

Temas de Trabajo de Fin de Grado en Física: Física Teórica de la Materia Condensada

Curso 2022-23

FTMC. Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada

Coordinador: Pablo Pou Bell, pablo.pou@uam.es

FTMC.A.1. Metamateriales cuánticos / Quantum Metamaterials

(Tutor: Antonio Fernández Domínguez, a.fernandez-dominguez@uam.es)

In the last decade, the rapid progress experienced by metamaterial science and technology has allowed the realization and exploitation of optical phenomena not attainable in conventional (natural) materials [1,2]. Thus, groundbreaking applications, such as perfect lensing or invisibility cloaking, have been demonstrated. Recently, the field has evolved towards the quantum optical realm, with the aim of developing strategies for the generation, manipulation and detection of light at the level of few (or even single) quanta (photons).

This project deals with the theoretical description of quantum metamaterials, with special focus on their planar, two-dimensional version, usually known as quantum metasurfaces. The unit cells of these systems are composed of microscopic light emitters, such as atoms, molecules or quantum dots, whose interaction (and therefore collective response) can be engineered through their photonic environment. Recent reports have implemented quantum optical functionalities, such as entanglement generation or high-fidelity photon storage, in these devices [3,4]. In this project, we will investigate metasurfaces of increasing complexity, assessing their performance for the control of the spatial, spectral and statistical properties of light.

The TFG-EXP section of this project will be conducted within the Nanophotonics numerical lab within the Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada.

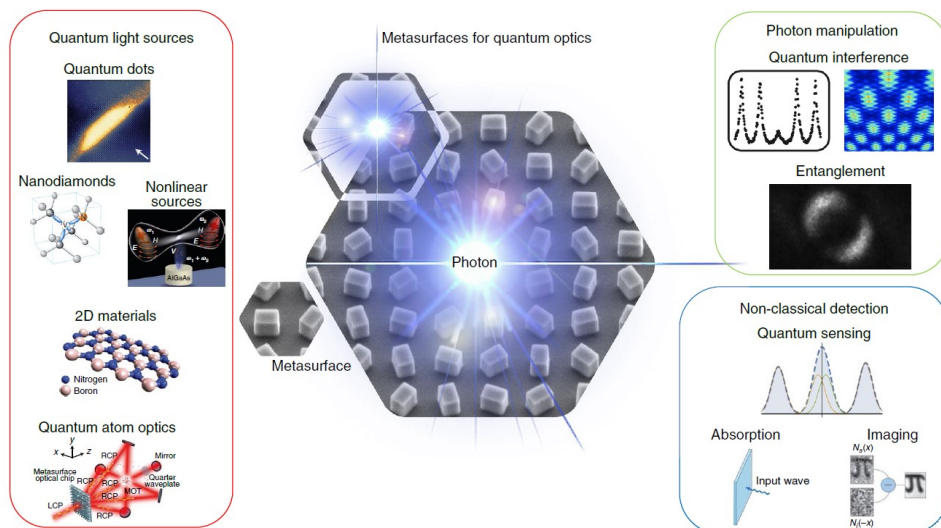


Figure 1: Illustration of different cases of interaction between optical metasurfaces and photons: quantum light sources (left), photon manipulation (top right) and the non-classical detection of light (bottom right). Adapted from Ref. [4]

[1] C. M. Soukoulis and M. Wegener, *Nature Photonics*, 5, 523–530 (2011).

<https://doi.org/10.1038/nphoton.2011.154>

[2] N. Yu and F. Capasso, *Nature Materials* 13, 139–150 (2014). <https://doi.org/10.1038/nmat3839>

[3] R. Bekenstein et al., *Nature Physics* 16, 676–681 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41567-020-0845-5>

[4] A. S. Solntsev et al., *Nature Photonics* 15, 327–336 (2021). <https://doi.org/10.1038/s41566-021-00793-z>

**FTMC.A.2. Orden de carga y efecto Hall cuántico anómalo en vanadatos /
Charge ordering and quantum anomalous Hall effect in vanadates
(Tutor: Jaime Merino, jaime.merino@uam.es)**

The phase diagram of the vanadate materials, AV_3Sb_5 ($A=K,Rb,Cs$), displays charge order, superconductivity and quantum anomalous Hall (QAH) phases which remain poorly understood. Several fundamental questions arise: What is the connection (if any) between the superconductivity and the charge ordering observed? Which is the origin of the QAHE occur? What are the topological properties of these materials?

In the present TFG, the student will explore the electronic properties of these materials based on simple electronic models that capture their key physics. The research work will concentrate in describing theoretically the charge ordering transition observed and explain the origin of the quantum anomalous Hall effect observed.

The TFG-EXP part of the present project will be carried out within the Computational simulation of materials at the atomic and nanometric scale lab of the Dpto. de Física Teórica de la Materia Condensada.

FTMC.A.3. Modelización de un microscopio de fuerzas atómico (AFM): Imágenes de alta resolución de moléculas / Atomic Force Microscopy simulations: High resolution images of molecules

(Tutor: Pablo Pou, pablo.pou@uam.es)

Las microscopías de proximidad (microscopio de efecto túnel o STM, microscopio de fuerzas atómicas o AFM,...) nos permiten ver y manipular la materia a escala atómica y así caracterizar las propiedades físicas de los materiales. Recientemente, gracias a la funcionalización de las puntas usadas en el AFM, se han conseguido aumentar los límites de resolución de estas microscopías consiguiendo discernir no solo los átomos sino sus enlaces y la distribución de carga de los materiales analizados [1]. Estos avances hacen de estas técnicas las idóneas para la caracterización de moléculas sencillas y nuevos materiales.

En este Proyecto Fin de Grado el alumno aprenderá los fundamentos teóricos del microscopio de fuerzas atómico y estudiará, usando métodos de simulación computacional, cómo esta microscopía permite la observación con resolución atómica de la estructura interna de moléculas [2].

La parte TFG-EXP de este proyecto se realizaría dentro de la práctica de "Simulación computacional de materiales a escala atómica y nanométrica" del laboratorio del Dpto. de Física Teórica de la Materia Condensada.

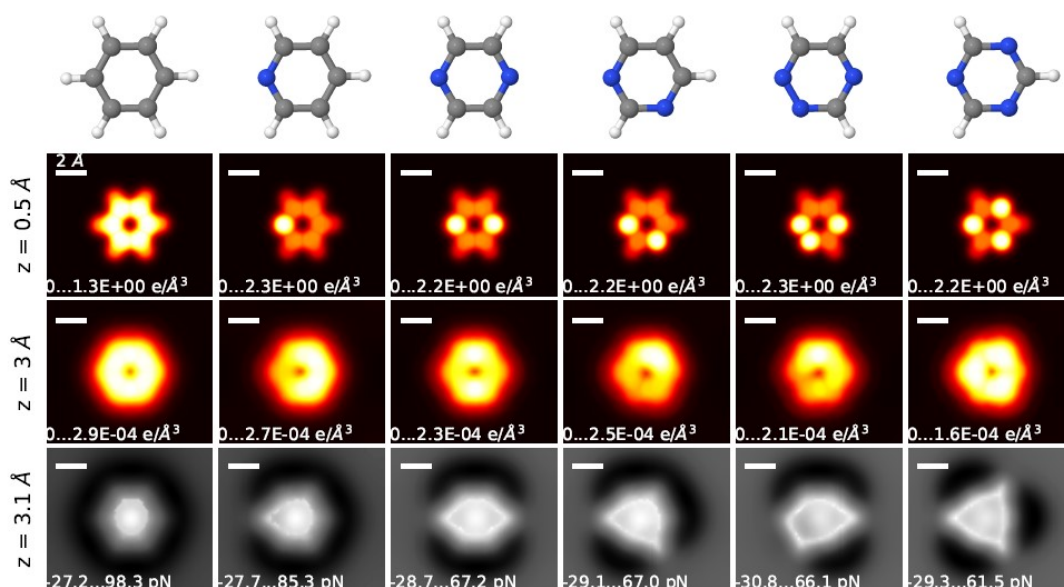


Figura 1: Estructura atómica de moléculas sencillas, su densidad de carga e imágenes AFM simuladas de las mismas [2].

[1] L. Gross et al., Science 325, 1110 (2009); L. Gross et al., Angew Chem 57, 3888 (2018)

[2] M. Ellner et al, ACS Nano 13, 786 (2019); T. K. Shimizu et al., J Phys. Chem. C 10.1021/acs.jpcc.0c07726 (2020)

FTMC.A.4. Propiedades cuánticas de la propagación del calor / Quantum heat transport
(Tutores: **Rafael Sánchez**, rafael.sanchez@uam.es, **José Balduque**, jose.balduque@uam.es)
<http://webs.ftmc.uam.es/rafael.sanchez/>

En circuitos de tamaño nanoscópico, los electrones pueden mantener su coherencia cuántica y dar lugar a interferencias. Esto permite medir y controlar las propiedades cuánticas de los electrones. Por ejemplo, en anillos cuánticos como el que se muestra en la figura, las interferencias se pueden modular por medio del flujo magnético que atraviesa el sistema y que afecta de manera distinta a la fase de los electrones que se propagan en sentidos opuestos. Esto da lugar a oscilaciones en la corriente eléctrica cuya observación dio lugar al nacimiento del transporte cuántico [1]. Mucho menos conocidas son las propiedades de transporte del calor debidas a la aplicación de diferencias de temperatura en los extremos del conductor. El trabajo propone la investigación de cómo la propagación del calor se ve afectada por las propiedades cuánticas de los electrones, lo que abre la posibilidad de manipular los flujos térmicos de los dispositivos electrónicos.

Durante la realización del trabajo, se aprenderán técnicas de transporte cuántico (teoría de dispersión), conceptos de mecánica cuántica avanzada (fases geométricas y el efecto Aharonov-Bohm, decoherencia) y aplicaciones al campo de la termodinámica cuántica (conversión del calor en potencia, circulación del calor).

