérico del fenómeno de la Transmisión Electromagnética Extraordinaria**

**Tutores:** Ismael Barba García, Ana Cristina López Cabeceira

**Resumen:**

El fenómeno conocido como Transmisión Óptica Extraordinaria consiste en la transmisión de luz a través de aperturas en una lámina metálica, de tamaño inferior a su longitud de onda. En la teoría clásica, tal abertura no permite la transmisión de un campo lejano por debajo de una “frecuencia de corte”; sin embargo, cuando tenemos una distribución periódica de aperturas, puede existir una transmisión de varios órdenes de magnitud superior a lo predicho por la teoría clásica. Este fenómeno fue descrito por primera vez en 1998, encontrándose evidencia experimental del mismo fuera del rango óptico en 2005 (Transmisión Electromagnética Extraordinaria). En este trabajo se tratará, primero, de realizar un estudio del fenómeno, entender el mecanismo físico que lo activa y, después de reproducirlo con un simulador electromagnético y de estudiar sus características.

No es un trabajo de programación. Las simulaciones se realizarán a través de la interface de usuario del software comercial CST Studio Suite®, disponible en el Grupo de Investigación de Electromagnetismo Computacional. También existe una versión libre para estudiantes en <https://www.3ds.com/products-services/simulia/products/cst-studio-suite/student-edition/>

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No

---

**EM6. Título: Electroestática y Magnetostática: Simulación por ordenador.**

**Tutores:** Ismael Barba García, Ana Cristina López Cabeceira.

**Resumen:**

En la asignatura “Electromagnetismo” se estudia la Electroestática y la Magnetostática resolviendo problemas que, en muchos casos, resultan ser una aproximación de situaciones reales. Mediante la simulación por ordenador de sistemas de conductores, cargados o conectados a fuentes, sistemas de corriente estacionaria o imanes, se pretende estudiar el límite de validez y la exactitud de dichas aproximaciones e, incluso, resolver problemas que resultaban, en cierto modo, inabordables.

No es un trabajo de programación. Las simulaciones se realizarán a través de la interface de usuario del software comercial CST Studio Suite®, disponible en el Grupo de Investigación de Electromagnetismo Computacional. También existe una versión libre para estudiantes en <https://www.3ds.com/products-services/simulia/products/cst-studio-suite/student-edition/>

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No

---

**EM7. Título: Física de Película: estudio del Electromagnetismo a través del cine.**

**Tutores:** Ismael Barba García, Ana Cristina López Cabeceira.

**Resumen:**

Los directores de cine no siempre se rodean de buenos asesores científicos para grabar sus películas y vemos escenas de pocos minutos con multitud de errores desde el punto de vista de la Física. En otras ocasiones sí son acertadas. Todas pueden ser útiles para la comprensión de fenómenos físicos, tanto a través de los aciertos como de los errores. El objetivo pretendido es explorar las posibilidades para comprender la Física universitaria que nos brindan el cine, las series de televisión, las viñetas de comic y la literatura de ciencia ficción.

El alumno conocerá algunos ejemplos referidos someramente en clase. Se trata entonces de elaborar una relación de escenas audiovisuales y gráficas con sus correctas y rigurosas explicaciones científicas basadas, sobre todo, en conocimientos y conceptos de Electromagnetismo.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No

---

**EM8. Título: Fabricación y caracterización de cerámicas ferrimagnéticas hexagonales de fase Z**

**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". Se prevé que la fabricación de las muestras se lleve a cabo durante el primer cuatrimestre.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** No



## ELECTRÓNICA (6)

---

### **EL1. Título: Estudio de materiales ferroeléctricos: técnicas de caracterización.**

**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 propuesta de realización de TFG se enmarca en este contexto, y consistirá en la realización de experimentos de medida de las características de condensadores ferroeléctricos tanto comerciales como fabricados ad-hoc.

**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.

---

### **EL2. Título: Modelización matemática de curvas experimentales en regímenes estacionarios y de pequeña señal de memristores**

**Tutor:** Salvador Dueñas Carazo

#### **Resumen:**

Los dispositivos denominados memristores son hoy en día muy prometedores en muchos ámbitos aplicados: memorias no volátiles, computación neuronal, circuitos neuromórficos, o nuevos conceptos de arquitectura de circuitos digitales.

La propuesta de realización de TFG se enmarca en este contexto, y consistirá en el análisis de resultados experimentales obtenidos tras la medida en memorias de conmutación resistiva consistentes en bucles de corriente, de conductancia y de capacidad obtenidos en nuestro laboratorio, a fin de proporcionar modelos matemáticos que representen fidedignamente el comportamiento de estos dispositivos y puedan ser transferidos a herramientas simulación de sistemas electrónicos más complejos.

