

CARRERA DEL INVESTIGADOR CIENTÍFICO Y TECNOLÓGICO

Informe Científico¹

PERIODO ²: 2011-2012

Legajo N°: 286798

1. DATOS PERSONALES

APELLIDO: ZARRAGOICOECHEA

NOMBRES: GUILLERMO JORGE

Dirección Particular: Calle: N°:

Localidad: Manuel B. Gonet CP: B1897GUF Tel:

Dirección electrónica (donde desea recibir información): vasco@iflysib.unlp.edu.ar

2. TEMA DE INVESTIGACION

Sistemas confinados: nanopartículas y ecosistemas áridos y semiáridos.

3. DATOS RELATIVOS A INGRESO Y PROMOCIONES EN LA CARRERA

INGRESO: Categoría: Asistente Fecha: julio de 1984

ACTUAL: Categoría: Independiente desde fecha: agosto de 2004

4. INSTITUCION DONDE DESARROLLA LA TAREA

Universidad y/o Centro: Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos

Facultad: Facultad de Ciencias Exactas, UNLP

Departamento: Departamento de Química

Cátedra:

Otros:

Dirección: Calle: 59 N°: 789

Localidad: La Plata CP: B1900BTE Tel: 0221 425-4904

Cargo que ocupa: Investigador – Miembro de la Comisión Directiva

5. DIRECTOR DE TRABAJOS. (En el caso que corresponda)

Apellido y Nombres:

Dirección Particular: Calle: N°:

Localidad: CP: Tel:

Dirección electrónica:

.....
Firma del Director (si corresponde)

.....
Firma del Investigador

¹ Art. 11; Inc. "e"; Ley 9688 (Carrera del Investigador Científico y Tecnológico).

² El informe deberá referenciar a años calendarios completos. Ej.: en el año 2008 deberá informar sobre la actividad del período 1°-01-2006 al 31-12-2007, para las presentaciones bianuales.

6. EXPOSICION SINTETICA DE LA LABOR DESARROLLADA EN EL PERIODO.

-En el estudio de nanopartículas se propuso un modelo formado por dipolos eléctricos confinados sobre la superficie de una esfera de Hamaker. Este modelo se estudió usando simulación numérica de Monte Carlo. En este modelo de confinamiento esférico el comportamiento estructural del sistema es muy variado. Se observó que las nanopartículas se unen formando una corona de dipolos entre ellas. Experimentos recientes sobre nanopartículas de oro muestran el mismo comportamiento estructural, y la adhesión de las nanopartículas podría ser explicada por esa corona de dipolos.

La dificultad en este caso fue en tiempo de cálculo, pero de todos modos pudieron realizarse con una PC con un procesador Quad Core.

-En el estudio de nanotubos, se utilizó un modelo de Ising sobre un nanotubo formado por sucesivas capas de red tipo panal de abeja. Se estudia el efecto de campos magnéticos superficiales y volumétricos sobre las fases y el comportamiento crítico del sistema.

-Con el modelo de interacción atractivo (corto alcance)/repulsivo (largo alcance) se continuó estudiando el comportamiento de ecosistemas áridos y semiáridos. Maximizando la entropía de Shannon para la distribución de individuos en el ecosistema, se puede realizar una analogía con la termodinámica, con lo cual podemos utilizar la mecánica estadística y la simulación Monte Carlo. Estos ecosistemas presentan patrones de distribución (laberintos, franjas, matorrales regulares, etc.) por el agregado de individuos en su colaboración y competencia por los pocos recursos disponibles. Los resultados obtenidos con nuestro modelo son excelentes. Además se propone que, utilizando el coeficiente de variación del tamaño medio de cluster, se puede predecir el umbral de desertificación. Este coeficiente podría medirse experimentalmente. Este estudio puede ser de interés para la provincia, pues se podrían estudiar las alertas tempranas de desertificación del ecosistema y tratar de prevenirla.

-En el caso de cavitación en árboles, se estudiaron las curvas de vulnerabilidad en relación con las propiedades intrínsecas del sistema xilemático de los árboles. El modelo matemático relaciona la conductividad hidráulica, la presión de cavitación y las propiedades geométricas y fisicoquímicas del xilema, obteniéndose un ecuación diferencial de Verhulst. La comparación de la teoría con resultados experimentales realizados sobre varios tipos de árboles muestra muy buenos resultados.