La parte TFG-EXP de este proyecto se realizaría dentro de la práctica de “Simulación computacional de materiales a escala atómica y nanométrica” del laboratorio del dpto. de Física Teórica de la Materia Condensada.

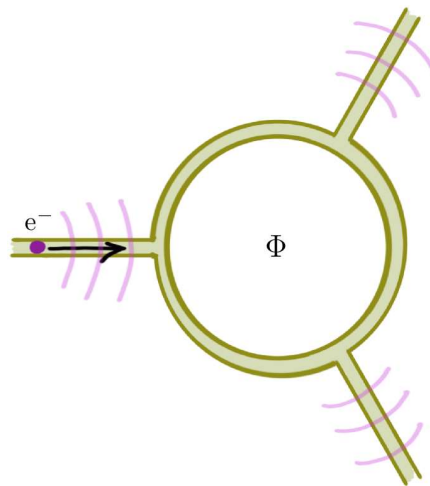


Figura 1: Interferómetro de ondas electrónicas de tres terminales. La fase acumulada por los electrones al atravesar el anillo puede ser modulada con un campo magnético.

[1] Yu. V. Nazarov, Ya. M. Blanter, “*Quantum transport. Introduction to nanoscience*” (Cambridge Univ. Press., 2009); <https://doi.org/10.1017/CBO9780511626906>.

FTMC.A.5. Demonios de Maxwell en sistemas cuánticos / Maxwell demons in quantum systems

(Tutor: Rafael Sánchez, rafael.sanchez@uam.es, <http://webs.ftmc.uam.es/rafael.sanchez/>)

Un demonio de Maxwell es un mecanismo conceptual por el cual el conocimiento del estado microscópico de un sistema puede utilizarse para revertir sus propiedades termodinámicas. Por ejemplo, puede disminuir la entropía del sistema, en aparente conflicto con la segunda ley de la termodinámica. De esta forma, se pone de manifiesto la necesidad de considerar la información que se tiene de un sistema como una cantidad física [1]. La reciente capacidad de construir sistemas nanoscópicos en los se puede manipular estados con un reducido número de partículas permite acceder a los grados de libertad microscópicos de la misma manera que lo haría un demonio de Maxwell [2] y, además, definir y medir de forma experimental el flujo de la información y sus propiedades termodinámicas.

El objetivo de este trabajo es analizar de forma teórica la posibilidad de generar tales configuraciones en sistemas cuánticos acoplados a baños térmicos. Para ello, el/la estudiante aprenderá conceptos de termodinámica en sistemas cuánticos fuera del equilibrio y técnicas de sistemas cuánticos abiertos (ecuaciones maestras, matriz densidad).

La parte TFG-EXP de este proyecto se realizaría dentro de la práctica de “Simulación computacional de materiales a escala atómica y nanométrica” del laboratorio del dpto. de Física Teórica de la Materia Condensada.

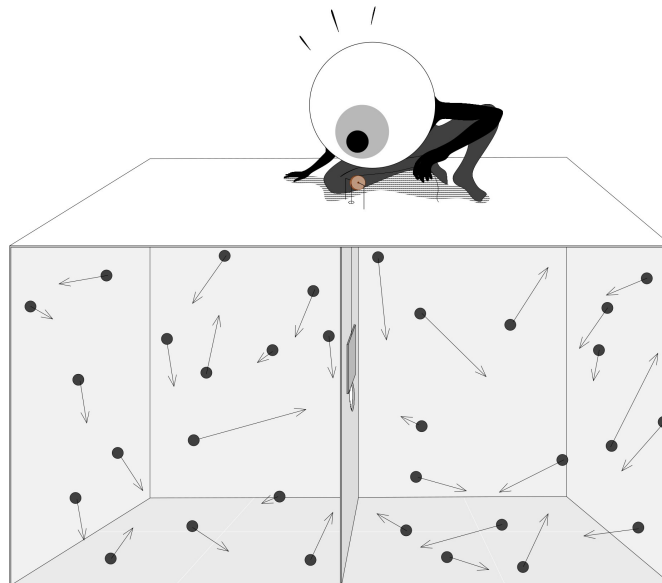


Figura 1: Demonio de Maxwell actuando sobre un gas de partículas clásicas.

[1] H. S. Leff, A. F. Rex (eds.), “Maxwell’s demon 2. Entropy, classical and quantum information, computing”, Institute of Physics Publishing, 2003.

[2] R. Sánchez, P. Samuelsson, and P. P. Potts, Phys. Rev. Research **1**, 033066 (2019); <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.1.033066>

FTMC.A.6. Propiedades termodinámicas de los sistemas cuánticos abiertos / Thermodynamics of open quantum systems

(Tutor: Rafael Sánchez, rafael.sanchez@uam.es, <http://webs.ftmc.uam.es/rafael.sanchez/>)

El campo de la termodinámica cuántica investiga las propiedades de los sistemas cuánticos (por ejemplo, qubits, sistemas de pocos niveles, puntos cuánticos...) al entrar en contacto con uno o más baños térmicos. En el último caso, situaciones fuera del equilibrio dan lugar a flujos de energía que están determinados por la dinámica del sistema cuántico [1], lo que permite realizar operaciones termodinámicas (por ejemplo, la manipulación del calor o su conversión en trabajo o la generación de entrelazamiento [2]) a escalas microscópicas.

Por su carácter discreto, estos sistemas están sujetos a fuertes fluctuaciones debidas a las transiciones entre distintos estados por el intercambio de energía con el entorno. Estas fluctuaciones se manifiestan en forma de ruido en las corrientes térmicas. En este trabajo se investigarán de manera teórica las propiedades del transporte de calor en un sistema de dos qubits acoplados a baños térmicos, del ruido de las corrientes y cómo éste afecta a la posibilidad de definir dispositivos que controlen el calor (ej., diodos térmicos) que puedan ser integrados en circuitos cuánticos. Para ello, el/la estudiante aprenderá conceptos de termodinámica en sistemas cuánticos fuera del equilibrio y técnicas de sistemas cuánticos abiertos (ecuaciones maestras, matriz densidad).

La parte TFG-EXP de este proyecto se realizaría dentro de la práctica de “Simulación computacional de materiales a escala atómica y nanométrica” del laboratorio del dpto. de Física Teórica de la Materia Condensada.



Figura 1: Transiciones en un qubit en contacto con un baño térmico.

[1] F. Binder, L. A. Correa, C. Gogolin, J. Anders, G. Adesso (eds), “*Thermodynamics in the Quantum Regime*” (Springer, 2019); <https://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-99046-0>

FTMC.A.7. Túnel asistido por fotones a través de impurezas magnéticas acopladas a superconductores / Photon-assisted transport through magnetic impurities coupled to superconductors

(Tutor: Juan Carlos Cuevas, juancarlos.cuevas@uam.es)

The competition between magnetism and superconductivity is one of the most fundamental problems in condensed matter physics. The ability of the scanning tunneling microscope (STM) to manipulate individual magnetic atoms and molecules has enabled to study this competition at the atomic scale. One of the most interesting manifestations of the interplay between these two antagonistic phases of matter is the appearance of the so-called Yu-Shiba-Rusinov (YSR) bound states in the spectrum of a single magnetic impurity coupled to a superconductor. Numerous STM-based experiments on single magnetic impurities on surfaces of conventional superconductors have reported the observation of these superconducting bound states [1]. Those experiments have elucidated many basic aspects of the YSR states, but there are still many open questions.

In this context, and motivated by recent experiments [2,3], we want to theoretically investigate the electronic transport through single magnetic impurities coupled to superconducting leads in the presence of a microwave field. The goal is to shed new light on the nature of the tunneling processes that dominate the electrical conduction in these nanoscale junctions by studying the electronic transport under microwave irradiation. More precisely, we hope to provide some new insight into the role of the so-called Andreev reflections in the transport characteristics of these superconducting hybrid systems and to establish the basis for the coherent control of the YSR states in these nanojunctions. In this TFG the student will learn the fundamentals of nonequilibrium Green function techniques as well as the basics of electronic transport in superconducting systems to be able to tackle the challenging research problem described above.

The TFG-EXP of this project will be carried out within the “*Simulación computacional de materiales a escala atómica y nanométrica*” practicum lab of the Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada.

[1] B. W. Heinrich, J. I. Pascual, and K. J. Franke, *Prog. Surf. Sci.* **93**, 1 (2018).

[2] P. Kot, R. Drost, M. Uhl, J. Ankerhold, J.C. Cuevas, C.R. Ast, *Phys. Rev. B* **101**, 134507 (2020).

[3] O. Peters et al., *Nature Physics* **16**, 1222 (2020).

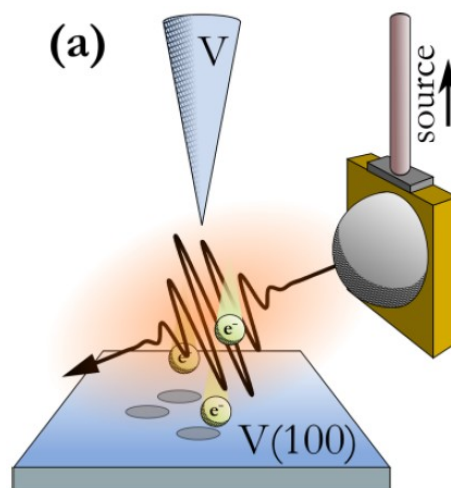


Figure 1: Superconducting STM junction under microwave irradiation.

FTMC.A.8. Estados desordenados y densos de partículas core-gaussianas / Dense disordered states of Gaussian-core particles

(Tutor: Giorgio Cinacchi, giorgio.cinacchi@uam.es)

This project will investigate dense disordered systems of Gaussian-core particles by numerical simulation. The special model particles pairwise interact via the following potential energy of interaction U :

$$U(r) = \epsilon \exp[-(r/\sigma)^2]$$

with r the modulus of the distance vector between the centres of two particles, ϵ the unit of energy and σ the unit of length.