**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.

---

### **EL3. Título: Caracterización estructural del silicio amorfo mediante modelado computacional.**

**Tutor:** Iván Santos Tejido

#### **Resumen:**

El silicio amorfo (a-Si) es ampliamente utilizado en aplicaciones fotovoltaicas, pero la presencia de defectos en su estructura limita enormemente la eficiencia de los dispositivos fabricados [1, 2]. Además, la iluminación prolongada del a-Si aumenta la concentración de defectos en su estructura [6], lo que degrada sus prestaciones eléctricas, fenómeno que se conoce como “efecto Staebler-Wronski” [7].

Para poder controlar la presencia de defectos en a-Si y sus efectos en los dispositivos es necesario poder determinar su concentración mediante técnicas como la difracción de Rayos X o de neutrones o la dispersión Raman. Estas técnicas permiten conocer detalles a nivel atómico de la estructura de los materiales. Sin embargo, la gran variabilidad estructural del a-Si (que es un material amorfo), dificulta enormemente la correlación de las señales experimentales obtenidas con detalles a nivel atómico de la estructura del a-Si. Por ejemplo, la anchura del pico TO obtenido por dispersión Raman está relacionada con la concentración de defectos presente en el a-Si. Sería por tanto deseable poder correlacionar la señal Raman con las características de los defectos presentes en silicio amorfo. Por todos estos motivos, la caracterización computacional de la estructura del a-Si sea un tema que ha cobrado un gran interés en los últimos años [8–14]. Sin embargo todavía falta entender mejor la relación que existe entre las medidas experimentales y la estructura atómica del a-Si.

El objetivo de esta propuesta de TFG es modelar computacionalmente medidas experimentales para poder correlacionar las señales modeladas con detalles a nivel atómico de la estructura del a-Si y poder entender mejor los resultados de las medidas experimentales. Para ello se modelarán computacionalmente alguna o varias de señales obtenidas con las técnicas experimentales usadas para caracterizar la estructura del a-Si: dispersión Raman, difracción de Rayos X, y difracción de neutrones.

En este TFG se empleará el código de simulación paralelo LAMMPS. 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, manejará equipos computacionales de altas prestaciones y software paralelo, implementará algoritmos y programas para modelar las señales experimentales mencionadas, y realizará scripts para el análisis y visualización de los resultados de los cálculos.

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

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

---

#### **EL4. Título: Modelado atomístico de la señal de nanocalorimetría asociada a la eliminación de defectos en silicio irradiado.**

**Tutores:** Pedro López Martín, Lourdes Pelaz Montes e 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.

---

#### **EL5. Título: Modelado atomístico de la difusión atómica superficial en 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 la difusión atómica en capas crecidas de SiGe sobre Si, y los procesos físicos a los que da lugar.

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 atómicas, 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.

---

## **EL6: Título: Estudio de los campos de tensión en zonas dañadas por implantación iónica mediante simulaciones atómicas.**

**Tutores:** María Aboy Cebrián e Iván Santos Tejido

### **Resumen:**

La implantación iónica es el principal método para introducir dopantes en los semiconductores de forma controlada y consiste en acelerar los dopantes ionizados mediante un campo eléctrico y dirigirlos hacia el semiconductor que se quiere dopar. Cuando los dopantes entran en el semiconductor colisionan con los átomos de la red y se genera daño. Este daño puede producir campos de tensiones locales que podrían afectar a los diversos procesos físicos que tienen lugar durante las etapas posteriores a la implantación iónica (difusión atómica, activación eléctrica de dopantes).

El objetivo de este TFG es caracterizar los campos de tensiones en las zonas dañadas por implantación iónica.

En principio el trabajo estará centrado en silicio. Dependiendo del desarrollo del trabajo, se podrían analizar los efectos de la radiación en otros materiales semiconductores.

Para ello se empleará un código de dinámica molecular desarrollado en el departamento de Electricidad y Electrónica de la Universidad de Valladolid, y también podrá emplearse el software de simulación paralelo LAMMPS desarrollado en el Laboratorio Nacional de Sandía de EE.UU. Las simulaciones se ejecutarán en los servidores multiprocesador de que dispone en la unidad de investigación consolidada MMM (<http://www.ele.uva.es/~mmm>).

El TFG que se propone es un trabajo de simulación por ordenador, lo que implica que en algún punto del desarrollo del trabajo el alumno necesitará realizar pequeños programas para preparar las simulaciones o para analizar los datos obtenidos de ellas. No se requieren conocimientos avanzados de programación, pero sí se

recomienda tener cierta predisposición a la programación, así como estar familiarizado con el sistema operativo Linux.

