



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

FACULTAD DE CIENCIAS

ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA: Ingeniería Química y Química Física

-TÍTULO DEL TRABAJO: Estudio comparativo de las propiedades de líquidos de distinta polaridad empleando técnicas de simulación de dinámica molecular

- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO

-Tipo de trabajo (señalar con una cruz el que proceda):

Teórico		Revisión e investigación bibliográfica	Numérico	
Proyectos de ingeniería		Proyectos de diseño industrial	Informes	
Computacional	X	Experimental	Otros (especificar)	

-Descripción del trabajo (objetivos, metodología...)

Estudiar las propiedades y estructura de líquidos mediante la realización de simulaciones de dinámica molecular. Se trataría de calcular propiedades termodinámicas (tanto estáticas como dinámicas) y estructurales de líquidos puros y/o disoluciones. Se realizará un estudio comparativo de líquidos de distinta polaridad, intentando relacionar sus propiedades con parámetros tanto macroscópicos (densidad, constante dieléctrica, etc) como microscópicos (polarizabilidades, momentos dipolares, etc).

Titulación: Grado en Química

Observaciones:

-TUTORES:


Nombre: Manuel Ángel Aguilar Espinosa

Área de conocimiento: Química Física

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 23 de octubre de 2013


Vº Bº y Firma del Director del Dpto




Vº Bº y Firma del Tutor

Decanato de la Facultad de Ciencias