This form of pair interaction potential energy is special primarily because it is bounded. Originally introduced because mathematically tractable [1], Gaussian-core particles have served as useful model for polymers [2]. Systems of Gaussian-core particles result to have a remarkable phase diagram which, in the temperature versus number-density plane, features isotropic-crystal-isotropic re-entrant sequences of phase transitions: for a given temperature, the high-density thermodynamic stable phase is unusually disordered rather than crystalline ordered [1,3] (Fig. 1).

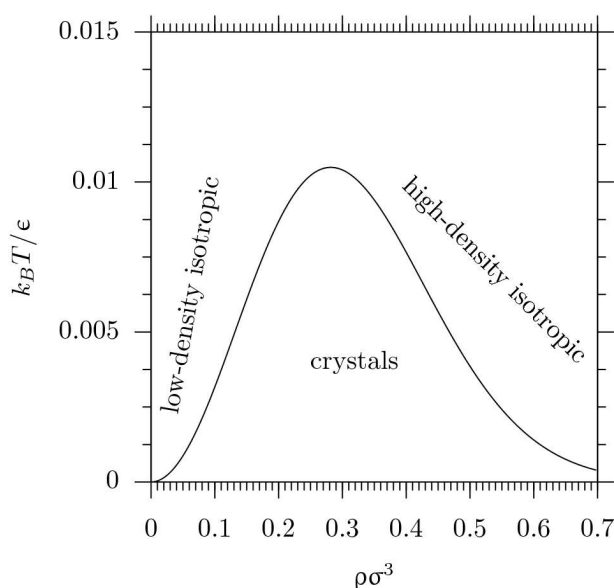


Figure 1: schematic phase diagram of systems of Gaussian-core particles, in the temperature T versus number-density ρ plane. Note that temperature is given in units of ϵ/k_B with ϵ the unit of energy and k_B the Boltzmann constant while the number density is given in units σ^{-3} with σ the unit of length.

This project will investigate this high-density isotropic phase and seek to answer questions such as:

(I) what is the structure of these high-density isotropic states? Is it like that of a simple liquid (e.g. liquid Argon) or not? Does it feature clusters and, if yes, of what shape and size?

(II) Are these high-density isotropic states still fluid or are they glassy instead?

To address these issues, the student, with the constant help of the tutor, will write an original molecular dynamics numerical simulation code with which to generate configurations of Gaussian-core particle systems; subsequently, these configurations will have to be suitably analysed statistically to calculate the relevant structural and dynamical properties.

La parte TFG-EXP de este proyecto se realizaría dentro de la práctica de materia condensada blanda del laboratorio del dpto. de Física Teórica de la Materia Condensada.

[1] F. H. Stillinger, J. Chem. Phys. 65, 3968 (1976); F. H. Stillinger, T. A. Weber, J. Chem. Phys. 68, 3837 (1978); F. H. Stillinger, Phys. Rev. B 20, 299 (1979); F. H. Stillinger, T. A. Weber, Phys. Rev. B 22, 3790 (1980).

[2] A. A. Louis et al., Phys. Rev. Lett. 85, 2522 (2000); P. Bolhuis et al., J. Chem. Phys. 114, 4296 (2001).

[3] S. Presipino, F. Saija, G. V. Giaquinta, Phys. Rev. E 71, 050102(R) (2005).

FTMC.A.9. Propiedades mecánicas de membranas lipídicas y poliméricas / Mechanical properties of lipid and polymer membranes

(Tutoras: **Laura R. Arriaga**, laura.rodriquezarriaga@uam.es;
Paula Magrinya Aguiló, paula.magrinya@uam.es)

Las membranas biológicas de las células y de sus orgánulos internos están constituidas por bicapas de lípidos. Los lípidos se auto-ensamblan formando bicapas debido a su naturaleza anfifílica. Sus cabezas son polares y se exponen al agua, mientras que sus colas hidrocarbonadas son apolares y minimizan su contacto con ella al ensamblarse de esta manera. Si la bicapa se mantiene plana, las cadenas hidrocarbonadas de los extremos de la bicapa quedan expuestas al agua, por lo que la bicapa tiende a cerrarse sobre sí misma dando lugar a una estructura denominada vesícula lipídica o liposoma. Dichas vesículas encuentran aplicaciones en farmacia y medicina ya que su membrana permite proteger el material encapsulado y son sistemas modelo en el estudio de diversos procesos celulares. Desafortunadamente, las membranas de los liposomas son extremadamente delgadas, su espesor es del orden de 5 nm, ya que los lípidos son moléculas pequeñas, lo que limita su estabilidad mecánica. Para mejorar dicha estabilidad mecánica, los lípidos pueden sustituirse por moléculas anfifílicas más grandes, polímeros di- o tri-bloque, que se autoensamblan en forma de vesículas poliméricas o polimerosomas, como se ilustra en la Figura 1. En este TFG se pondrá a punto una técnica experimental basada en deformar vesículas con campos eléctricos para medir las propiedades mecánicas de diversas membranas vesiculares, lipídicas y/o poliméricas.

La parte TFG-EXP de este proyecto se realizaría dentro de la práctica de Física de Sistemas Biológicos del laboratorio del Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada.

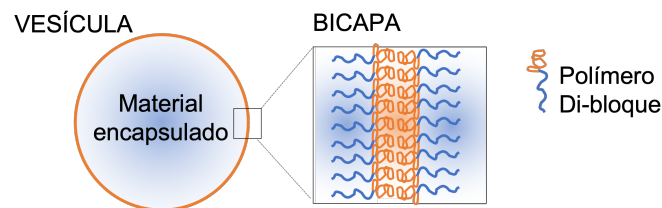


Figura 1: Ilustración esquemática de una vesícula polimérica o polimerosoma.

FTMC.A.10. Buscando estructuras desordenadas hiperuniformes / Finding disordered hyperuniform structures

(Tutores: **Juan R. Arago**nes, [pablo.llombart](mailto:juan.aragones@uam.es; Pablo Llombart, <a href=)@uam.es)

Disordered hyperuniform structures are an exotic state of matter that exhibit vanishing long-wavelength density fluctuations just like crystalline structures or quasicrystals but without long-range order. These hyperuniform or super homogeneous systems can have a huge impact in material science since they open the door to the design of materials with engineered properties. These structures present similar properties to those of crystals but sometimes much more robust, such as materials with large isotropic photonic bandgaps insensitive to defects. Some disordered hyperuniform structures have been found such as maximally random jammed packings, avian photoreceptor patterns and some non-equilibrium systems. However, the design of experimentally realizable disordered hyperuniform structures remains challenging. Therefore, in this work we will explore some biological systems across different length scales to find disordered hyperuniform structures such as the distribution of pores in our skin at macroscopic scale or the distribution of proteins within biological membranes at the microscopic scale.

The TFG-EXP part of this project will be included within the Physics of Biological Systems of the Department of Theoretical Condensed Matter Physics.

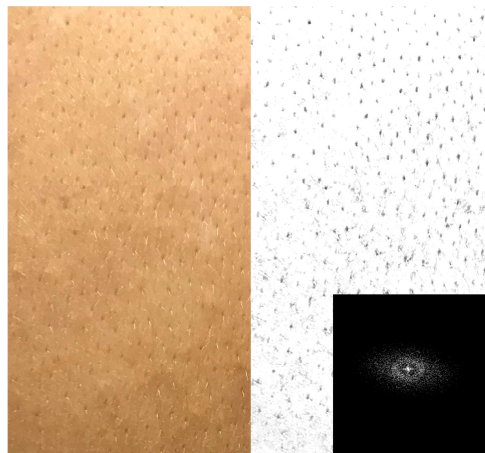


Figure 1: Image of the Pablo's arm skin and the corresponding structure factor of the pores distribution, where we can clearly identify the signature pattern of a disordered hyperuniform structure in which the structure factor goes to 0 in the infinite volume limit (wavenumber $k \rightarrow 0$).

FTMC.A.11. Química en superficies o cómo controlar las interacciones intermoleculares mediante el sustrato / On-Surface-Chemistry: tuning intermolecular interactions by the substrate

(Tutor: Pablo Pou, pablo.pou@uam.es)

El efecto de las superficies sobre las interacciones moleculares ha sido usado por el hombre desde épocas inmemoriales. El ejemplo más típico es la catálisis donde la absorción de moléculas en determinadas superficies beneficia, o perjudica, ciertas reacciones químicas. En este trabajo de fin de grado se estudiará cómo es posible controlar las interacciones entre ciertas moléculas absorbiéndolas en diferentes superficies [1]. Este estudio se realizará mediante técnicas de simulación basadas en la teoría del funcional de la densidad. En particular nos centraremos en moléculas que forman entre sí enlaces halógenos, también conocidos como "X-bonds". Estos enlaces son parecidos a los conocidos puentes de hidrógeno, pero se dan entre átomos halógenos (F, Cl, Br, I). El autoensamblado de moléculas es hoy en día uno de los desarrollos más prometedores para el diseño de nuevos materiales. Para este propósito los enlaces halógenos son de especial interés debido a su alta direccionalidad y a la posibilidad de controlar su intensidad [2].

La parte TFG-EXP de este proyecto se realizaría dentro de la práctica de "Simulación computacional de materiales a escala atómica y nanométrica" del laboratorio del Dpto. de Física Teórica de la Materia Condensada.

