

Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a: Alessandro Patti
Departamento y Área de Conocimiento: Física Aplicada
Correo electrónico: apatti@ugr.es

Cotutor/a: Alberto Martín Molina
Departamento y Área de Conocimiento: Física Aplicada
Correo electrónico: almartin@ugr.es

Título del Trabajo: *Simulación molecular de la difusión de macromoléculas en suspensiones de nanocubos*

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	5. Elaboración de un proyecto	
3. Trabajos experimentales		6. Trabajo relacionado con prácticas externas	

Breve descripción del trabajo:

Los coloides son sistemas bifásicos donde partículas, gotas o burbujas se dispersan homogéneamente en un medio sólido, líquido o gaseoso. Los coloides formados por partículas sólidas dispersas en un líquido se conocen como “soles”. Para poder mantenerse en suspensión, el tamaño de estas partículas tiene que ser lo suficientemente pequeño (generalmente entre unos nanómetros y unas micras) para que las fuerzas debidas a efectos macroscópicos, como las gravitatorias, resulten despreciables con respecto a las fuerzas Brownianas. Éstas últimas tienen su origen en las colisiones aleatorias entre las moléculas del medio (agua, por ejemplo) y las partículas. Los coloides tienen un gran impacto tecnológico ya que son unos de los ingredientes necesarios para la formulación de productos de interés industrial, como barnices, recubrimientos, productos alimentarios y farmacéuticos. En este trabajo, se utilizarán técnicas de simulación estocástica [2-6] para investigar la difusión de macromoléculas de forma esférica en soles de nanocuboides que, a concentraciones suficientemente altas, pueden formar cristales líquidos. A partir de diagramas de fase conocidos [1], estudiaremos cómo la difusión de estas macromoléculas resulta ser afectada por la estructura de las fases formadas por los nanocuboides y la compararemos con el caso de lo que se observa en fases isotropas [7].

Objetivos planteados:

1. Adquirir familiaridad con la física de los coloides;
2. Aplicar las bases teóricas desarrolladas durante los estudios de grado a la investigación de suspensiones coloidales;
3. Desarrollar familiaridad con técnicas estocásticas de simulación (Monte Carlo y Monte Carlo Dinámico);
4. Consolidar o desarrollar habilidades de programación;
5. Analizar y comunicar los resultados de investigación de forma crítica por escrito y oralmente;

Metodología:

El estudio propuesto pretende utilizar conceptos de física estadística aplicados a técnicas de simulación estocástica. Se utilizarán simulaciones Monte Carlo para (i) comprobar la existencia de la fase esméctica utilizando los diagramas de fase ya disponibles y (ii) caracterizar la estructura de esta fase calculando parámetros de orden orientacionales y funciones de correlación espacial. Además, se utilizarán simulaciones de Monte Carlo Dinámico para el estudio de la dinámica de las macromoléculas y de los nanocuboides, calculando los coeficientes de difusión a partir de los desplazamientos cuadráticos

medios y otras propiedades que nos permitirán caracterizar la dinámica de estos sistemas. El código, en Fortran, y unos programas para el post-procesamiento de los resultados ya están disponibles en el grupo.

Bibliografía:

- [1] A. Cuetos, M. Dennison, A. Masters, A. Patti, *Phase behaviour of hard board-like particles*, *Soft Matter*, 13, 4720, **2017**
- [2] A. Patti and A. Cuetos, *Brownian dynamics and dynamic Monte Carlo simulations of isotropic and liquid crystal phases of anisotropic colloidal particles: A comparative study*, *Phys. Rev. E*, 86, 011403, **2012**
- [3] A. Cuetos and A. Patti, *Equivalence of Brownian dynamics and dynamic Monte Carlo simulations in multicomponent colloidal suspensions*, *Phys. Rev. E*, 92, 022302, **2015**
- [4] D. Corbett, A. Cuetos, M. Dennison, A. Patti, *Dynamic Monte Carlo algorithm for out-of-equilibrium processes in colloidal dispersions*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 20, 15118, **2018**
- [5] F. A. García Daza, A. Cuetos, A. Patti, *Dynamic Monte Carlo Simulations of Inhomogeneous Colloidal Suspensions*, *Phys. Rev. E.*, 102, 013302, **2020**
- [6] F. A. García Daza, A. Puertas, A. Cuetos, A. Patti, *Microrheology of colloidal suspensions via dynamic Monte Carlo simulations*, *J. Colloid Interface Sci.*, 605, 182, **2022**
- [7] L. Tonti, F. A. García Daza, A. Patti, *Diffusion of globular macromolecules in liquid crystals of colloidal cuboids*, *J. Mol. Liq.*, 338, 116640, **2021**

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

Alumno/a propuesto/a:

Granada, 18 de mayo 2022

Sello del Departamento