



Propuesta de Trabajo Fin de Máster

Año académico 2023-2024

MÁSTER EN MÉTODOS COMPUTACIONALES EN CIENCIAS

Proyecto Nº 09 ASIGNADO

Título: Modelado numérico y experimental del proceso de fisorción en superficies.

Departamento/ Laboratorio: Física y Matemática Aplicada

Director: Diego M. Maza Ozcoidi

Correo electrónico: dmaza@unav.es

Resumen:

En este proyecto se persigue comprobar mediante un modelo a gran escala algunas de las predicciones introducidas mediante métodos computacionales sobre la adsorción en superficies de moléculas alargadas o "rods". Estas predicciones son muy variadas y escasamente comprobadas en el laboratorio a escala molecular por las dificultades que implica esa escala. Por ello, se diseñará e implementará un modelo mecánico simple, donde varillas de longitud variables podrán quedar atrapadas sobre un sustrato estriado sometido a vibraciones. Así, variando el número de varillas presentes en el sistema se introducirá un análogo al potencial químico con objeto de contextualizar este sistema en el marco de la Mecánica Estadística y así comparar sus resultados con aquellos de origen numérico y teórico.

OPTATIVAS RECOMENDADAS

1. Adquisición de datos
2. Procesamiento de imágenes
3. Programación avanzada
4. Machine learning I