-Colaboración con otro grupo del IFLYSIB para obtener la función de distribución radial de un modelo primitivo de electrolito. Se utilizó simulación de Monte Carlo sobre un modelo de interacción coulombiano. Los

resultados se utilizaron para poder comparar con la teoría de algoritmo genético.

7. TRABAJOS DE INVESTIGACION REALIZADOS O PUBLICADOS EN ESTE PERIODO.

7.1 PUBLICACIONES.

1) A similarity law in botanic. The case of hydraulic conductivity of trees

Autores: A.G. Meyra, G.J. Zarragoicoechea y V.A. Kuz.
European Physical Journal D 62, 19-23 (2011).

The hydraulic conductivity of xylem vascular systems is modelled via the Verhulst differential equation with the introduction of relevant dimensionless quantities. Sap pressure is scaled to the geometrical and elastic properties of the xylem tubes, and cavitation events are considered as a limited growth process. The self-similar solution of Verhulst equation is a sigmoidal function, that is the same empirical correlation used to fit the experimental data. An important result of this approach is to reveal the existence of a control parameter. This number, which embodies morphological and physicochemical properties of vascular system, characterizes the discharge of tense fluids. The theoretical predictions are in good agreement with experimental data.

Grado de participación: Discusión de la teoría y de la resolución de las ecuaciones diferenciales. Asesoramiento para el desarrollo de los programas de cálculo

2) Vegetation patterns in limited resource ecosystems: a statistical mechanics model and Monte Carlo simulations

Autores: A.G. Meyra, G.J. Zarragoicoechea y V.A. Kuz.
Molecular Physics 110, 173-178 (2012).

The model considers individuals (plants) forming the living biomass as particles having an excluded area and a facilitation/competition pair interaction that is controlled by four parameters. Two are related to the plant morphology while the others to the plant-plant interaction strength. By using the principle of maximum entropy and Monte Carlo simulations in the grand canonical ensemble, vegetation patterns and clusters are obtained that resemble those of stressed ecosystems. The shape and size of these clusters strongly depend on potential external resources or natural environmental resources. A non-linear relation between the biomass density and the activity of the environmental resources as well as a shift in the vegetation cover are predicted. The model seems to be a powerful tool for the description of systems with limited resources.

Grado de participación: Discusión de la teoría e interpretación de la analogía entre la mecánica estadística y el principio de máxima entropía

y el comportamiento de los ecosistemas estresados. Asesoramiento, desarrollo y ejecución de los programas de cálculo.

3) Monte Carlo simulation of Hamaker nanospheres coated with dipolar particles

Autores: A.G. Meyra, G.J. Zarragoicoechea y V.A. Kuz.
Molecular Physics 110, 85-93 (2012).

Parallel tempering Monte Carlo simulation is carried out in systems of N attractive Hamaker spheres dressed with n dipolar particles, able to move on the surface of the spheres. Different cluster configurations emerge for given values of the control parameters. Energy per sphere, pair distribution functions of spheres and dipoles as function of temperature, density, external electric field, and/or the angular orientation of dipoles are used to analyse the state of aggregation of the system. As a consequence of the non-central interaction, the model predicts complex structures like self-assembly of spheres by a double crown of dipoles. This interesting result could be of help in understanding some recent experiments in colloidal science and biology.

Grado de participación: Discusión de la teoría y desarrollo del modelo. Asesoramiento, desarrollo y ejecución de los programas de cálculo.

Este trabajo explicaría resultados experimentales recientes, publicados a comienzos de 2013, sobre nanopartículas de oro cargadas. Las nanopartículas se ordenan y ensamblan de forma similar a la descrita por nuestro modelo, y la formación de una corona de dipolos sería la responsable de las estructuras observadas.

Este trabajo fue elegido por la editorial para ilustrar la portada de la revista. Se adjunta una copia de la portada y la contratapa.

