



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Dinámica 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 la dinámica de respuesta a cambios de temperatura de suspensiones densas de microgeles e investigar los tiempos de respuesta asociados al cambio de tamaño. Para ello, el estudiante utilizará un modelo recientemente desarrollado en el grupo [2] y llevará a cabo simulaciones de Dinámica Monte Carlo (DMC) [3], analizando el comportamiento dinámico de nanopartículas esféricas a distintas temperaturas y concentraciones. Posteriormente, se estudiará el efecto de la polidispersidad y, en el caso que el tiempo a disposición lo permita, se iniciarán estudios de microreología pasiva [4]. 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**.
- [2] A. Moncho-Jordá, A. Patti, *Macromolecules*, 58, 10659, **2025**
- [3] A. Patti and A. Cuetos, *Physical Review E*, 86, 011403, **2012**
- [4] F. García Daza, A. M. Puertas, A. Cuetos, A. Patti, *Journal of Molecular Liquids*, 365, 120146, **2022**

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:

Correo electrónico: