

## 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:** Estudio de la interacción y de los procesos de encapsulación y/o liberación moléculas en partículas poliméricas mesoporosas

**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:** Las partículas poliméricas mesoporosas están formadas por cadenas de polímero entrelazadas, con una gran porosidad y permeabilidad interna. En algunos casos, como por ejemplo los microgeles, pueden diseñarse para que su tamaño varíe con la temperatura o el pH del medio. 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 este tipo de partículas, ni de las interacciones molécula-partícula. En este trabajo se propone el estudio de la cinética de procesos de encapsulación y/o liberación de sustancias con el fin de comprender los mecanismos físicos implicados en estos procesos

**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 numéricas con predicciones teóricas e interpretar físicamente los resultados obtenidos.

**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 la propia partícula, sino que también considera el hecho de que el coeficiente de difusión de dicha sustancia varía cuando ésta se encuentra fuera o dentro de la nanopartícula (dentro de la nanopartícula, el coeficiente de difusión se puede ver fuertemente reducido por efectos de la obstrucción causados por las cadenas de polímero). Las ecuaciones se integran numéricamente, y los perfiles de densidad serán analizados e interpretados físicamente.

**Bibliografía:**

A. Moncho-Jordá, A.B. Jódar-Reyes, M. Kanduc, A. Germán-Bellod, J.M. López-Romero, R. Contreras-Cáceres, F. Sarabia, M- García-Castro, H.A. Pérez-Ramírez, and G. Odriozola, “*Scaling Laws in the Diffusive Release of Neutral Cargo from Hollow Hydrogel Nanoparticles: Paclitaxel-Loaded Poly(4-vinylpyridine)*“, ACS Nano **14** (2020) 1522.

A. Moncho-Jordá, A. Germán-Bellod, S. Anfiolletti-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. Angioletti-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:

Alicia Robles Pérez

Granada, 11 de mayo de 2021

Sello del Departamento