



Universidad de Granada



Facultad de Ciencias
Sección de Físicas

Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a:	Alberto Martín Molina
Departamento y Área de Conocimiento:	Física Aplicada
Cotutor/a:	Arturo Moncho Jordá
Departamento y Área de Conocimiento:	Física Aplicada

Título del Trabajo:	Electrostática de macromoléculas en disoluciones iónicas
Tipología del Trabajo:	Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del grado, a partir de material ya disponible en los Centros.

Breve descripción del trabajo:

Desde el punto de vista de la Física Clásica, el campo eléctrico creado por un cuerpo cargado en reposo en el vacío puede ser descrito mediante la *Ley de Coulomb*. Si además, existen otros cuerpos cargados en el espacio, el campo total se calcula mediante el principio de superposición sumando la interacción a pares entre dos cuerpos. Por tanto, el campo eléctrico, así como el valor del potencial eléctrico en cada punto calculado mediante la ecuación de Poisson, permite predecir en primera instancia cómo los diferentes cuerpos cargados se estructuran en el espacio. La teoría electrostática clásica puede ser aplicada a sistemas microscópicos obteniendo resultados satisfactorios. En este sentido, la *electrostática de macromoléculas* trata de aplicar un modelo clásico, a sistemas como moléculas con una estructura compleja en la que se puede asumir ciertas consideraciones en su organización y aplicar los conceptos de la teoría electrostática clásica para describir sus interacciones. En concreto, han de asumirse consideraciones acerca de la estructura molecular, la distribución de carga y la respuesta del medio del sistema de interés. Estos aspectos hacen que, en general, el estudio se realice mediante el cálculo de promedios a través de la mecánica estadística. Con este fin, en las últimas décadas se han realizado multitud de modelos encaminados a describir la electrostática de macromoléculas según los sistemas a estudiar, prestando un gran interés en aquellos casos relacionados con biomacromoléculas con aplicaciones médicas y tecnológicas, como es el caso de las moléculas de ADN.

De acuerdo con lo anteriormente expuesto, en este trabajo se propone estudiar la electrostática de macromoléculas cargadas dispersas en disoluciones iónicas. Para ello se partirá del estudio de modelos clásicos basados en la resolución de la ecuación de Poisson-Boltzmann. Según el caso, esta ecuación diferencial podrá ser calculada de manera exacta o bien mediante cálculo numérico. A partir de estos modelos y de sus aproximaciones, se estudiará el límite de validez de la ecuación de Poisson-Boltzmann y se propondrán otros modelos alternativos que permitan una mejor descripción de los sistemas que nos ocupan.

Esta propuesta combina por tanto conocimientos adquiridos en las asignaturas de *Electromagnetismo*, *Física Estadística* y *Métodos Numéricos y Simulación*.

A rellenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG
Alumno/a propuesto/a:

Granada, 6 de Mayo de 2015

Campus Fuentenueva
Avda. Fuentenueva s/n
18071 Granada
Tjno. +34-615951701
fisicas@ngr.es

Comisión Docente de Físicas
Facultad de Ciencias