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

**FMC1. Título: Estudio de guías de onda de InP fabricadas por grabado seco**

**Tutores:** Juan Jiménez López, Shabnam Dadgostar y Jesús Medina

**Resumen:**

Trabajo experimental, con modelización.

Estudio de los defectos generados y las deformaciones en guías de onda de InP y vertical cavity surface emitting lasers (VCSELs) fabricados mediante ataque seco por plasma (ICP).

Se trata de estudiar los efectos del grabado sobre distintas estructuras grabadas mediante ataque seco por plasma. En particular se trata de estudiar guías de onda fabricadas sobre InP, teniendo en cuenta la química de grabado (con Cl ó sin Cl), la anchura de las guías y su profundidad. En las estructuras VCSEL se estudiará el efecto del grabado seco, y de la oxidación posterior para definir la cavidad de los láseres.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** El trabajo es experimental y presencial.

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

---

**FMC2. Título: Desarrollo de fibras poliméricas para el tratamiento de aguas contaminadas con nitratos**

**Tutores:** Suset Barroso Solares y Javier Pinto Sanz

**Resumen:**

Trabajo experimental.

Se desarrollará un material con capacidad para limpiar o detectar aguas contaminadas por nitratos, un compuesto tóxico muy abundante en nuestro país y en particular en Castilla y León, ya que su presencia suele estar asociada a la actividad ganadera y agrícola. En particular se fabricarán fibras poliméricas mediante la técnica de electrospinning, empleando para ello preferentemente polímeros biodegradables, y se modificarán mediante la adición de cargas activas y/o tratamientos superficiales para dotarlas de la capacidad de eliminar o detectar los nitratos de aguas contaminadas. Los materiales fabricados y su rendimiento en esta aplicación se evaluarán mediante una amplia selección de técnicas experimentales, y se aplicarán modelos teóricos para comprender y evaluar los mecanismos de interacción entre los materiales fabricados y los nitratos.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** El trabajo es experimental y presencial.

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

---

### **FMC3. Título: Fabricación y caracterización de polímeros nanocelulares bajo condiciones extremas**

**Tutores:** Judith Martín de León y Miguel Ángel Rodríguez Pérez

#### **Resumen:**

Trabajo experimental.

Los polímeros nanocelulares son uno de los materiales más prometedores para desarrollar aislantes térmicos de gran eficiencia y bajo coste, e incluso materiales aislantes transparentes que permitan sustituir al vidrio en ventanas. Continuar con el desarrollo, mejora e implementación industrial de estos materiales podría permitir alcanzar los objetivos de reducción de consumo energético y emisiones de CO<sub>2</sub> establecidos por la Unión Europea para las próximas décadas. En los últimos años se ha demostrado que tanto en el incremento de la presión bajo la que se fabrican estos materiales, así como en la reducción de la temperatura por debajo de cero grados pueden estar las claves para dar un salto cualitativo en la fabricación de estos materiales y alcanzar unas propiedades físicas (transparencia y elevado aislamiento térmico) nunca antes obtenidas. En este TFG se desarrollarán polímeros nanocelulares empleando para ello nuevo equipamiento que permite por primera vez alcanzar simultáneamente las condiciones antes mencionadas (altas presiones y bajas temperaturas), y se caracterizarán mediante una amplia selección de técnicas experimentales, para comprender, y si es posible modelizar, la relación entre los parámetros de fabricación, la estructura de los materiales obtenidos, y sus propiedades físicas.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** El trabajo es experimental y presencial.

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

### **CM1. Título: Análisis de la evolución de la composición de los morteros a lo largo de la historia**

**Tutores:** Javier Pinto Sanz y Carmelo Prieto Colorado

#### **Resumen:**

Trabajo experimental.

El mortero, una mezcla de agua, arena y un aglomerante, ha sido empleado en la construcción de edificios desde los orígenes de la civilización (se cree que su uso pudo comenzar en el año 6500 AC en el valle del Indo, Pakistán). En la actualidad el aglomerante más empleado es el cemento Portland, pero en la antigüedad se emplearon diferentes compuestos: cal, yeso, sustancias orgánicas... En este TFG se identificará y comparará la composición de diversas muestras históricas de motero, desde el Imperio Romano hasta nuestros días.

Para el desarrollo del trabajo el alumno recibirá formación en el uso e interpretación de técnicas experimentales como la espectroscopía Raman, espectroscopía infrarroja, y difracción de rayos-X.

**Adecuación del trabajo para alumnos en movilidad:** El trabajo es experimental y presencial.

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