

CARRERA DEL INVESTIGADOR CIENTÍFICO Y TECNOLÓGICO **Informe Científico¹**

PERIODO ²: 2015-2016

1. DATOS PERSONALES

APELLIDO: Zarragoicoechea

NOMBRES: Guillermo Jorge

Dirección Particular: Calle:

Localidad: Manuel B. Gonnet CP: 1897 T

Dirección electrónica: vasco@iflysib.unlp.edu.ar

2. TEMA DE INVESTIGACION

Sistemas confinados: nanopartículas, nanotubos y ecosistemas áridos y semiáridos

PALABRAS CLAVE (HASTA 3) Monte Carlo Sistemas confinados Nanopartículas

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

Dirección: Calle: 59 Nº: 789

Localidad: La Plata CP: 1900 Tel: 0221 425-4904

Cargo que ocupa: Investigador

5. DIRECTOR DE TRABAJOS

No corresponde

.....
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 2017 deberá informar sobre la actividad del período 1°-01-2015 al 31-12-2016, para las presentaciones bianuales. Para las presentaciones anuales será el año calendario anterior.

6. RESUMEN DE LA LABOR QUE DESARROLLA

Descripción para el repositorio institucional. Máximo 150 palabras.

Estudio de sistemas que pueden autoensamblarse (nanopartículas o ecosistemas estresados, por ej.) y caracterización de los patrones configuracionales observados. Las interacciones típicas que producen ese comportamiento son caracterizadas por potenciales atractivos a corto alcance y repulsivos a largo alcance. Sistemas confinados en poros o en superficies. Estudio de nanopartículas magnéticas, agregación sobre superficies y características en sistemas biológicos particulares. Estudio de nanotubos con un modelo tipo Ising. En general, todos estos temas son estudiados por medio de simulación numérica con la técnica de Monte Carlo.

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

Con el modelo de interacción atractivo (corto alcance)/repulsivo (largo alcance), SALR, 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. También con los potenciales SALR se comenzó a estudiar propagación o reproducción de individuos en un sistema de dos componentes, con la idea de simular la reproducción celular o la vascularización de tejidos. Estas simulaciones se realizan en el conjunto Gran Canónico, que es el adecuado para representar muerte y creación de individuos.

Con modelos de nanopartículas magnéticas se estudió las estructuras formadas por deposición en una cinta magnetizada, coincidiendo los resultados de simulación con los patrones experimentales observados, medidos en el Laboratorio de Bajas Temperaturas, Departamento de Física, UBA. Y también se estudiaron bacterias que tienen la particularidad de generar en su interior nanopartículas magnéticas, las cuales se alinean en su interior y le dan propiedades similares a una aguja magnética.

Se continuó estudiando nanotubos representados por modelos tipo Ising, con el objeto de representar las transiciones de fase en sistemas confinados, tema de Tesis del Dr. Guisandez.

En 2016 organicé, con la colaboración del Dr. Ariel G. Meyra, el congreso “Fluidos 2016-XIV Reunión sobre Avances en Física de Fluidos y sus Aplicaciones”. Este congreso se desarrolló del 9 al 11 de noviembre de 2016. Me dediqué a la organización total del evento: conseguir lugar, hotel para invitados, libro de resúmenes, generar página web, manejar las inscripciones via la herramienta on line de la AFA, llevar la contabilidad de las inscripciones y de los subsidios recibidos.

En 2016 me presenté, como director del grupo argentino, a un proyecto de la Comisión Europea, invitado por el Dr. Enrique Lomba (Instituto de Química Física Rocasolano, Madrid). Este proyecto está dentro del programa MARIE SKLODOWSKA-CURIE RESEARCH AND INNOVATION STAFF EXCHANGE, enmarcado en el programa general HORIZON 2020 de la Comisión Europea. El proyecto fue aprobado y se desarrollará desde el 2017 al 2020.