7.2 TRABAJOS EN PRENSA Y/O ACEPTADOS PARA SU PUBLICACIÓN.

7.3 TRABAJOS ENVIADOS Y AUN NO ACEPTADOS PARA SU PUBLICACION.

4) Plant patterns in dryland desertification. Symmetry breaking and critical cluster size

Ariel G. Meyra, Guillermo J. Zarragoicoechea y Victor A. Kuz
Enviado a Journal of Theoretical Biology

Usando una analogía mecánico-estadística y simulación Monte Carlo se describen los patrones de vegetación en ecosistemas áridos y semiáridos. El sistema se modela con una interacción facilitativa/competitiva, y un área de exclusión. Se predice la variación de los patrones con la densidad, los recursos disponibles, los tamaños de clusters y la distancia de facilitación. Se estudia la transición crítica midiendo el coeficiente de variación del tamaño de cluster promedio.

7.4 TRABAJOS TERMINADOS Y AUN NO ENVIADOS PARA SU PUBLICACION.

7.5 COMUNICACIONES.

7.6 INFORMES Y MEMORIAS TECNICAS.

8. TRABAJOS DE DESARROLLO DE TECNOLOGÍAS.

8.1 DESARROLLOS TECNOLÓGICOS.

8.2 PATENTES O EQUIVALENTES.

8.3 PROYECTOS POTENCIALMENTE TRANSFERIBLES, NO CONCLUIDOS Y QUE ESTAN EN DESARROLLO.

8.4 OTRAS ACTIVIDADES TECNOLÓGICAS CUYOS RESULTADOS NO SEAN PUBLICABLES.

8.5 Sugiera nombres (e informe las direcciones) de las personas de la actividad privada y/o pública que conocen su trabajo y que pueden opinar sobre la relevancia y el impacto económico y/o social de la/s tecnología/s desarrollada/s.

9. SERVICIOS TECNOLÓGICOS.

10. PUBLICACIONES Y DESARROLLOS EN:

10.1 DOCENCIA

10.2 DIVULGACIÓN

11. DIRECCION DE BECARIOS Y/O INVESTIGADORES.

Director del Dr. Ariel Meyra, Investigador Asistente del CONICET, desde 2009.
Fluidos confinados. Aplicaciones a sistemas biológicos.

Co-Director del Lic. Leandro Guisandez (Beca de Postgrado Tipo I del CONICET, desde abril de 2011)

Estudio de las propiedades de interfaces y la estabilidad de nanopatrones en materiales confinados.

12. DIRECCION DE TESIS.

Co-Director del Lic. Leandro Guisandez.

Estudio de las propiedades de interfaces y la estabilidad de nanopatrones en materiales confinados.

Tesis para el Doctorado en Física (en ejecución)

13. PARTICIPACION EN REUNIONES CIENTIFICAS.

Patrones de distribución en ecosistemas con recursos limitados. Simulación Monte Carlo en el conjunto gran canónico

Ariel G. Meyra, Guillermo J. Zarragoicoechea, Victor A. Kuz

9º Taller Regional de Física Estadística y sus Aplicaciones a la Materia Condensada TREFEMAC' 11, 4-6 de mayo de 2011, Merlo, San Luis.

Ecosistemas con recursos limitados. Modelo de interacción y Simulación numérica

Ariel G. Meyra, Guillermo J. Zarragoicoechea, Victor A. Kuz

II Jornadas Patagónicas de Biología, I Jornadas Patagónicas de Cs. Ambientales, IV Jornadas Estudiantiles de Cs. Biológicas, septiembre de 2011, Facultad de Cs. Naturales de la UNPSJB, Trelew.

Optimización de la GMSA para el modelo primitivo de electrolito mediante un algoritmo genético.

C. O. Stoico, C. M. Carlevaro, G. Zarragoicoechea y F. Vericat.

II Reunión Conjunta de la Sociedad Uruguaya de Física y la Asociación Física Argentina. Montevideo, Uruguay, 20-23 de septiembre de 2011.

Simulaciones Monte Carlo de nanopartículas magnéticas recubiertas con partículas o moléculas dipolares.

Ariel G. Meyra, Guillermo J. Zarragoicoechea, Victor A. Kuz.

