

## Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

**Tutor/a:** Sándalo Roldán Vargas  
**Departamento y Área de Conocimiento:** Física Aplicada  
**Correo electrónico:** sandalo@ugr.es

**Cotutor/a:**  
**Departamento y Área de Conocimiento:**  
**Correo electrónico:**

**Título del Trabajo:** Estructura y Dinámica en Modelos de Sistemas de Partículas Activas

<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 procesos de difusión constituyen el principal mecanismo de transporte en sistemas de partículas de tamaño supramolecular inmersas en un medio líquido. En particular, en sistemas de partículas inanimadas (v.g. macromoléculas suspendidas en un líquido molecular), los procesos de difusión están condicionados por la temperatura del medio y el grado de empaquetamiento de las partículas. Estos procesos difusivos presentan, sin embargo, un nuevo parámetro de control en el caso de partículas animadas o activas. En ellos, la difusión está condicionada no sólo por la energía térmica y la concentración de partículas sino también por una energía de origen no térmico, que las partículas absorben y usan para conducir su movimiento con cierta persistencia en el tiempo. Algunos ejemplos biológicos notorios de esta difusión activa se manifiestan en el transporte de diferentes organelos dentro del citoplasma de las células animales, en la dinámica de colonias bacterianas, en los movimientos cooperativos que se dan en ciertas bandadas de pájaros y bancos de peces, en el transporte de células epiteliales o en los mecanismos de formación de tejidos.

### Objetivos planteados:

Pese a las profundas implicaciones, no está claro el modo en que la presencia de energía no térmica condiciona los procesos de transporte y auto-organización en sistemas de partículas activas. Este trabajo de fin de grado propone un estudio computacional cuyo objetivo general es estudiar la dinámica y estructura de sistemas de partículas activas, usando para ello simulaciones de dinámica molecular que tienen ya incorporado un ruido activo (no térmico). En particular, se estudiará el efecto que tiene la persistencia en el tiempo del ruido activo sobre la dinámica y estructura en estos sistemas.

### Metodología:

En una primera fase, el/la alumno/a se familiarizará con el uso de técnicas de simulación computacional basadas en dinámica molecular. En una segunda fase, el/la alumno/a llevará a cabo una caracterización de la dinámica y estructura emergentes en modelos computacionales de partículas activas. En una última fase, el/la alumno/a analizará las diferencias más relevantes entre estos sistemas activos y los sistemas clásicos en los que el transporte está condicionado por la temperatura del medio.

**Bibliografía:**

- [1] S. Ramaswamy, Annu. Rev. Cond. Mat. Phys. **1**, 323 (2010)
- [2] M. C. Marchetti *et al.*, Rev. Mod. Phys, **85**, 1143 (2013)
- [3] R. Mandal *et al.*, Soft Matter **12**, 6268 (2016)
- [4] L. Berthier *et al.*, New J. Phys. **19**, 125006 (2017)
- [5] B. R. Parry *et al.*, Cell **156**, 183 (2014)
- [6] C. Maggi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **113**, 238303 (2014)

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

Alumno/a propuesto/a:

Granada, 17 de mayo 2022

Sello del Departamento