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

8.1 PUBLICACIONES.

1) Self-organization of plants in a dryland ecosystem: Symmetry breaking and critical cluster size.

Ariel G. Meyra, Guillermo J. Zarragoicoechea y Víctor A. Kuz.

Physical Review E **91**, 052810 (2015).

Periodical patterns of vegetation in an arid or semiarid ecosystem are described using statistical mechanics and Monte Carlo numerical simulation technique. Plants are characterized by the area that each individual occupies and a facilitation-competition pairwise interaction. Assuming that external resources (precipitation, solar radiation, nutrients, etc.) are available to the ecosystem, it is possible to obtain the persistent configurations of plants compatible with an equitable distribution of resources maximizing the Shannon entropy. Variation of vegetation patterns with density, critical cluster size, and facilitation distance are predicted. Morphological changes of clusters are shown to be a function of the external resources. As a final remark, it is proposed that an early warning of desertification could be detected from the coefficient of variation of the mean cluster size together with the distribution of cluster sizes.

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.

No depositado en repositorio, pero se depositará.

2) A magnetosome chain viewed as a bio-elastic magnet.

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

Phys. Chem. Chem. Phys. **18**, 12768 (2016).

In light of the coarse-grained Monte Carlo numerical simulation method, the magnetosome chain stability of magnetotactic bacteria is analysed and discussed. This discrete chain of magnetic nanoparticles, encapsulated in a lipid membrane and flanked by filaments, orients bacteria in the geomagnetic field as a compass needle. Each magnetosome is a magnetite or greigite nanocrystal encapsulated in a soft lipid shell. This structure is modelled by a hard core with a magnetic dipole embedded and a cloud of electric dipoles which are able to move and rotate over the magnetic spherical core. In the present paper, some of the many possibilities of the model by varying the control parameters of the system are explored. Magnetic particles arrange in long linear clusters when the coating is removed. However, linear but twisted chains of magnetic particles emerge when there are electric dipoles in the coating shell. A unique linear and straight chain is not observed in any 3D numerical simulation; this result is in agreement with a real living system of bacteria in a geomagnetic field when proteins that form the filament are absent. Finally, the stability and magnetization of a magnetosome chain of 30 beads in one dimension set up are discussed resembling a real chain. The results suggest that a magnetosome chain not only orients bacteria but also should be considered as a potential storage of elastic energy.

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

No depositado en repositorio, pero se depositará.

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

8.3 TRABAJOS ENVIADOS Y AUN NO ACEPTADOS PARA SU PUBLICACION.

8.4 TRABAJOS TERMINADOS Y AUN NO ENVIADOS PARA SU PUBLICACION. Incluir un resumen de no más de 200 palabras de cada trabajo.

8.5 COMUNICACIONES.

8.6 INFORMES Y MEMORIAS TECNICAS.

9. TRABAJOS DE DESARROLLO DE TECNOLOGÍAS.

9.1 DESARROLLOS TECNOLÓGICOS.

9.2 PATENTES O EQUIVALENTES

9.3 PROYECTOS POTENCIALMENTE TRANSFERIBLES, NO CONCLUIDOS Y QUE ESTAN EN DESARROLLO. <http://ichf.edu.pl/person/ciach.html>

9.4 OTRAS ACTIVIDADES TECNOLÓGICAS CUYOS RESULTADOS NO SEAN PUBLICABLES

9.5 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.

10. SERVICIOS TECNOLÓGICOS.

11. PUBLICACIONES Y DESARROLLOS EN:

11.1 DOCENCIA

11.2 DIVULGACIÓN

12. DIRECCION DE BECARIOS Y/O INVESTIGADORES.

Co-Director del Lic. Leandro Guisandez (Beca de Postgrado Tipo I del CONICET, desde abril de 2011 a marzo de 2016). Estudio de las propiedades de interfaces y la estabilidad de nanopatrones en materiales confinados. IFLYSIB.

