

Título: SIMULACION DE LIQUIDOS MOLECULARES FLEXIBLES

Nombre: GARCÍA ALMARZA, NOE

Universidad: Universidad Complutense de Madrid

Fecha de lectura: 01/01/1991

Programa de doctorado: DESCONOCIDO

Dirección:

> **Director:** EDUARDO ENCISO RODRIGUEZ

Tribunal:

> **presidente:** JUAN JOSE FREIRE GOMEZ

> **secretario:** PAZ PADILLA GOMEZ-GUILLAMON

> **vocal:** MANUEL LOMBARDERO DIAZ

> **vocal:** MIGUEL RUBI CAPACETTI

> **vocal:** COLMENERO DE LEON JUAN

Descriptor:

> FISICA

> FISICA DE FLUIDOS

> FISICA DEL ESTADO LIQUIDO

> QUIMICA FISICA

> LIQUIDOS

El fichero de tesis ya ha sido incorporado al sistema

> <http://dialnet.unirioja.es/servlet/tesis?codigo=14125>

> <https://eprints.ucm.es/id/eprint/2028/>

Localización: E-PRINTS COMPLUTENSE

Resumen: MEDIANTE TECNICAS DE SIMULACION POR ORDENADOR SE HA ESTUDIADO EL EQUILIBRIO CONFORMACIONAL DE MOLECULAS ORGANICAS, ANALIZANDOSE LA INFLUENCIA DEL MEDIO EN FUNCION DE LAS CONDICIONES TERMODINAMICAS (DENSIDAD, TEMPERATURA) Y DE LAS CARACTERISTICAS DE LAS MOLECULAS (POLARIDAD, TAMAÑO MOLECULAR, ETC). PARA LA SIMULACION DE ESTOS SISTEMAS SE HAN DESARROLLADO NUEVOS PROCEDIMIENTOS DE SIMULACION DE TIPO "METROPOLIS MONTE CARLO" QUE MEJORAN LA EFICENCIA DE LOS CALCULOS RESPECTO A LOS PROCEDIMIENTOS COMUNMENTE EMPLEADOS.

LOS VALORES OBTENIDOS PARA LAS PROPIEDADES
TERMODINAMICAS SE COMPARAN CON RESULTADOS EXPERIMENTALES.

LOS RESULTADOS DE SIMULACION PARA LA ESTRUCTURA
INTRAMOLECULAR SE ANALIZAN POR COMPARACION CON LOS
OBTENIDOS MEDIANTE TECNICAS DE DISPERSION DE NEUTRONES.