



## Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

**Tutor/a:** ARTURO MONCHO JORDÁ

**Departamento y Área de Conocimiento:** FÍSICA APLICADA / FÍSICA APLICADA

**Cotutor/a:** ANA BELÉN JÓDAR  
REYES

**Departamento y Área de Conocimiento:** FÍSICA APLICADA / FÍSICA APLICADA

**Título del Trabajo:** Liberación de moléculas encapsuladas dentro de microgeles mediante métodos basados en la teoría del funcional dinámico de densidad

**Tipología del Trabajo:**  
(Segun punto 3 de las Directrices del TFG aprobadas por Comisión Docente el 10/12/14)

(Marcar con X)

1. Revisión bibliográfica		4. Elaboración de nuevas prácticas de laboratorio	
2. Estudio de casos teórico-prácticos	X	5. Elaboración de un proyecto	
3. Trabajos experimentales		6. Trabajo relacionado con prácticas externas	

**Breve descripción del trabajo:** Los microgeles son partículas de tamaño mesoscópico formadas por cadenas de polímero entrelazadas, con una gran porosidad y permeabilidad interna. Además, pueden diseñarse para que su tamaño varíe con la temperatura o el pH del medio. Por ejemplo, los microgeles basados en cadenas de poli-isopropilacrilamida se expanden a temperaturas por debajo de los 34°C, y colapsan a temperaturas superiores. Estas partículas poseen un enorme interés en aplicaciones Biomédicas e Industriales por su capacidad de encapsular y liberar de forma controlada distintas sustancias, como pueden ser reactantes químicos, fármacos, proteínas u otras biomoléculas de tamaño pequeño. A pesar del gran abanico de datos experimentales, todavía no existen una comprensión clara de los mecanismos físicos implicados en los procesos de encapsulación y liberación de sustancias en microgeles. En este trabajo se propone el estudio de la cinética de liberación de sustancias previamente encapsuladas, con el fin de comprender cómo afectan las interacciones y el coeficiente de difusión en dicho proceso fuera del equilibrio.

**Objetivos planteados:** Estudiar la cinética de liberación en función de la carga del microgel, su grado de hinchado, y de las características de la sustancia (tamaño, carga, polaridad y su carácter hidrófobo). Comparar las predicciones teóricas con los datos experimentales existentes en la literatura.

**Metodología:** Para este estudio se empleará el formalismo teórico denominado “Teoría del funcional dinámico de densidad”. Este formalismo extiende la teoría del funcional de densidad clásica a situaciones fuera del equilibrio. Básicamente, se combina una ecuación de continuidad que proporciona la variación temporal de la concentración local de cierta sustancia con una segunda ecuación que relaciona las corrientes con el coeficiente de difusión local y todas las interacciones existentes entre la sustancia y el microgel. Este método representa una gran mejora a las teorías basadas en la ecuación de difusión ya que tiene en cuenta no solo la existencia de interacciones y los efectos de exclusión de volumen generados por el polímero del microgel y la propia sustancia, sino que también considera el hecho de que el coeficiente de difusión de dicha sustancia varía cuando está se encuentra fuera o dentro del microgel (dentro del microgel, el coeficiente de difusión se puede ver fuertemente reducido por efectos de la obstrucción causados por las cadenas de polímero).

Las ecuaciones se resolverán numéricamente usando un procedimiento iterativo, y los perfiles de densidad serán analizados e interpretados físicamente, y comparados con datos experimentales.

**Bibliografía:**



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA



Facultad de Ciencias  
Sección de Físicas

A. Moncho-Jordá, A. Germán-Bellod, S. Anfoletti-Uberti, I. Adroher-Benítez, and J. Dzubiella, “*Non-Equilibrium Uptake Kinetics of Molecular Cargo into Hollow Hydrogels Tuned by Electrosteric Interactions*”, ACS Nano **13** (2019) 1603.  
S. Anfoletti-Uberti, M. Ballauff and J Dzubiella, “*Dynamic density functional theory of protein adsorption on polymer-coated nanoparticles*”, Soft Matter **10** (2014) 7932

***A rellenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG***

*Alumno/a propuesto/a:*

MARÍA

INMACULADA

MARTÍN FONTÁN

Granada, 23 de junio 2020