



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Simulaciones Monte Carlo de suspensiones de microgeles

Descripción general (resumen y metodología):

Las suspensiones de coloides responsivos son sistemas clave en la materia blanda por su capacidad de adaptarse a cambios en el entorno. Esta adaptabilidad se debe a que las partículas presentan grados de libertad internos —como tamaño, forma, conformación, orientación, carga o momento dipolar— que pueden modificarse en respuesta a estímulos externos o interacciones con otras partículas. Un ejemplo destacado de estos sistemas son los microgeles: redes poliméricas entrecruzadas que responden activamente a variaciones del medio [1]. En ellos, el tamaño (radio hidrodinámico) es el grado de libertad más relevante, y puede cambiar significativamente ante modificaciones de temperatura, pH, concentración o suavidad, afectando directamente la estructura y dinámica de la suspensión. Estas transiciones de tamaño son fundamentales en aplicaciones como la liberación controlada de fármacos o la catálisis selectiva. El objetivo de este Trabajo Fin de Grado es caracterizar el comportamiento fásico de estas suspensiones a altas concentraciones e investigar la eventual formación de estructuras ordenadas. Para ello, el estudiante llevará a cabo simulaciones Monte Carlo (MC), analizando el comportamiento fásico de nanopartículas esféricas monodispersas en tamaño a distintas temperaturas y presiones. Posteriormente, se estudiará el efecto de la polidispersidad. El objetivo central será determinar la posible formación de estructuras cristalinas y caracterizarlas. Las simulaciones se realizarán en el clúster Proteus (Instituto Carlos I de Física Teórica) y en el clúster Albaicín/Alhambra (UGR). Los códigos necesarios para las simulaciones MC y DMC, así como herramientas de análisis de propiedades, están disponibles dentro del grupo de investigación.

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

Objetivos planteados:

1. Adquirir familiaridad con la física de la materia condensada blanda;
2. Aplicar las bases teóricas desarrolladas durante los estudios de grado a la investigación de fluidos complejos;
3. Desarrollar familiaridad con técnicas de simulación molecular (Monte Carlo) y post-processing;
4. Consolidar o desarrollar habilidades de programación;
5. Analizar y comunicar los resultados de investigación de forma crítica por escrito y oralmente;

Bibliografía básica:

[1] A. Moncho-Jordá, N. Göth, J. Dzubiella, *Soft Matter*, 19, 2832, 2023.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Se recomienda repasar la teoría de colectividades introducida en el curso de Física Estadística y familiarizarse con los conceptos básicos asociados a los métodos Monte Carlo.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: ALESSANDRO PATTI

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA APLICADA

Correo electrónico: apatti@ugr.es

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

Nombre y apellidos: ARTURO MONCHO JORDÁ

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA APLICADA

Correo electrónico: moncho@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: JAVIER SALGUERO PERALTA

Correo electrónico: javiersp11@correo.ugr.es