



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Electrocinética de partículas recubiertas de polielectrolito

Descripción general (resumen y metodología):

Breve descripción del trabajo:

Las interfases sólido/líquido juegan un papel primordial en un gran número de aplicaciones, principalmente relacionadas con la existencia de una densidad de carga eléctrica móvil, tanto más relevante cuanto mayor sea el área interfacial, lo que ocurre con partículas nanométricas. La electrocinética engloba a un conjunto de técnicas que permite caracterizar eléctricamente esas interfases a través del movimiento relativo entre ellas y la disolución. En especial, la movilidad electroforética, se basa en la aplicación de un campo eléctrico alterno a suspensiones de partículas en contacto con medios que contienen iones móviles [1,2].

En este proyecto se pretende un estudio teórico y experimental del efecto del campo eléctrico sobre suspensiones complejas como el de partículas recubiertas con una capa de polielectrolito. Este sistema es frecuentemente usado en sistemas biológicos porque el polielectrolito actúa como una capa protectora y convierten a las nanopartículas en biocompatibles o son soportes para el transporte de fármacos, por ejemplo. O incluso, están presentes de forma natural en sistemas biológicos (biopelículas bacterianas adheridas a las superficies [3] o células de *C. vulgaris*, una microalga con marcada heterogeneidad de su superficie [4]). En estos casos, la caracterización electrocinética abre nuevas perspectivas para identificar o diseñar macromoléculas superficiales activas no biocidas para controlar la formación de biopelículas en entornos médicos e industriales. Se pretende extender un modelo previamente elaborado por nuestro grupo [5] a estos sistemas más complejos, donde la cubierta polimérica no es homogénea o, incluso ocupa un volumen tan grande de la nanopartícula, que se puede considerar que toda ella está compuesta de polímero.

Metodología:

1. Revisión bibliográfica del tema
2. Elaboración de un modelo para la partícula recubierta de polielectrolito
3. Formulación de las ecuaciones que gobiernan el problema: movimiento de las propias partículas suspendidas, del líquido en las que están inmersas y de los iones de la interfase, sometidos a interacciones electrostáticas, eléctricas y convectivas por arrastre del fluido soporte.
4. Solución del sistema de ecuaciones diferenciales acopladas usando cálculo numérico a partir de resultados previos.
5. Estudios de casos límites: capa deformable no uniforme y partícula formada totalmente por polielectrolitos
6. Medición de la movilidad electroforética de diferentes tipos de partículas recubiertas
7. Análisis e interpretación de los resultados. Acuerdo con las predicciones teóricas.

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

Objetivos planteados:

1. Adaptar el modelo de partículas con recubrimiento de polielectrolito en disolución a sistemas más complejos y predecir la velocidad de estos sistemas bajo la aplicación de un campo eléctrica usando cálculo numérico.
2. Estudiar casos límites dentro del modelado de recubrimientos poliméricos complejos: partícula totalmente formada por polielectrolito o recubrimiento poliméricos con una distribución espacial no homogénea.
3. Comparación de las predicciones teóricas con resultados experimentales de movilidad electroforética para estos sistemas.

Bibliografía básica:

- [1] A.V. Delgado, F. González-Caballero, R.J. Hunter, L.K. Koopal, J. Lyklema, "Measurement and interpretation of electrokinetic phenomena" *Journal of Colloid and Interface Science*, 309-2, 194-224 (2007).
- [2] S. Ahualli, A.V. Delgado, S.J. Miklavcic, L.R. White, "Use of a cell model for the evaluation of the dynamic mobility of spherical silica suspensions", *J Colloid Interface Sci.*, 309(2): 342-9 (2007)
- [3] J. Bernal-Bayard y cols., "Bacterial capsular polysaccharides with antibiofilm activity share common biophysical and electrokinetic properties", *Nature Communications* 14, 2553 (2023).
- [4] N. Lesniewska y cols., "Physicochemical surface properties of *Chlorella vulgaris*: a multiscale assessment, from electrokinetic and proton uptake descriptors to intermolecular adhesion forces", *Nanoscale*, 16, 5149 (2024)
- [5] S. Ahualli y cols., "AC electrokinetics of concentrated suspensions of soft particles", *Langmuir* 25(4) 1986-1997 (2009).

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: SILVIA ALEJANDRA AHUALLI YAPUR

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA APLICADA

Correo electrónico: sahualli@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos: JUAN CALVO YAGÜE

Ámbito de conocimiento/Departamento: MATEMÁTICA APLICADA

Correo electrónico: juancalvo@ugr.es

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos: AINARA GONZALEZ URCOLA

Correo electrónico: ainaurc@correo.ugr.es