13. DIRECCION DE TESIS.

Co-Director del Lic. Leandro Guisandez. Estudio de las propiedades de interfaces y la estabilidad de nanopatrones en materiales confinados. Tesis de Doctorado aprobada en marzo de 2016.

14. PARTICIPACION EN REUNIONES CIENTIFICAS.

Flujo en medios porosos, efecto de la distribución de tamaños de poros en la permeabilidad.

C. M. Carlevaro, R.M. Irastorza, Ariel G. Meyra, y Guillermo J. Zarragoicoechea.

13° Congreso Regional de Física Estadística y Aplicaciones a la Materia Condensada TREFEMAC'15, 5/2015, Universidad Tecnológica Nacional – CONICET, Los Reyunos, San Rafael, Mendoza.

Participación en la Reunión y presentación del trabajo, junto con el Dr. Meyra.

Dinámica de agregación de organismos con simulación Monte Carlo.

Guillermo J. Zarragoicoechea y Ariel G. Meyra.

13° Congreso Regional de Física Estadística y Aplicaciones a la Materia Condensada TREFEMAC'15, 5/2015, Universidad Tecnológica Nacional – CONICET, Los Reyunos, San Rafael, Mendoza.

Participación en la Reunión y presentación del trabajo.

Patrones de crecimiento celular en sistemas 2D utilizando potenciales SARL.

G.J. Zarragoicoechea y A.G. Meyra.

100 Reunión Nacional de Física, Asociación Física Argentina, 09/2015, Merlo, San Luis, Argentina.

Participación en la Reunión y presentación del trabajo.

Transiciones de mojado en poros cuasi-cilíndricos: un estudio Monte Carlo.

L. Guisandez, G.J. Zarragoicoechea, E.V. Albano.

14° Congreso Regional de Física Estadística y Aplicaciones a la Materia Condensada TREFEMAC'16, 5/2016, Bariloche, Río Negro.

No asistí a la Reunión, presentado por el Lic. Guisandez.

Distribución de nanopartículas magnéticas sobre un sustrato magnetizado.

G.J. Zarragoicoechea, A.G. Meyra, G. Jorge, V. Bekeris.

14° Congreso Regional de Física Estadística y Aplicaciones a la Materia Condensada TREFEMAC'16, 5/2016, Bariloche, Río Negro.

No asistí a la Reunión, presentado por el Dr. Jorge.

Micrometric Assembly of Magnetotactic Bacteria and Magnetic Nanoparticles.

V. Bekeris, G. A. Jorge, M. Godoy, J. Pettinari, A. G. Meyra, G. J. Zarragoicoechea.

ICSM2016 – 5th International Conference on Superconductivity and Magnetism, 24-30 abril de 2016, Liberty Hotels Lykia & Sentido Lykia Resorts Spa, Fethiye, Turquía.

No asistí a la Reunión, presentado por la Dra. Bekeris.

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

16. SUBSIDIOS RECIBIDOS EN EL PERIODO.

Subsidios recibidos para la organización de “Fluidos 2016-XIV Reunión sobre Avances en Física de Fluidos y sus Aplicaciones”:

CONICET \$50000
CICPBA \$18000
AFA \$6000
ANPCYT \$25000
CLAF \$15000
D'Amico Sistemas \$5000
Papers in Physics \$2000

17. OTRAS FUENTES DE FINANCIAMIENTO.

18. DISTINCIONES O PREMIOS OBTENIDOS EN EL PERIODO.

19. 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% anual).

Revisor de cuentas de la Asociación Física Argentina (0.5 % anual)

20. 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 de los temas 'Simulación de Monte Carlo' y 'Dinámica Molecular' dentro del curso de Postgrado de la UNLP 'Herramientas computacionales para científicos'. Segundo semestre de los años 2015 y 2016, IFLYSIB (0.1% anual).

