

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Química Física		
TÍTULO:	Estudio del efecto de las proteínas anticongelantes mediante la cinética de la nucleación del hielo.		
TITLE:	Understanding the effect of antifreeze proteins with the kinetics of ice nucleation.		
SUPERVISOR/ES:	Eduardo Sanz, Valentino Bianco		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG:	Experimental <input type="checkbox"/>	Bibliográfico <input checked="" type="checkbox"/>	Simulación <input checked="" type="checkbox"/>
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa <input type="checkbox"/>	Selección por expediente <input checked="" type="checkbox"/>	

OBJETIVOS:

Entender el efecto de las proteínas anticongelantes [1-2] (que impiden el crecimiento del hielo) usando información sobre la nucleación homogénea del hielo [3-4]. Entender el mecanismo de funcionamiento de las proteínas anticongelantes es muy útil, pues éstas juegan un papel fundamental en evitar la congelación de tejidos, como en el caso de animales que sobreviven a muy bajas temperaturas (insectos, peces, etc.), en la preservación de comida a bajas temperaturas o de tejidos para transplantes [1].

METODOLOGÍA:

Se hará un estudio y recopilación bibliográfica del problema. Se reanalizarán datos previamente obtenidos de la nucleación homogénea de hielo [3-4] para obtener información sobre el efecto de proteínas anticongelantes. Estas estimaciones teóricas se podrán comprobar y complementar con simulaciones moleculares de dinámica molecular utilizando paquetes que se emplean a nivel internacional (eg. GROMACS o LAMMPS).

BIBLIOGRAFÍA:

- [1] Ice-Binding Proteins and Their Function, Maya Bar Dolev, Ido Braslavsky, and Peter L. Davies, *Annu. Rev. Biochem.* 85, 1-28 (2016).
- [2] What Controls the Limit of Supercooling and Superheating of Pinned Ice Surfaces? Pavithra M. Naullage, Yuqing Qiu, and Valeria Molinero, *J. Phys. Chem. Lett.* 9, 1712–1720 (2018).
- [3] Homogeneous Ice Nucleation at Moderate Supercooling from Molecular Simulation, E. Sanz and C. Vega and J. R. Espinosa and R. Caballero-Bernal and J.L.F. Abascal and C. Valeriani, *J. Am. Chem. Soc.* 135 15008 (2013).
- [4] Interfacial Free Energy as the Key to the Pressure-Induced Deceleration of Ice

Nucleation, J.R.Espinosa,A. Zaragoza,P. Rosales-Pelaez,C. Navarro,C. Valeriani,C. Vega and E. Sanz, Phys. Rev. Lett. **117** 135702 (2016).



Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Química Física		
TÍTULO:	Dinámica de coloides activo para transporte de polímeros		
TITLE:	Dynamics of active colloids for polymer transport		
SUPERVISOR/ES:	Eduardo Sanz García / Valentino Bianco		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG:	Experimental <input type="checkbox"/>	Bibliográfico <input type="checkbox"/>	Simulación <input checked="" type="checkbox"/>
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa <input type="checkbox"/>	Selección por expediente <input checked="" type="checkbox"/>	

OBJETIVOS:

Se llevará a cabo un estudio de simulación con ordenador, utilizando distintas metodologías, de la dinámica de transporte y de agregación de cadenas de polímeros usando partículas coloidales como transportadores.

METODOLOGÍA:

Dinámica molecular y métodos de Monte Carlo aplicados al problema reseñado en el título del proyecto. Incluirá también la búsqueda de bibliografía que vaya siendo relevante para el problema, aunque será una parte menor del mismo.

BIBLIOGRAFÍA:

Daan Frenkel y Berend Smit, Understanding Molecular Simulation: from algorithms to applications, Elsevier, 2001

Jacob Israelachvili, Intermolecular and Surface Forces, Academic Press, 2011

Leslie H. Sperling, Introduction to Physical Polymer Science, John Wiley & Sons, 2005