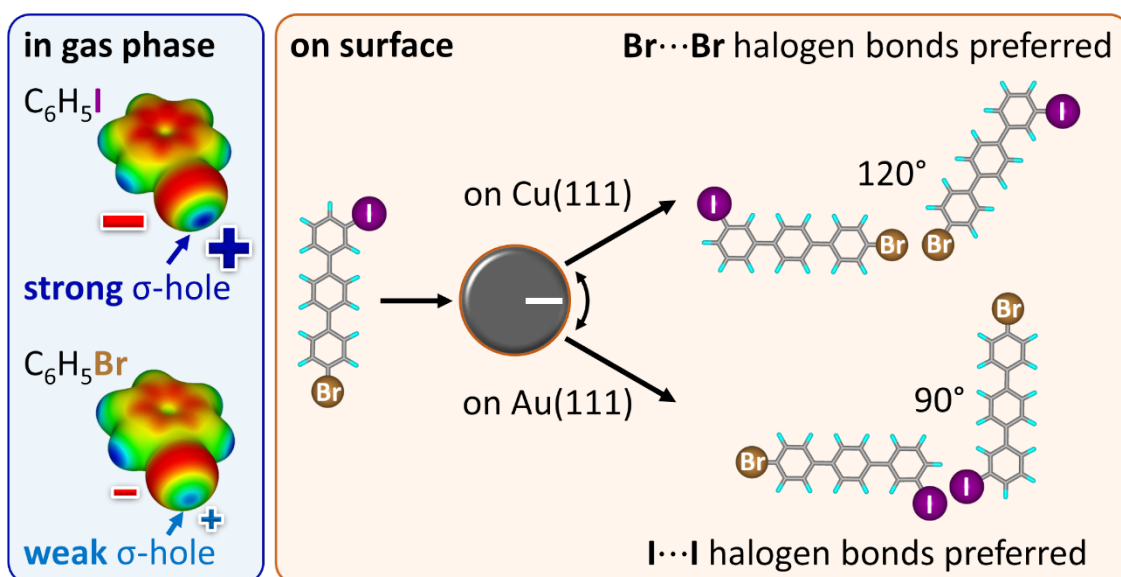


Figura 1: Átomos halógenos enlazados covalentemente a ciertos radicales moleculares forman en su extremo una carga positiva, el llamado σ -hole. Gracias a esta carga estas moléculas pueden interactuar con el cinturón de carga negativa de halógenos de otras moléculas. La intensidad de este σ -hole se modifica cuando la molécula se absorbe sobre una superficie. Esto abre la posibilidad de controlar las interacciones intermoleculares favoreciendo unos enlaces frente a otros [2].

- [1] D. de Oteyza et al., Science 340, 1434 (2013); S. Clair et al, Chem. Rev. 119 4717 (2019); L. Dong et al., Acc. Chem. Res. 48, 2765 (2015); D. P. Goronzy et al., ACS Nano 12, 7445 (2018)
[2] J. Tschakert et al., Nat Comm 11, 5630 (2020) <https://doi.org/10.1038/s41467-020-19379-4>

FTMC.A.12. Light-matter interactions with hybrid nanophotonics / Interacciones luz-materia con nanofotónica híbrida

(Tutores: **Diego Martín Cano**, diego.martin.cano@gmail.com, **Johannes Feist**, johannes.feist@uam.es)

The interactions between optical photons and atoms are commonly quite weak in nature. One way to circumvent this common situation is to structure the environments at the nanometer scale and so to enable the storage of electromagnetic energy in volumes comparable or smaller than the wavelength of the photon. In this research line, two of the most common and complementary strategies to enhance those interactions correspond to the use of metallic nanoparticles and microcavities, respectively. Whereas nanoparticles provide extreme confinements at tiny volumes and fast timescales, the high quality mirrors forming the microcavities allow multiple reflections that enhance optical interactions at longer times. The goal of this work is to analyze the optical interactions of novel collective compounds of nanoparticles and microcavities [1] (see illustration in fig. 1) and how to obtain an enhanced hybridization of both structures properties. For this purpose, it will be used a combination of semi-analytical tools with numerical simulations using the strength of COMSOL Multiphysics [2], based on the finite-element method. A particular emphasis will be made on studying the ability of these hybrid cavities to modify the local density of states mediating the interaction with nearby atoms and molecules.

La parte TFG-EXP de este proyecto se realizaría dentro de la práctica de Nanofotónica del laboratorio del dpto. de Física Teórica de la Materia Condensada.

1. B. Gurlek, V. Sandoghdar, D. Martín-Cano, ACS Photonics **5**, 456-461 (2017). <https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/acsp Photonics.7b00953>
2. COMSOL Multiphysics, <https://www.comsol.com/>

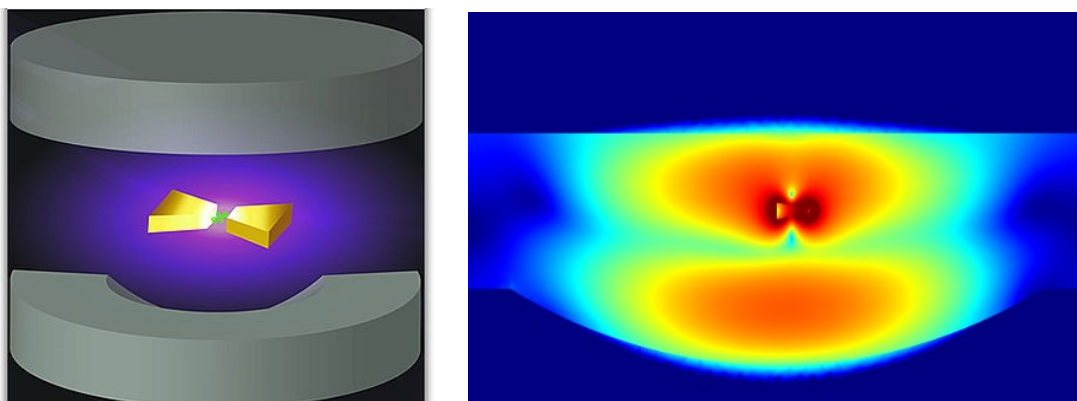


Figure 1: Illustration (left) and numerical simulation (right) of a hybrid cavity formed by a gold nanoparticle embedded in a microcavity.

FTMC.A.13. Caos cuántico y correspondencia cuántico-clásica / Quantum chaos and quantum-classical correspondence

(Tutor: Carlos Sánchez Muñoz, carlos.sanchezmunnoz@uam.es)

El caos cuántico es la rama de la física que estudia cómo los sistemas clásicos que exhiben comportamientos caóticos son descritos desde la perspectiva de la teoría cuántica¹⁻³. En esencia, es un campo que pretende establecer el puente entre la mecánica cuántica y la mecánica clásica, intentando responder la siguiente pregunta: si un sistema cuántico no tiene una sensibilidad exponencial a las condiciones iniciales, ¿cómo puede dicha sensibilidad emerger en un sistema clásico, que debería ser el límite de un sistema cuántico según el principio de correspondencia? Intentar contestar esta pregunta nos lleva a afrontar cuestiones apasionantes y muy actuales de la teoría cuántica, tales como el problema de la medida, la decoherencia, o la termalización de sistemas aislados de muchos cuerpos. Todas estas cuestiones son extremadamente relevantes, tanto al nivel de fundamentos de la mecánica cuántica, como al nivel práctico en el desarrollo de tecnologías cuánticas.

En este trabajo, nos familiarizaremos con la teoría de caos cuántico, investigando un sistema caótico que ha recibido poca atención en la literatura: el oscilador de impacto forzado⁴. Estudiaremos la correspondencia cuántico-clásica calculando la dinámica clásica de distribuciones de probabilidad en el espacio de fases mediante la ecuación de Liouville, y resolviendo el problema cuántico análogo mediante el uso del paquete Qutip en Python para el cálculo de dinámicas en sistemas cuánticos abiertos. Nos familiarizaremos con conceptos clave en el análisis de dinámicas caóticas, calculando y analizando magnitudes como los exponentes de Lyapunov, la estadística de repulsión de niveles de energía, o la visualización de “cicatrices cuánticas” en los autoestados del sistema.

La parte TFG-EXP de este proyecto se realizaría dentro de la práctica de Simulación Computacional de Materiales a escala atómica y nanométrica

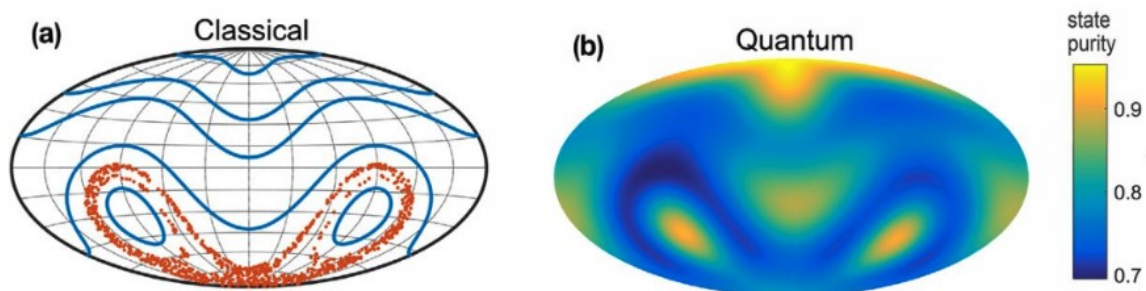


Figura 2: Caos cuántico en un espín nuclear⁵.

Referencias:

VIDEO en Youtube: Chaos: The real Problem of Quantum Mechanics
(<https://www.youtube.com/watch?v=LJzKLTavk-w>)

(1) Habib, S.; Shizume, K.; Zurek, W. H. Decoherence, Chaos, and the Correspondence Principle. *Phys. Rev. Lett.* **1998**, *80* (20), 4361–4365. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.4361>.

(2) Zurek, W. H. Decoherence, Einselection, and the Quantum Origins of the Classical. *Rev. Mod. Phys.* **2003**, *75*, 715.

(3) Alessio, L. D. ; Kafri, Y.; Polkovnikov, A.; Rigol, M. Advances in Physics From Quantum Chaos and Eigenstate Thermalization to Statistical Mechanics and Thermodynamics. **2016**.
<https://doi.org/10.1080/00018732.2016.1198134>.

(4) Fang, W.; Wickert, J. A. Response of a Periodically Driven Impact Oscillator. *Journal of Sound and Vibration* **1994**, *170* (3), 397–409. <https://doi.org/10.1006/jsvi.1994.1070>.

(5) Mourik, V.; Asaad, S.; Firdausy, H.; Pla, J. J.; Holmes, C.; Milburn, G. J.; McCallum, J. C.; Morello, A. Exploring Quantum Chaos with a Single Nuclear Spin. *Phys. Rev. E* **2018**, *98* (4), 042206.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.98.042206>.