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

Organizador, con la colaboración del Dr. Ariel G. Meyra, de "Fluidos 2016-XIV Reunión sobre Avances en Física de Fluidos y sus Aplicaciones".

La Reunión se llevó a cabo en el Centro Científico Tecnológico, CCT La Plata-CONICET, del 9 al 11 de noviembre de 2016. El número total de participantes, nacionales y extranjeros, fue de 59, incluyendo a los invitados. La Reunión incluyó una amplia variedad de temas dentro de la Física de los Fluidos. Algunos temas abarcados: Fluidodinámica General, Flujos Generales y no Newtonianos, Magnetofluidodinámica, Electrohidrodinámica y Plasmas, Hidráulica, Termohidráulica y Flujos de Múltiples Fases.

Director del grupo Argentino en el proyecto “Effects of confinement on complex systems”. Este proyecto está dentro del programa MARIE SKLODOWSKA-CURIE RESEARCH AND INNOVATION STAFF EXCHANGE, enmarcado en el programa general HORIZON 2020 de la Comisión Europea. La financiación consiste en gastos de estadía de los investigadores involucrados y de organización de workshops. La estadía mínima es de un mes. Mis visitas programadas, de un mes: febrero de 2018 y febrero de 2019 al Instituto de Química Física Rocasolano, Madrid, y febrero de 2020 al Institute of Physical Chemistry, Varsovia. Recíprocamente investigadores de Madrid y de Varsovia nos visitaran por estadías de uno a dos meses. El presupuesto de este proyecto es de €684000.

He sido invitado a participar en el dictado de un Máster de Simulación Molecular. Esta invitación ha sido cursada por colegas del Laboratorio de Simulación Molecular y Química Computacional, CIQSO-Centro de Investigación en Química Sostenible y Departamento de Ciencias Integradas (Física Aplicada) Universidad de Huelva y del Instituto de Química Física Rocasolano, Madrid, en representación de la Red Española de Simulación Molecular.

Seminario para alumnos de una escuela secundaria de Etcheverry, La Plata, sobre la investigación realizada en el IFLYSIB, y sobre la carrera del investigador. Mayo de 2015.

En octubre de 2016 recibí la visita del Dr. Enrique Lomba, del Instituto de Química Física Rocasolano, Madrid. En parte fue una visita de trabajo, y en parte de participación en la RAFA 2016, desarrollada en Tucumán, como profesor invitado, sugerido por mí y aceptado por el Comité Organizador.

22. TITULO, PLAN DE TRABAJO A REALIZAR EN EL PROXIMO PERIODO. *Desarrollar en no más de 3 páginas. Si corresponde, explicita la importancia de sus trabajos con relación a los intereses de la Provincia.*

Título: Efectos del confinamiento en los sistemas autoensamblables. Paredes confinantes de geometría simple.

Introducción

La aparición espontánea de distribuciones no homogéneas de moléculas, cargas o espines juega un papel crucial en nuestra comprensión de los orígenes de la vida, así como en una gran variedad de procesos tecnológicos. Por lo tanto, es importante comprender las relaciones fundamentales entre los varios tipos de inhomogeneidades posicionales o

rotacionales, y las propiedades mecánicas y termodinámicas de los fluidos complejos. Por otro parte, es necesario lograr teorías predictivas y métodos precisos de investigación de sistemas complejos específicos para el desarrollo de aplicaciones prácticas de los patrones generados en sistemas autoensamblados, dentro de un enfoque ascendente en el diseño de nuevos materiales.

