



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

Titulo del Trabajo: Simulación Monte Carlo de fluidos complejos. Aplicación a nanogeles.

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:

La simulación Monte Carlo (MC) supone una alternativa muy valiosa a los modelos teóricos que describen el equilibrio de fluidos simples y complejos (coloides). Se trata de un método estadístico basado en la teoría de probabilidades que permite caracterizar un sistema compuesto por un número de partículas del orden del número de Avogadro, utilizando una cantidad de ellas bastante inferior. Mediante la simulación MC el sistema no evoluciona según las trayectorias reales que las partículas siguen con el tiempo sino que lo hace mediante trayectorias *ficticias* regidas por leyes estadísticas y que en promedio, también conducen a los valores de las variables macroscópicas que caracterizan el estado de equilibrio de dicho sistema.

En los últimos años, la simulación por ordenador ha contribuido notablemente tanto al desarrollo de nuevos materiales como a una mejor comprensión de los procesos en lo que éstos se ven involucrados. De hecho, en este trabajo se propone aplicar la simulación MC para entender de manera más precisa los mecanismos que dan lugar a los cambios de volumen que experimentan los nanogeles cuando cambian parámetros externos como la temperatura, pH, concentración de electrolito... Desde un punto de vista experimental, el reto en todas las estrategias de síntesis de nanogeles es la producción optimizada de los mismos de manera que sus propiedades coloidales y parámetros característicos de su sensibilidad a las condiciones del medio en el que están dispersos, sean modulables según las necesidades o tipo de aplicación biotecnológica en la que se utilicen. Con el objetivo de entender mejor las interacciones y los mecanismos que gobiernan el comportamiento de los nanogeles, se plantea también modelar y simular estos sistemas. En particular, se investigará la estructura y la doble capa eléctrica de los nanogeles de polielectrolito.

Así pues, esta propuesta combina conocimientos adquiridos en las asignaturas de *Métodos Numéricos y Simulación, Programación y Física Estadística*, cursadas durante la titulación.

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

Granada, 26 de Mayo de 2014

P.O.

JUAN LUIS ORTEGA VINUESA
Secretario del Departamento
de Física Aplicada



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

Comisión Docente de Físicas
Facultad de Ciencias