

Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a: Alberto Martín Molina
Departamento y Área de Conocimiento: Física Aplicada

Cotutor/a:
Departamento y Área de Conocimiento:

Título del Trabajo: Simulación Monte Carlo de nanogeles

Tipología del Trabajo: (Según 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
		3. Trabajos experimentales	6. Trabajo relacionado con prácticas externas

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.

Objetivos planteados:

En este trabajo se propone aplicar la simulación MC para modelar nanogeles, investigando su estructura y comportamiento en diferentes condiciones experimentales.

Metodología:

El estudio propuesto implica en primer lugar, familiarizarse con la técnica de simulación Monte Carlo. Una vez comprendida el fundamento de esta herramienta computacional, se procederá a la comprensión de diversos códigos de simulación (la mayoría en C). Finalmente, se adaptarán y aplicarán dichos códigos para estudiar diversas propiedades de los nanogeles tales como estructura interna y propiedades eléctricas, cuando interactúan con otras partículas.

Bibliografía:

- [1] *Interaction between Ideal Neutral Nanogels: A Monte Carlo Simulation Study.* S Ahualli, A Martín-Molina, JA Maroto-Centeno, M Quesada-Pérez. *Macromolecules* 50 (5), 2229-2238 (2017)
- [2] *Temperature-sensitive nanogels in the presence of salt: Explicit coarse-grained simulations.* M Quesada-Pérez, S Ahualli, A Martín-Molina *The Journal of chemical physics* 141 (12), 124903 (2014)
- [3] *Monte Carlo simulation of thermo-responsive charged nanogels in salt-free solutions.* M Quesada-Pérez, A Martín-Molina. *Soft Matter* 9, 7086-7094 (2013)

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

Alumno/a propuesto/a:

Granada, 09 de mayo 2018



Sello del Departamento