FTMC.A.14. Transporte electrónico a través de uniones moleculares / Electron transport through molecular junctions

(Tutor: Linda Angela Zotti, linda.zotti@uam.es)

La imparable carrera de miniaturización de los dispositivos va mucho más allá de la reducción de escala. En la nanoescala, dicha miniaturización abre un inmenso abanico de nuevas posibilidades gracias a manifestaciones exóticas de varios procesos físicos. Un campo de suma importancia para las (Nano)-tecnologías emergentes es la electrónica molecular, donde los convencionales circuitos electrónicos son remplazados por contactos moleculares. En este trabajo de fin de grado, se estudiará el transporte electrónico a través de uniones metal-molécula-metal (principalmente por mecanismo de túnel). En particular se estudiará el papel de la geometría de anclaje y de los niveles energéticos de la molécula, para luego, en el futuro, abordar cómo poder emplear las moléculas en dispositivos electrónicos -- una cuestión de suma importancia tecnológica en la próxima década.

La parte TFG-EXP de este proyecto se realizaría dentro de la práctica de Simulación computacional de materiales a escala atómica y nanométrica del laboratorio del dpto. de Física Teórica de la Materia Condensada.

<http://webs.ftmc.uam.es/linda.zotti/>

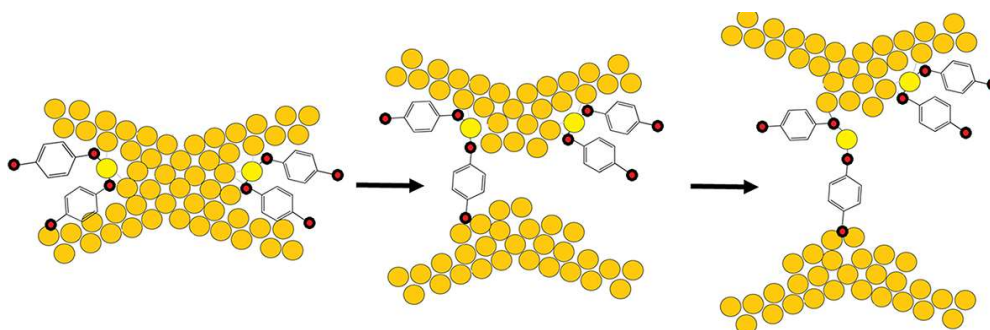


Figure 1: Ejemplo de formación de unión metal-molécula-metal

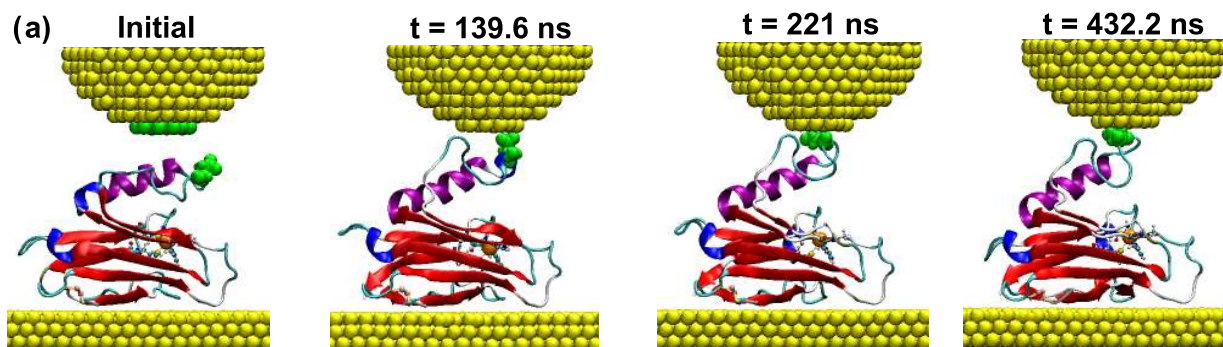


Figure 2: Evolución de una unión metal-proteína-metal

Referencias:

- [1] "The role of oligomeric gold-thiolate units in single-molecule junctions of thiol-anchored molecules", Edmund Leary, Linda A Zotti, Delia Miguel, Irene R Márquez, Lucía Palomino-Ruiz, Juan Manuel Cuerva, Gabino Rubio-Bollinger, M Teresa González, Nicolás Agrait, J. Phys. Chem. C 2018, 122, 6, 3211–3218
- [2] "Can one define the conductance of amino acids?", Linda A Zotti, Beatrice Bednarz, Juan Hurtado-Gallego, Damien Cabosart, Gabino Rubio-Bollinger, Nicolas Agrait, Herre SJ van der Zant, Biomolecules, 9,580 (2019).
- [3] "Revealing the role of anchoring groups in the electrical conduction through single-molecule junctions", Linda A Zotti, Thomas Kirchner, Juan-Carlos Cuevas, Fabian Pauly, Thomas Huhn, Elke Scheer, Artur Erbe, Small, 6,1529-1535 (2010)
- [4] "Can Electron Transport through a Blue-Copper Azurin Be Coherent? An Ab Initio Study", Carlos Romero-Muñiz, María Ortega, J.G Vilhena, Ismael Díez-Pérez, Rubén Pérez, Juan Carlos Cuevas, Linda A. Zotti, J. Phys. Chem. C 2021, 125, 3, 1693–1702

FTMC.A.15. Efecto CISS en sistemas helicoidales / CISS effect in helical systems

(Tutor: **Linda Angela Zotti**, linda.zotti@uam.es, **Juan José Palacios**,juanjose.palacios@uam.es)

El CISS (“Chirality induced Spin Selectivity”) es un efecto que ocurre en la nanoescala cuando una corriente de electrones fluye a través de un sistema quiral (que puede ser, por ejemplo, una hélice) y consiste en una polarización de espín: uno de los dos componentes de espín tiene más probabilidad de pasar de un extremo a otro. El origen de este efecto reside en el acoplamiento espín-órbita. Las potenciales aplicaciones del CISS son muchas, sobre todo en el campo de la espintrónica en lo que concierne al desarrollo de dispositivos. Además, ha sido observado en sistemas biológicos como por ejemplo el ADN.

En este trabajo de fin de grado el/la estudiante se familiarizará con conceptos claves del transporte electrónico en la nanoescala y de la teoría del funcional de la densidad. A continuación, simulará el transporte electrónico (por mecanismo de túnel) a través de una serie de uniones metal-hélice-metal basadas en moléculas de forma helicoidal de tamaños diferentes: este análisis permitirá investigar el efecto que cambios estructurales pueden tener sobre el efecto CISS.

La parte TFG-EXP de este proyecto se realizaría dentro de la práctica de Simulación computacional de materiales a escala atómica y nanométrica del laboratorio del dpto. de Física Teórica de la Materia Condensada.

<http://webs.ftmc.uam.es/linda.zotti/>



Figure 3: Ejemplo de unión metal-hélice-metal basado en una molécula orgánica.

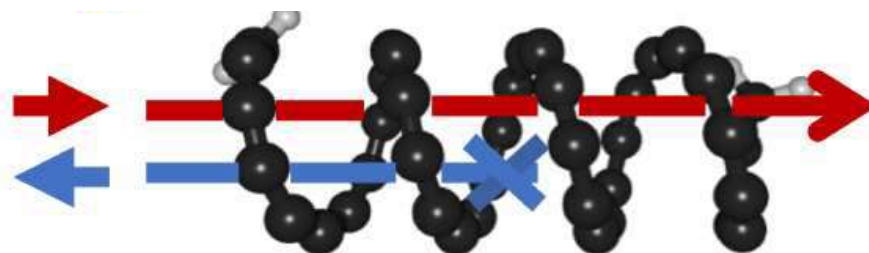


Figure 4: Polarización de espín en un sistema helicoidal.

Referencias:

- [1] Chirality-driven topological electronic structure of DNA-like materials, Liu et al., Nature Materials volume 20, pages 638–644 (2021)
- [2] Chiral-Induced Spin Selectivity Effect, R. Naaman and D. Waldeck, J. Phys. Chem. Lett. 2012, 3, 16, 2178–2187

FTMC.A.16. Fenómenos de difusión anómala en la membrana celular / Anomalous diffusion in cell membranes

(Tutor: Enrique Velasco, enrique.velasco@uam.es) ADMITE 2 ESTUDIANTES

El objetivo de esta propuesta de TFG es el estudio de los fenómenos de difusión anómala en la membrana celular. Consiste en dos partes. La primera, correspondiente al TFG-EXP, se realizará en el marco de la práctica de física de sistemas biológicos del Depto. de Física Teórica de la Materia Condensada, y consistiría en la aplicación de técnicas de simulación de modelos con distinto grado de complejidad de membranas biológicas para determinar los fenómenos de difusión anómala. En una segunda parte se desarrollaría un algoritmo de Machine Learning que permita clasificar trayectorias individuales de partículas y calcular su exponente de difusión anómala. De manera complementaria, se estudiarían los sistemas analizados en la parte experimental mediante el uso de un Continuous-Time Random-Walk (CTRW) y otras técnicas, comparándolas y estudiando su aplicabilidad.

FTMC.A.17. Óptica cuántica de moléculas en nanocavidades / Quantum optics in molecule-nanocavity systems.

(Tutor: Johannes Feist, johannes.feist@uam.es) **ADMITE 2 ESTUDIANTES**

La interacción de emisores cuánticos con el campo electromagnético es muy dependiente del entorno en el que dicho proceso tiene lugar, y se puede aumentar notablemente usando nanocavidades metálicas que concentran la luz significativamente y ofrecen gran libertad de diseño para optimizar sus propiedades ópticas. Hoy en día existe gran interés en usar tales sistemas para aplicaciones de óptica cuántica como la generación de luz con carácter no clásica. La descripción de estos fenómenos depende de una descripción cuántica de los modos electromagnéticos de la nanocavidad, un problema que se ha resuelto recientemente [1,2]. En el TFG, se va a explorar el método de cuantización y la interacción de moléculas orgánicas con los resultantes modos electromagnéticos de la nanocavidad. En particular, se va a estudiar la emisión de luz no clásica, por ejemplo de fotones sueltos, pares de fotones, o “squeezed light” con correlaciones cuánticas importantes [3].

