



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Liberación de moléculas encapsuladas en microgeles expandidos empleando la teoría del funcional de densidad dinámico

Descripción general (resumen y metodología):

El transporte eficiente de moléculas a través de redes poliméricas es fundamental en numerosas aplicaciones, entre las que se encuentran la liberación controlada de fármacos, biosensores, catálisis, y procesos de nanofiltración, purificación y desalinización de agua. Dentro de estas matrices poliméricas, las moléculas difunden debido al gradiente de concentración y escapan al medio acuoso exterior siguiendo un proceso puramente difusivo. Sin embargo, la presencia de la red polimérica causa una disminución sustancial del coeficiente de difusión de las moléculas. Además, la interacción existente entre la molécula y el polímero de la red produce generalmente un pozo atractivo de energía libre que las moléculas tienen que superar para escapar a la disolución. Ambos factores determinan la cinética de liberación, que es un parámetro determinante en todas las aplicaciones antes mencionadas.

En este trabajo se estudiará el proceso fuera del equilibrio asociado a la cinética de liberación de moléculas para un sistema particular de redes poliméricas: los microgeles. Estas nanopartículas tienen la habilidad de expandirse o colapsarse en respuesta a estímulos externos como el pH o la temperatura. En concreto, analizaremos el ritmo de liberación de moléculas inicialmente encapsuladas en un microgel en estado expandido, empleando para ello la teoría del funcional de la densidad dinámico (DDFT), analizando el efecto de los parámetros más relevantes: el tamaño del microgel (R), la energía libre de interacción microgel-molécula (DG), y el coeficiente de difusión (D).

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

Objetivos planteados:

- (1) Realizar una revisión bibliográfica de artículos científicos relacionados con el transporte e interacción de moléculas en redes poliméricas.
- (2) Entender el formalismo DDFT necesario para estudiar el proceso de difusión.
- (3) Programar un código (C++, Python, etc) para resolver numéricamente el proceso de liberación.
- (4) Obtener la variación temporal de los perfiles de densidad de moléculas encapsuladas dentro de un microgel esférico, y calcular la fracción de moléculas liberadas en función de tiempo.
- (5) Estudiar cómo se comporta el tiempo medio de liberación, $t_{1/2}$ en función de R , DG y D , interpretando físicamente los resultados.
- (6) Diseñar una ecuación analítica que permita deducir la dependencia general de $t_{1/2}$ con R , DG y D .

Bibliografía básica:

- [1] Adri Escañuela-Copado, J. López-Molina, M. Kanduc, A.B. Jódar-Reyes, M. Tirado-Miranda, D. Bastos-González, J.M. Peula-García, I. Adroher-Benítez, and A. Moncho Jordá, Diffusion and Interaction Effects On Molecular Release Kinetics from Collapsed Microgels, ACS Appl. Polym. Mater. **6** (2024) 8905-8917.
- A. [2] Moncho-Jordá, A.B. Jódar-Reyes, M. Kanduc, A. Germán-Bellod, J.M. López-Romero, R. Contreras-Cáceres, F. Sarabia, M- García-Castro, H.A. Pérez-Ramírez, and G. Odriozola, Scaling Laws in the Diffusive Release of Neutral Cargo from Hollow Hydrogel Nanoparticles: Paclitaxel-Loaded Poly(4-vinylpyridine), ACS Nano **14** (2020) 15227-15240.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Haber aprobado las asignaturas Física Estadística y Métodos Numéricos y Simulación

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: ARTURO MONCHO JORDÁ

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA APLICADA

Correo electrónico: moncho@ugr.es

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

Nombre y apellidos: Irene Adroher Benítez

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA APLICADA

Correo electrónico: iadroher@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:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos: Óscar Benítez Luque

Correo electrónico: oscarbenitez@correo.ugr.es