IV Congreso Argentino de Materia Blanda, noviembre de 2012, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca.

Evaporación Alveolar.

Victor A. Kuz, Ariel G. Meyra, Guillermo J. Zarragoicoechea.

Fluidos 2012, XII Reunion de Fluidos y sus Aplicaciones, noviembre de 2012, Grupo de Medios Porosos, Fac. Ingeniería UBA y Universidad Favaloro, CABA.

14. CURSOS DE PERFECCIONAMIENTO, VIAJES DE ESTUDIO, ETC.

15. SUBSIDIOS RECIBIDOS EN EL PERIODO.

16. OTRAS FUENTES DE FINANCIAMIENTO.

17. DISTINCIONES O PREMIOS OBTENIDOS EN EL PERIODO.

18. ACTUACION EN ORGANISMOS DE PLANEAMIENTO, PROMOCION O EJECUCION CIENTIFICA Y TECNOLÓGICA.

Integrante del Consejo Directivo del IFLYSIB (elegido por votación de los miembros de la institución) (0.5%).

19. TAREAS DOCENTES DESARROLLADAS EN EL PERIODO.

Profesor Titular D/S, Cátedra de Física I de Diseño Industrial, Facultad de Bellas Artes de la Universidad Nacional de La Plata. Cargo interino por designación desde 1-7-2007 (8%).

Dictado del tema 'Simulación de Monte Carlo' dentro del curso de Postgrado de la UNLP 'Introducción a la programación, el cálculo numérico y la simulación para científicos'. Segundo semestre de los años 2011 y 2012, IFLYSIB (0.1%).

Dictado del tema 'Simulación numérica: Monte Carlo y dinámica molecular' dentro del curso de Postgrado 'Seminario-Taller de Nitruros de Hierro'. Primer semestre de 2012, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP.

20. OTROS ELEMENTOS DE JUICIO NO CONTEMPLADOS EN LOS TITULOS ANTERIORES.

21. TITULO Y PLAN DE TRABAJO A REALIZAR EN EL PROXIMO PERIODO.

Título: Sistemas confinados: nanopartículas, nanotubos y ecosistemas áridos y semiáridos.

Para el próximo periodo propongo seguir trabajando en mis dos líneas principales de investigación que son básicamente simulaciones Monte Carlo de ecosistemas y sistemas confinados de nanopartículas.

Estudio de sistemas de 2D con partículas (individuos) que interactúan vía potenciales atractivos (corto alcance)-repulsivos (largo alcance), debido a su capacidad para describir o representar ecosistemas áridos o semiáridos (analogía entropía de Shannon/termodinámica).

En el caso de los ecosistemas áridos o semi-áridos, la idea es poder introducir variantes. Con algunas de estas alternativas ya estamos trabajando. Una de ellas es la simulación de mezclas binarias, lo que podría describir perfectamente como sería la convivencia de dos generaciones (adultos e hijos), o de dos especies (una autóctona y otra una especie invasiva). Otra idea es explorar que ocurre si la interacción con el sustrato no es homogénea, por ej. un valle con mayor humedad o sitios elevados con menos agua y mas radiación, etc. Una alternativa muy interesante sería introducir en el tipo de interacción alguna funcionalidad con la densidad de biomasa local. Parece apropiado suponer que debido a la plasticidad de los individuos la interacción puede ser función de la densidad de biomasa local, siendo la interacción efectiva el resultado de optimizar los recursos externos recibidos y el ambiente inmediato que rodea al individuo.

Estudio de nanopartículas representadas por esferas recubiertas con dipolos eléctricos o magnéticos. Las esferas interactúan con un potencial efectivo de tipo Hamaker, y los dipolos se pueden desplazar sobre las superficies de estas esferas, interactuando todos contra todos.

En el caso de las simulaciones de nanopartículas la idea es predecir de manera reducida (coarse-grained Monte Carlo) los valores del campo externo y temperatura necesarios para ensamblar o desensamblar sistemas ordenados y lograr predecir estructuras complejas que puedan aparecer, con la intención de describir o explicar, por ejemplo, experimentos recientes en transiciones de formas de micelas, termorrespuestas en nanocoloides, fusión de micelas gigantes, o interacción de células y virus.

