

## 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:** Electrostática de macromoléculas en disoluciones iónicas

**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             | X | 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:

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, prestando un gran interés en fenómenos contraintuitivos como es la inversión de carga, especialmente en casos relacionados con biomoléculas, como es el caso del ADN.

### Objetivos planteados:

De acuerdo con lo anteriormente expuesto, en este trabajo se propone estudiar la electrostática de macromoléculas cargadas dispersas en disoluciones iónicas.

### Metodología:

El estudio propuesto implica en primer lugar, realizar una revisión bibliográfica sobre el tema. Posteriormente, 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.

### Bibliografía:

- [1] Chandler D., Introduction to Modern Statistical Mechanics, Oxford University Press, Oxford (1987)
- [2] Ohshima, H., Furusawa, K., Electrical Phenomena at Interfaces: Fundamentals, Measurements and Applications, Marcel Dekker, Inc., Nueva York (1998)
- [3] Nägele G., Soft Matter: Complex Materials on Mesoscopic Scale, Schriften des Forschungszentrums Jülich Reihe (2002)

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

**Alumno/a propuesto/a:** David Méndez Blaque

Granada, 22 de mayo, 2019

Sello del Departamento