La parte TFG-EXP de este proyecto se realizaría dentro de la práctica de Nanofotónica del laboratorio del dpto. de Física Teórica de la Materia Condensada.
Página web del grupo: www.mmuscles.eu.

- [1] I. Medina, F. J. García-Vidal, A. I. Fernández-Domínguez, and J. Feist, *Few-Mode Field Quantization of Arbitrary Electromagnetic Spectral Densities*, Phys. Rev. Lett. **126**, 093601 (2021).
- [2] M. Sánchez-Barquilla, F. J. García-Vidal, A. I. Fernández-Domínguez, and J. Feist, *Few-Mode Field Quantization for Multiple Emitters*, Nanophotonics, doi:10.1515/nanoph (2022).
- [3] R. Sáez-Blázquez, Á. Cuartero-González, J. Feist, F. J. García-Vidal, and A. I. Fernández-Domínguez, *Plexcitonic Quantum Light Emission from Nanoparticle-on-Mirror Cavities*, Nano Lett. **22**, 2365 (2022).

FTMC.A.18. Propagación de correlaciones en gases dipolares ultrafríos bidimensionales llevados afuera del equilibrio / Spreading of correlations in 2D ultracold dipolar gases driven out of equilibrium

(Tutor: Francesca Maria Marchetti, francesca.marchetti@uam.es, <http://webs.ftmc.uam.es/francesca.marchetti/>)

The unprecedented sophistication reached in the last two decades in the field of ultracold atoms has allowed the research to progress at an astonishingly speed. Nowadays, ultracold atoms are among the best candidates for realising quantum simulations of condensed matter systems, representing an ideal workshop where to investigate fundamental properties of matter in a controlled way. At the forefront of this research are ultracold Bose-Einstein condensates (BECs) of atoms or molecules with large dipole-dipole interactions. These originate either from the magnetic dipole moments of atoms such as chromium, dysprosium, and erbium, or from the electric dipole moments of heteronuclear polar molecules.

The long-range and anisotropic nature of dipolar interactions opens new perspectives at the many-body level. Recent exceptional outcomes in dipolar condensates include the observation of quantum droplets and rotons [1,2] (see left panel of Fig. 1), as well as the recently discovered supersolid states [3,4], a paradoxical phase of matter where both superfluidity and crystalline orders coexist.

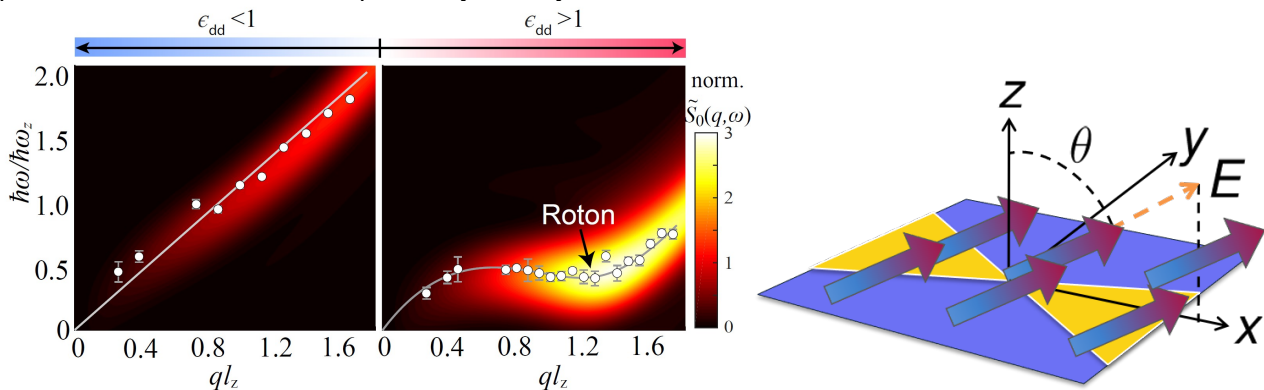


Figure 1: Left panel: Measurements of a roton minimum in the excitation spectrum of a stable Bose-Einstein condensate of dipolar erbium atoms [1,2], with the typical local minimum at a finite momentum. The roton minimum evolves by tuning the dipole-dipole atom interactions ϵ_{dd} . Right panel: Dipole atoms confined in two dimensions with a tilted dipole moment aligned by an external (either magnetic or electric) field E . For sufficiently large tilting angles, the anisotropic dipole-dipole interaction develops an attractive sliver (yellow) in the plane.

The proposed project concerns the study of quantum quenches in dipolar BECs confined in a quasi-two-dimensional geometry (see right panel of Fig. 1) driven out of equilibrium. Interaction quench dynamics provide information about the system low-energy properties, such as the nature of the collective quasi-particle excitations and the way in which correlations develop and propagate. The main objective of the project is the analysis of the nature of correlation spreading in dipolar systems which are confined in a two-dimensional geometry with tilted dipole moments. In this configuration the interaction is anisotropic and, for sufficiently large tilting angles develops an attractive sliver in the plane (see right panel of Fig. 1).

The TFG-EXP part of this project will be carried out within the “Strongly interacting matter-light systems” practicum lab of the Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada.

References

- [1] L. Chomaz *et al.*, *Nature Physics* **14**, 442 (2018).
- [2] D. Petter *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 183401 (2019).
- [3] L. Tanzi *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 130405 (2019).
- [4] L. Chomaz *et al.*, *Phys. Rev. X* **9**, 021012 (2019).
- [5] S. S. Natu, L. Campanello, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. A* **90**, 043617 (2014).
- [6] Z. Tian, S.-Y. Chă, and U. R. Fisher, *Phys. Rev. A* **97**, 063611 (2018).

FTMC.A.19. Polarones fermionic polaritonicos en semiconductores bidimensionales dopados / Fermi polaron polaritons in doped two-dimensional semiconductors

(Tutora: Francesca Maria Marchetti, francesca.marchetti@uam.es, <http://webs.ftmc.uam.es/francesca.marchetti/>)

Layered 2D materials such as transition metal dichalcogenides (TMDs) have recently emerged as tremendously promising active media displaying compatibility and easy integration in nanophotonic devices [1]. At their monolayer limit, they display remarkable optical properties and are ideal as active materials because of strong interactions with light, which can lead to the realization of mixed matter-light quasiparticles named polaritons. Further, these structures offer the unique possibility of mixing both optical and electrical control of carriers (see left panel of Fig. 1). In this configuration, there has been recently a significant interest in realizing and studying the so-called Fermi polaron regime. Here, it is possible to engineer new light-matter quasiparticles which are “many-body” in the sense that they involve the dressing of the surrounding electron gas. Specifically, one matter-light excitation, the polariton, can either attract or repel the gas of electrons, leading to a “dressed” polariton quasiparticle known as Fermi polaron polariton, as illustrated in the right panel of Fig. 1. Such polaron-polaritons quasi-particles have very recently been observed in a TMD monolayer embedded in a microcavity (see, e.g., [3,4]).

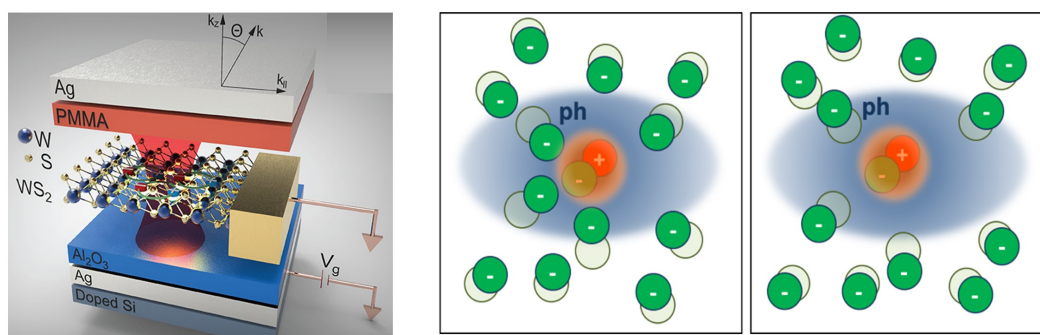


Figure 1. Left panel: The properties of optically generated excitons (electron-hole pairs) can be tuned in a TMD (WS_2) monolayer via electric field gating, which injects free carriers (e.g., electrons) in the monolayer. Further, embedding the structure in an optical cavity (Ag mirrors) allows to explore the matter-light strong coupling regime. Adapted from [2]. Right panel: in these systems, depending on the photon energy, a polariton (bound electron-hole-photon quasiparticle) can either attract or repel the surrounding electron gas, forming a strongly interacting Fermi polaron polariton quasiparticle.

The aim of this project is to explore the interaction properties of charge polariton systems as well as the analysis of their quantum correlations. Recent experiments [5] have demonstrated that dressing polaritons by a charged medium can substantially increase their interaction strength. The goal of this project is to analyze the interaction properties and to characterize quantum correlations of Fermi polaron polaritons in different regimes.

The TFG-EXP part of this project will be carried out within the “Strongly interacting matter-light systems” practicum lab of the Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada.

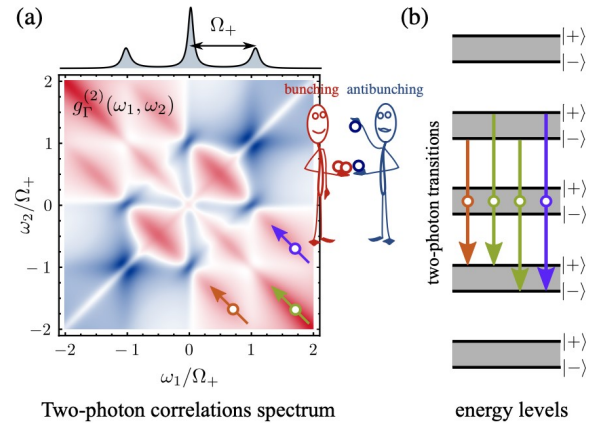
References

- [1] C. Schneider et al., [Nat. Commun. 9, 2695 \(2018\)](#).
- [2] B. Chakraborty et al., [NanoLett. 18, 6455 \(2018\)](#).
- [3] M. Sidler et al., [Nat. Phys. 13, 255 \(2016\)](#).
- [4] F. Rana et al., [Phys. Rev. Lett. 126, 127402 \(2021\)](#).
- [5] L. B. Tan et al, [Phys. Rev. X 10, 021011 \(2020\)](#).