Estudio de las propiedades de interfaces que tienen lugar durante los procesos de adsorción-desorción, mojado, y condensación capilar de gases y fluidos en sistemas confinados como lo son los nano y microtubos. Para ello nos basaremos en el modelo de Ising en 3D en presencia de campos magnéticos superficiales actuando en las paredes de los nanotubos y campos magnéticos de bulk. La metodología de trabajo incluye simulaciones Monte Carlo y desarrollos analíticos simples. Este tema particular se realizará para la codirección de un becario del CONICET.

Objetivos

El objetivo es seguir explorando la potencialidad de Monte Carlo para describir estos u otros ecosistemas. No solo porque introduce la idea de aleatoriedad en la evolución de los patrones o ecosistemas, sino porque es posible introducir explícitamente la idea de competencia, altruismo, parasitismo, fenotipo (mezclas) etc., en los términos de la interacción, ideas que permitirían aplicar las leyes de la termodinámica a la ecología, siendo esta última una ciencia en desarrollo que necesita para su formulación ideas y conceptos de ciencias tales como matemática, termodinámica, economía, entre otras.

En el caso de las simulaciones de nanopartículas la idea es continuar las simulaciones, y comenzar a interactuar con grupos de investigación que puedan realizar la parte experimental y poder así simular sistemas específicos de mas interés y aplicación tecnológica.

Metodología

Simulaciones de Monte Carlo usando las técnicas de coarse-grained y/o parallel tempering. En el caso de los patrones de vegetación, por ser un sistema abierto, la técnica de simulación será sobre un ensamble gran canónico.

Propuesta de un modelo de interacción para las partículas que forman el sistema.

Desarrollo de los programas de simulación numérica de acuerdo a los modelos propuestos.

Exploración del espectro de posibilidades del espacio de configuración de los modelos propuestos.

Comparación con teorías, otras simulaciones, y el experimento.

Factibilidad

El IFLYSIB cuenta con la capacidad de cálculo para realizar estas simulaciones.

Interés para la Provincia de Buenos Aires:

El estudio de sistemas áridos y semiáridos puede ser de interés para la provincia, pues se podrían estudiar las alertas tempranas de desertificación del ecosistema en zonas de estrés hídrico en la provincia y tratar de prevenirla.

En el caso particular de las aplicaciones en nanotecnología, podemos decir que Argentina, y en particular la provincia de Buenos Aires, están en condiciones de desarrollar diversos proyectos en el campo de las micro y nanotecnologías, como nuevos materiales nanoestructurados, aplicaciones industriales de nanorecubrimientos, nanobiotecnología o propiedades físicas y químicas de nanopartículas, diagnóstico médico e industria farmacéutica. Nuestra contribución a estos temas, desde el punto de vista teórico, servirá para comprender y eventualmente predecir los fenómenos involucrados en esos desarrollos tecnológicos.

Condiciones de la presentación:

- A. El Informe Científico deberá presentarse dentro de una carpeta, con la documentación abrochada y en cuyo rótulo figure el Apellido y Nombre del Investigador, la que deberá incluir:
 - a. Una copia en papel A-4 (puntos 1 al 21).
 - b. Las copias de publicaciones y toda otra documentación respaldatoria, en otra carpeta o caja, en cuyo rótulo se consignará el apellido y nombres del investigador y la leyenda "Informe Científico Período".
 - c. Informe del Director de tareas (en los casos que corresponda), en sobre cerrado.
- B. Envío por correo electrónico:
 - a. Se deberá remitir por correo electrónico a la siguiente dirección: infinvest@cic.gba.gov.ar (puntos 1 al 21), en formato .doc zipeado, configurado para papel A-4 y libre de virus.
 - b. En el mismo correo electrónico referido en el punto a), se deberá incluir como un segundo documento un currículum resumido (no más de dos páginas A4), consignando apellido y nombres, disciplina de investigación, trabajos publicados en el período informado (con las direcciones de Internet de las respectivas revistas) y un resumen del proyecto de investigación en no más de 250 palabras, incluyendo palabras clave.