



## 1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

**Título:** Estudio de la estructura e interacciones en coloides blandos activos fluctuantes fuera del equilibrio

**Descripción general (resumen y metodología):**

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. 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.

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.

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

**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.

**Bibliografía básica:**

- [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.

**Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:**

**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:** Amina Cheghannou Mehamed

**Correo electrónico:** aminachme@correo.ugr.es