FTMC.A.20. ¿Cómo emite fotones un sistema cuántico? / How does a quantum system emit its photons?

(Tutora: Elena del Valle, elena.delvalle@uam.es)

En este proyecto, estudiaremos de manera teórica (mediante resolución de la *ecuación maestra* y *simulaciones montecarlo*) la dinámica de emisión de sistemas cuánticos fundamentales, como pueda ser un qubit (representando una transición atómica o de un punto cuántico semiconductor). Como piezas claves, incluimos en la medida, la fuente de excitación y los detectores, ya que estos determinan enormemente el resultado: emisión de fotones de uno en uno, en grupos, *entangled*, *squeezed*, etc. [Laser Photonics Rev. 14, 6 (2020)]. Nos encontraremos con efectos cuánticos como la indistinguibilidad, la formación de estados virtuales, el colapso de la función de onda o el principio de incertidumbre de Heisenberg [arXiv:1802.04540].



En la **figura**, por ejemplo, se puede ver el mapa de emisión de dos fotones de un qubit excitado con un láser (a), según las posibles transiciones entre sus niveles cuánticos (b), dependiendo de la frecuencia de los dos fotones. El espectro de emisión es un simple triplete pero dependiendo de la frecuencia a la que se detecta la luz, se comporta como una fuente de fotones de uno en uno (*antibunching*, azul) o en grupos (*bunching*, rojo).

La parte TFG-EXP de este proyecto se realizaría dentro de la práctica de “Análisis de experimentos de interacción luz-materia en microcavidades” del laboratorio del dpto. de Física Teórica de la Materia Condensada. Parte del seguimiento del trabajo se realizará telemáticamente.

FTMC.A.21. Estructura molecular con control del estado de carga / Molecular structure with charge-state control

(Tutores: Rubén Pérez, ruben.perez@uam.es; Guilherme Vilhena, guilherme.vilhena@uam.es)

Molecules represent the ultimate nanoscale devices with possible applications including acceptor-donor complexes, molecular switches, molecular motors and nanocars. In order to design molecules that are fitted for these different tasks, we need to understand the relation between the charge state of the molecule and its properties, such as conformation and reactivity. Nowadays, the molecular charge states can be controlled by deliberately exchanging electrons between the tip of an Atomic Force Microscope (AFM) and the molecule deposited on an insulating substrate varying the bias voltage [1], as shown in Figure 1 for azobenzene, an archetypical molecular electronics building block and photomechanical actuator that can be switched between cis and trans isomers by light, tunneling electrons, and electric fields.

In this project, we plan to study the charge states of azobenzene and pentacene, a key molecule in optoelectronic applications, using an alternative scheme based on classical molecular dynamics simulations of the molecule/substrate system using Quantum-Mechanically-derived force fields (QMD-FF) that are able to accurately describe the structure and the energetics of the molecular distortions both in the fundamental and the excited states [2,3].

The TFG-EXP of this project will be carried out within the “Simulación computacional de materiales a escala atómica y nanométrica” practice in the Lab of the Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada.

[1] S. Fatayer, et al., Science 365, 142 (2019). 10.1126/science.aax5895

[2] R. Pawlak et al., Nature Comm. 10, 685 (2019).

[3] R. Pawlak et al., Nano Lett. 20, 652 (2020).

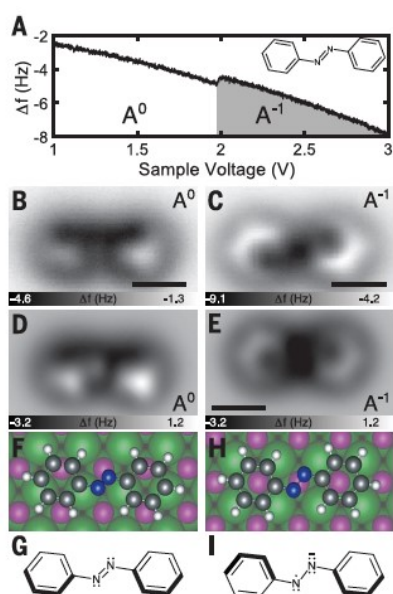


Figure 1: (A) Kelvin Probe Force Spectroscopy (KPFs), that records the frequency shift Δf as a function of sample voltage V , is used to manipulate and to identify the charge state of molecules. The inset shows the chemical structure of azobenzene. (B) Constant-height AFM image of A_0 (neutral state) at $V = 0.5$ V. (C) Constant height AFM image of A_{-1} (negatively charged state) at $V = 2.5$ V, tip-sample distance reduced by 0.3 Å with respect to (B). (D and E) Simulated AFM images of on-surface A_0 and A_{-1} , respectively. All scale bars correspond to 5 Å. (F and H) Top view of the atomic models of A_0 and A_{-1} adsorbed on a NaCl substrate, respectively. (G and I) Chemical structures of A_0 and A_{-1} , respectively, with wedged bonds representing out-of-plane conformations.

FTMC.A.22. Virus: Interacciones electrostáticas y adsorción en sustratos corrugados / Viruses: electrostatic interactions and adsorption onto corrugated substrates

(Tutores: Rubén Pérez, ruben.perez@uam.es; Horacio V. Guzman, horacio.guzman@uam.es)

Viruses are an extremely simple form of life that consists of a piece of nucleic acid inside an capsid, made purely of proteins, or, as in the common flu and COVID-19 viruses, of a combination of proteins and lipids. The infection mechanism of viruses involves the attachment of the capsid onto biological substrates, that are naturally corrugated at the nanometer scales. In the case of virus with purely protein capsids, the adsorption process brings into play rich electrostatic interactions and possibly structural changes of the capsid. It has been recently shown that these electrostatic interactions between the capsid proteins and the substrate are highly localized [1]. In this project, we want to explore the interplay between the charge distribution, the symmetry of the capsid, and the nanometer-scale properties of the substrate in the adsorption process. In particular, we want to determine if certain adsorption geometries may modify the structure of the virus capsid and, hence, influence the disassembly process and inhibit the virus activity. This is a highly relevant materials-design and also biological question, as substrates trapping viruses can be an efficient strategy to prevent virus propagation or infection.

In this project, the student will help develop a computational algorithm for calculating the binding energies capable of exploring the icosahedral symmetries of the virus capsid. Such endeavor would enable us to evaluate the preferential adsorption symmetry with a high-resolution method considering not only the amino acid but also the atomistic level of the virus capsid. While the corrugated substrate will be coarse-grained from available molecular dynamics simulations of 6 different membranes and 1 modeled self-assembled bilayer. We will then evaluate different polarizable substrates and quantify their adsorption energies. The theoretical methods used in this project involve the calculation of electrostatic interactions (Poisson-Boltzmann equation) and van der Waals forces with an implicit solvent, and basics of coarse-graining molecular dynamics. Prior experience in programming (C, C++ or Python) would be helpful.

The TFG-EXP of this project will be carried out within the “Simulación computacional de materiales a escala atómica y nanométrica” practice in the Lab of the Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada.

[1] C. D. Cooper, I. Addison-Smith, H. V. Guzman, *Nanoscale* (2022). <https://doi.org/10.1039/D2NR02526D>

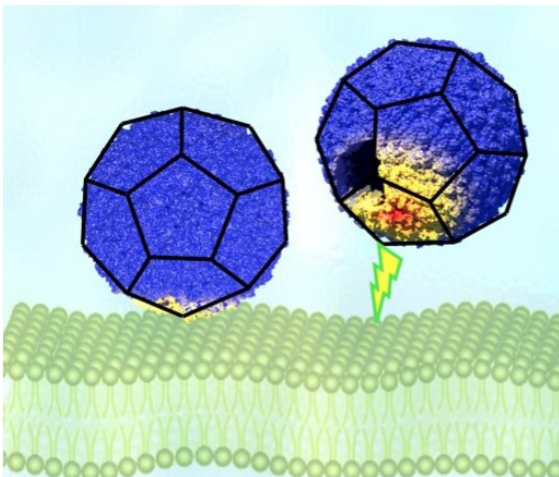


Figure 1: Computational model of an icosahedral virus being adsorbed on a corrugated substrate. The electrostatic interactions play a key role in the process.

FTMC.A.23. Microscopía túnel en moléculas con resolución en enlaces / Bond-resolved Scanning Tunneling Microscopy of Molecules

(Tutores: Rubén Pérez, ruben.perez@uam.es, Emiliano Ventura, emiliano.ventura@uam.es))

Scanning tunneling microscopy (STM), one of the key tools in Nanotechnology, allows us to image and manipulate matter at the atomic scale. STM with CO-functionalized tips, where a CO molecule has been attached to the apex of a metal tip (Fig.1), displays images with striking resolution for complex molecules adsorbed on substrates [1]. At large distances, these images can provide information on the wave functions associated to the frontier orbitals of the molecule [1]. At closer distances, the rich contrast observed, including the visualization of intramolecular bonds [2], results from the complex interplay of structural and electronic effects. Understanding the contrast in bond-resolved STM (BR-STM) is challenging as it requires to simulate both the tunneling process and the deflection of the CO molecule around the tip apex due to the interaction with the adsorbed molecule.

In this project, we plan to simulate the BR-STM images for different molecules adsorbed on substrates with different reactivity (from noble metals to a bilayer of NaCl that have been already experimentally measured). Our goal is to understand how different factors, including the tip-molecule distance, the molecule-substrate interaction and the CO attachment to the tip, determine the image contrast observed in the experiments. This knowledge will provide the basis for the definition of a protocol to extract relevant structural and electronic information from the BR-STM images. The work will be based on simulation codes already developed in our research group but some programming will be necessary in order to implement an improved description of the molecular relaxation and tunneling processes. Prior experience with Python would be useful.

