

Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor:	Arturo Moncho Jordá
Departamento y Área de Conocimiento:	Departamento de Física Aplicada. Área de conocimiento de Física Aplicada
Correo electrónico:	moncho@ugr.es
Cotutora:	Alessandro Patti
Departamento y Área de Conocimiento:	Departamento de Física Aplicada. Área de conocimiento de Física Aplicada.
Correo electrónico:	patti@ugr.es

Título del Trabajo:

Estudio de estructura y separación de fases de sistemas de nanopartículas blandas responsivas usando la teoría del funcional de la densidad

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:

Las nanopartículas blandas *responsivas* biestables son un tipo partículas de nanopartículas para las que su tamaño constituye un grado interno de libertad que puede variar y fluctuar entre dos estados cuando se somete a las partículas a la interacción con el resto de las partículas del sistema o a campos externos. Este tipo de sistemas constituye un modelo excelente para proteínas, polímeros neutros y cadenas de ADN o ARN, para las que su conformación puede fluctuar entre dos distintos estados: expandido y colapsado. En este trabajo se investigará la estructura, la distribución local de tamaños y la separación de fases en el equilibrio de este tipo de sistemas confinados para distintos campos externos, concentraciones de partículas, e interacciones entre partículas, empleando para ello una extensión de la teoría del funcional de densidad desarrollada recientemente para sistemas de nanopartículas responsivas interactuantes. En el caso de que las partículas interactúen atractivamente, se analizará la separación de fases del sistema.

Objetivos planteados:

El objetivo principal de esta propuesta de Trabajo Fin de Grado (TFG) es analizar las propiedades estructurales, estabilidad y distribución de tamaños de sistemas formados por nanopartículas blandas responsivas biestables en equilibrio empleando como herramienta la teoría del funcional de densidad. Para ello, se proponen los siguientes objetivos específicos:

1. Revisión bibliográfica sobre la distribución de tamaños de macromoléculas biestables como proteínas, polímeros neutros y cadenas de ADN y ARN.
2. Implementación de la teoría del funcional de la densidad para estudiar las propiedades de equilibrio arriba descritas, para distintas combinaciones de interacciones, concentración de partículas, y campos externos.
3. Análisis e interpretación física de los resultados

Desde el punto de vista de la adquisición de competencias, este TFG permitirá ampliar y poner en práctica las competencias adquiridas sobre Física Estadística y Termodinámica. Asimismo, se desarrollarán todas las competencias generales y específicas propias del desarrollo de un TFG.

Metodología:

Para la consecución de los objetivos planteados, seguiremos la siguiente metodología:

1. Se realizará una revisión bibliografía reciente sobre sistemas biestables responsivos.
2. Se implementará un código numérico en lenguaje C para obtener las propiedades de equilibrio de estos sistemas responsivos.
3. Se variarán las condiciones del sistema, aumentando la concentración de partículas y explorando diversos campos externos, analizando e interpretando físicamente los resultados.

Bibliografía:

1. A. Moncho–Jordá, N. Göth, J. Dzubiella, *Soft Matter* **19** (2023) 2832.
2. Y-C. Lin, B. Rotenberg, J. Dzubiella, *Phys. Rev. E* **102** (2020) 042602.
3. *Fundamentals of Inhomogeneous Fluids*, editor. D. Henderson. CRC Press (1992).

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

Alumno/a propuesto/a:

Mar Breir Hernández

Granada, 23 de abril de 2023

Sello del Departamento