

## Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

<b>Tutor:</b>	Arturo Moncho Jordá
<b>Departamento y Área de Conocimiento:</b>	Departamento de Física Aplicada. Área de conocimiento de Física Aplicada
<b>Correo electrónico:</b>	moncho@ugr.es
<b>Cotutora:</b>	
<b>Departamento y Área de Conocimiento:</b>	
<b>Correo electrónico:</b>	

<b>Título del Trabajo:</b>			
Estudio de la estructura e interacciones en coloides blandos activos fluctuantes fuera del equilibrio			
<b>Tipología del Trabajo:</b> (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 sistemas de materia activa han llamado la atención de la comunidad científica en el campo de la materia blanda en los últimos años debido a su complejo comportamiento. Están compuestos por partículas individuales, cada una de las cuales consume energía (fuel) para moverse, reaccionar o producir fuerzas mecánicas. Los ejemplos destacados de sistemas activos de materia blanda son aquellos formados por partículas autopropulsados, biopolímeros como proteínas o filamentos de actina dentro del citoesqueleto capaces de contraerse, bacterias, hidrogeles activos sintéticos y vesículas [11,12]. En este trabajo pretendemos investigar las propiedades físicas de un sistema activo: el formado por partículas que son capaces de fluctuar entre dos estados con distinta conformación espacial.

Existen muchos sistemas como proteínas, cadenas de polímero y biomoléculas que son capaces de fluctuar activamente entre dos estados (uno expandido de mayor tamaño y otro colapsado en menor tamaño) si se suministra energía al sistema. Las fluctuaciones activas entre ambos estados han demostrado tener un efecto bastante importante en la estructura, estabilidad y dinámica de este tipo de sistemas, especialmente en sistemas biológicos, que se encuentran además en condiciones de confinamiento. En este trabajo se pretende estudiar este tipo de sistemas fuera del equilibrio modelándolos como partículas coloidales blandas activas que fluctúan entre dos estados discretos de distinto tamaño, aplicando para ello herramientas físico-estadísticas basadas en la teoría del funcional dinámico de densidad, y extendiéndolo para incluir el efecto de las fluctuaciones activas entre ambos estados.

### Objetivos planteados:

El objetivo principal de esta propuesta de Trabajo Fin de Grado (TFG) es analizar las propiedades estructurales y las interacciones existentes en sistemas formados por partículas activas que pueden fluctuar entre dos posibles estados (estado expandido y estado colapsado), cuando éstas se encuentran confinadas por la acción potenciales de interacción externos. Para ello se empleará un método recientemente desarrollado para incorporar los efectos de las fluctuaciones entre los dos estados a los efectos de la difusión Browniana: la teoría del funcional dinámico de densidad reactiva (R-DDFT). Para ello, se proponen los siguientes objetivos específicos:

1. Revisión bibliográfica sobre el método de la teoría del funcional dinámico de densidad para describir sistemas difusivos fuera del equilibrio.
2. Implementación de la teoría del funcional de la densidad, incorporando el efecto de las fluctuaciones expandido-colapsado, mediante un código de cálculo numérico.
3. Aplicación del método para investigar el efecto del ritmo de fluctuación entre ambos estados sobre los perfiles de densidad en sistemas confinados y determinar las interacciones efectivas existentes.

Desde el punto de vista de la adquisición de competencias, este TFG permitirá ampliar y poner en práctica las competencias adquiridas sobre Física Estadística, Física Computacional y Física de Sistemas Complejos. 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 coloidales activos.
2. Se implementará un código numérico en lenguaje C para implementar el método R-DDFT.
3. Los resultados numéricos se analizarán para presentar los resultados y predicciones teóricas.

#### **Bibliografía:**

1. A. Moncho-Jordá and J. Dzubiella, “Controlling the microstructure and phase behavior of confined soft colloids by active interaction switching”, *Phys. Rev. Lett.* **125** (2020) 078001.
2. M. Bley, J. Dzubiella, and A. Moncho-Jordá, “Active binary switching of soft colloids: stability and structural properties”, *Soft Matter* **17** (2021) 7682-7696.
3. M. Bley, P.I. Hurtado, J. Dzubiella, and A. Moncho-Jordá, “Active interaction switching controls the heterogeneous dynamics of soft colloidal dispersions”, *Soft Matter* **18** (2022) 397-411.

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

*Alumno/a propuesto/a:*  
*Amina Cheghannou*  
*Mehamed*

Granada, 23 de abril de 2023

Sello del Departamento