The TFG-EXP of this project will be carried out within the “Simulación computacional de materiales a escala atómica y nanométrica” practice in the Lab of the Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada.

[1] L. Gross, et al., Phys. Rev. Lett. 107, 086101 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.086101

[2] R. Song et. Al., Surf. Rev. and Lett., 28, 2140007 (2021).

<https://www.worldscientific.com/doi/epdf/10.1142/S0218625X21400072>

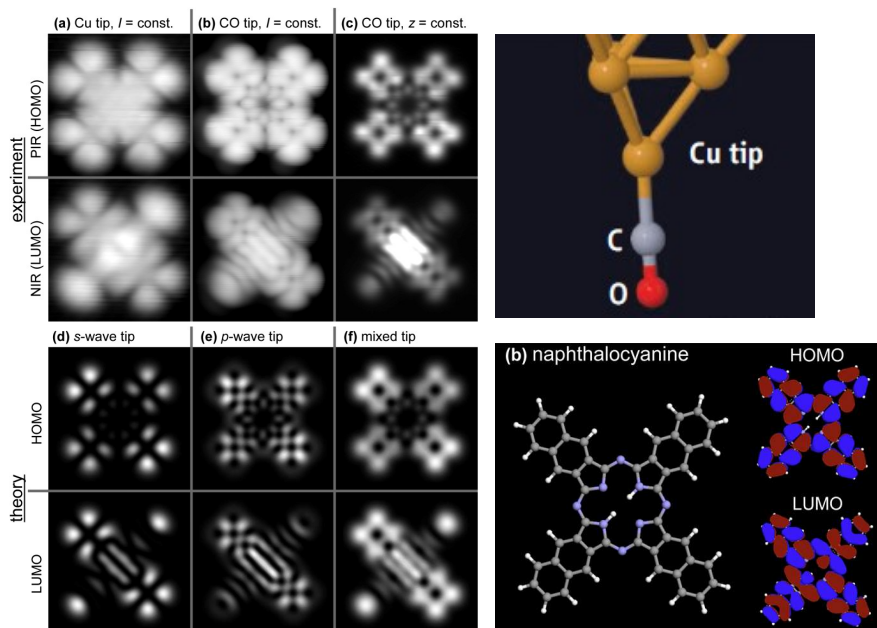


Figure 1: BR-STM images (top, left) measured on naphthalocyanine (bottom, right) adsorbed on a NaCl bilayer using a CO-functionalized tip (top, right). The spatial resolution is dramatically enhanced when comparing results for a pure metal tip (Cu tip) and a CO-functionalized tip (CO tip), where a CO molecule has been attached to the tip apex. Simulations for these images considering the contribution to the tunneling of different orbitals in the tip are also shown (bottom, left).

FTMC.A.24. Elasticidad del ADN a partir de dinámica molecular / Elasticity of DNA from Molecular Dynamics

(Tutores: Salvatore Assenza, salvatore.assenza@uam.es; Juan Luengo-Márquez, juan.luengo@uam.es)

El ADN es a menudo referido como la molécula de la vida, ya que su secuencia de nucleótidos (A,T,C,G) codifica los aminoácidos que componen cadenas proteicas con diversas funciones biológicas. A lo largo de los procesos de transcripción, replicación y traducción que experimenta la molécula de ADN, esta es compactada, torsionada y manipulada de diversas formas. El rol biológico de la doble hélice de ADN es por tanto indisoluble de sus propiedades elásticas [1], que además dependen de la secuencia de nucleótidos. Es por esto que a menudo se habla de la existencia de un *código mecánico*, como contraposición al bien conocido *código genético*.

En el presente proyecto se propone estudiar las propiedades elásticas del ADN a través de simulaciones de dinámica molecular, en las que las ecuaciones de movimiento de las partículas del sistema son integradas computacionalmente para obtener la trayectoria de la molécula durante un tiempo determinado. El análisis de las fluctuaciones de la cadena permite calcular las propiedades elásticas, que posteriormente se relacionarán con cambios producidos en su estructura a nivel molecular. De esta manera, este proyecto pretende profundizar en la compleja micromecánica del ADN [2], cuya correcta comprensión es crucial para explicar su función biológica.

La parte TFG-EXP de este proyecto se realizaría dentro de la práctica de física de sistemas biológicos del laboratorio del dpto. de Física Teórica de la Materia Condensada.

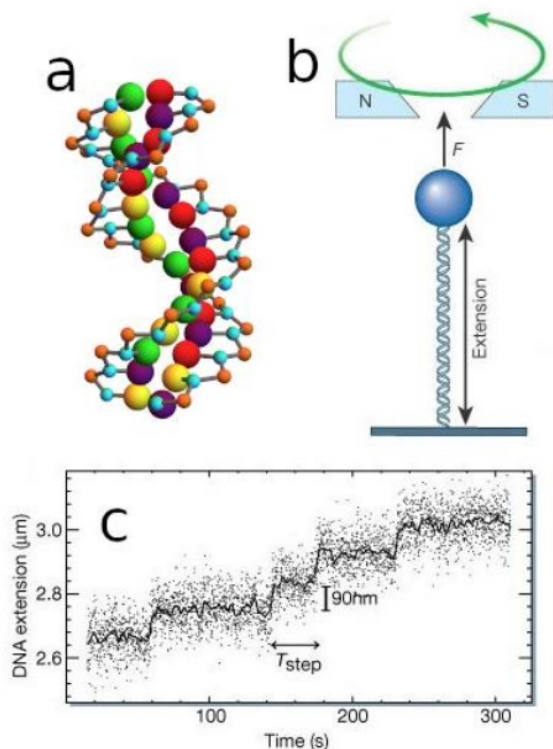


Figura 1: Representación esquemática de una molécula de ADN (a) y de un típico aparato experimental utilizado para medir sus propiedades elásticas (b). En el panel c se representa una gráfica de extensión medida variando la fuerza aplicada en el tiempo. Las imágenes b y c han sido adaptadas desde la Ref.3

[1] Rohs, Remo, et al., The role of DNA shape in protein-DNA recognition, *Nature* **461**: 1248–1253 (2009).

[2] Marin-Gonzalez, Alberto, et al., A molecular view of DNA flexibility, *Quart. Rev. Biophys.* **54**:e8, 1-20 (2021).

[3] Bustamante, Carlos, et al., Ten years of tension: single-molecule DNA mechanics, *Nature* **421**:423-427 (2003).

FTMC.A.25. Flexibilidad conformacional del ADN monocatenario / Single-stranded DNA conformational flexibility

(Tutores: Salvatore Assenza, salvatore.assenza@uam.es; Nerea Alcázar Cano, nerea.alcazar@uam.es)

El ADN monocatenario (ssDNA, del inglés *single-stranded DNA*) se caracteriza por ser sumamente flexible. Aunque su flexibilidad podría suponer un problema a la hora de realizar ciertos procesos celulares del ADN como son, por ejemplo, la replicación o la transcripción (donde la doble hélice de ADN se rompe en dos cadenas simples ssDNA), la alta flexibilidad se contrarresta con su capacidad para interactuar con una gran cantidad de proteínas que estabilizan al ssDNA durante dichos procesos, impidiendo así que forme estructuras tipo “lazo”. En disolución, por tanto, la estructura del ssDNA no está bien definida, ya que dada su gran flexibilidad sólo podemos aproximar su conformación a través de modelos estadísticos como el famoso modelo de gusano (*worm-like chain*), muy usado en el campo para estimar propiedades mecánicas de moléculas poliméricas [1].

En este proyecto se propone estudiar la flexibilidad conformacional del ssDNA mediante simulaciones de dinámica molecular usando un modelo de grano-grueso (*coarse-grained*) para ADN [2]. Se diseñará un experimento numérico (Fig. 1) basado en trabajos experimentales previos de FRET (*Fluorescence Resonance Energy Transfer*) [3], donde se estudió la flexibilidad conformacional del ssDNA dependiente de la molaridad de la disolución y de la longitud de las cadenas. De este modo, con este proyecto se pretende entender la dinámica de este tipo de moléculas, así como analizar sus propiedades mecánicas, tan importantes en los procesos biológicos.

La parte TFG-EXP de este proyecto se realizaría dentro de la práctica de física de sistemas biológicos del laboratorio del dpto. de Física Teórica de la Materia Condensada.

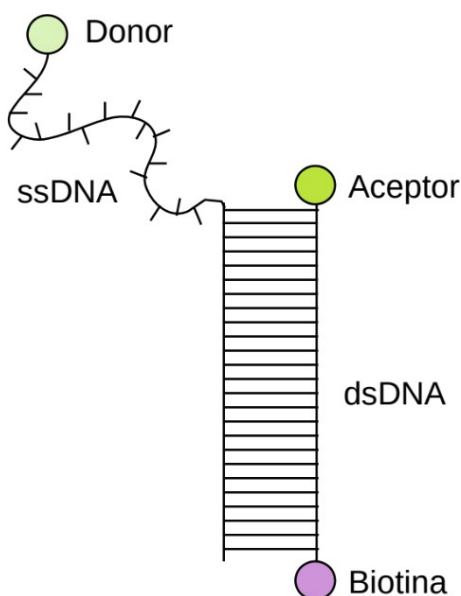


Figura 1: Representación esquemática del experimento de FRET [3] que se simulará en este proyecto.

[1] Bouchiat C., et al. Estimating the persistence length of a worm-like chain molecule from force–extension measurements. *Biophys. J.* **76**:409–413 (1999).

[2] Assenza, S. and Pérez, R., Accurate sequence-dependent coarse-grained model for conformational and elastic properties of double-stranded DNA. *J. Chem. Theory Comput.* **18**:3239–3256 (2022).

[3] Murphy, M.C., et al., Probing single-stranded DNA conformational flexibility using fluorescence spectroscopy. *Biophys. J.* **86**:2530–2537 (2004).