Antecedentes

La formación de patrones espaciales en diferentes escalas de longitud es a menudo inducido por interacciones competitivas. Por ejemplo, a escala microscópica, las interacciones Coulombianas y de van der Waals compiten en los líquidos iónicos, y a escala del nanómetro, las partículas coloidales cargadas se repelen con interacciones electrostáticas apantalladas y se atraen con potenciales efectivos vía el solvente (Stradner 2004). La suma de las interacciones competitivas a veces se representa por potenciales del tipo atracción de corto alcance/repulsión de largo alcance (SALR, por sus siglas en inglés) (Archer et al, 2007, Ciach et al, 2013). Inclusive los ecosistemas estresados áridos y semiáridos pueden modelarse con éxito con potenciales SALR (SA=agrupación de plantas para evitar la evaporación, LR=competencia por el agua de las raíces) (Meyra et al, 2012, Meyra et al, 2015). O también se puede modelar la formación de patrones en nanopartículas esféricas revestidas con partículas SALR (Meyra et al, 2010). A pesar de las diferentes escalas y los diferentes orígenes de las interacciones competitivas, es sorprendente la similitud de las propiedades estructurales y termodinámicas de estos sistemas. Los patrones, bandas o gotas, son los mismos en una capa magnética, en una membrana biológica, o en ecosistemas estresados.

Objetivo

Un objetivo de este trabajo es conocer las propiedades universales y específicas de los sistemas que pueden autoensamblarse, con especial interés en los efectos de confinamiento. Se estudiará la estructura, la termodinámica y las propiedades mecánicas de varios modelos con interacciones competitivas.

Plan de trabajo

Se implementaran simulaciones numéricas para estudiar las estructuras y comportamientos de sistemas de autoensamblaje confinados en varias geometrías sencillas. Monte Carlo, principalmente, y también la dinámica molecular son las técnicas numéricas a aplicar. Las partículas que interactúan pueden ser confinadas por las paredes, o las paredes pueden

ser el soporte de las partículas (por ejemplo, nanopartículas en la superficie de una esfera). Los muros confinantes (rígidos o elásticos, permeables o impermeables) podrían definir un volumen esférico, un tubo cilíndrico, un poro de paredes paralelas, un tubo simétrico o asimétrico (dos volúmenes esféricos que se interceptan), o simplemente bandas en dos dimensiones. Aunque los esfuerzos se centrarán en la estructura y formación de patrones, en sistemas particulares también podría ser estudiada la dinámica de la agregación.

También se estudiarán sistemas confinados sobre superficies (interface o membrana) con una o dos componentes. Se intentará realizar simulaciones para apoyar el desarrollo de una teoría para estos sistemas, que incluye density functional theory o métodos de ecuaciones integrales.

En los últimos años se han realizado estudios experimentales que verifican que enfermedades tales como Alzheimer, mal de Parkinson, además de las cataratas en el cristalino de los ojos, son causados por la agregación de proteínas. En algunos casos se saben cuáles son las proteínas que se agregan. Por ejemplo en el cristalino del ojo son las alfa y gamma globulinas. Pero lamentablemente no se tiene aun resuelta la estructura topológica de la proteína. Como una primera aproximación al problema nos proponemos mediante simulación de Monte Carlo (coarse-grained) y el uso de potenciales SALR simular estas proteínas confinadas en distintas geometrías. Otro sistema interesante a estudiar es la estabilidad de nanocoloides magnéticos. En este caso el sistema está compuesto por nanopartículas con momento dipolar magnético recubiertas con estabilizantes que le confieren una carga neta superficial. El agente superficial estabilizante, por e.j ácido cítrico, será representado de manera efectiva con un potencial dipolar eléctrico. Esta representación, cuando comparada por ejemplo con las curvas de magnetización experimentales, nos permite saber cuáles son los tamaños de cluster de los nanocoloides en solución.

Referencias

- Archer, A. J. & Wilding, N. B. Phase behavior of a fluid with competing attractive and repulsive interactions. Phys. Rev. E 76, 031501 (2007).
- Ciach, A., Pekalski, J. & Gozdz, W. T. Origin of similarity of phase diagrams in amphiphilic and colloidal systems with competing interactions. Soft Matter 9, 6301 (2013).
- Meyra, A.G., Zarragoicoechea, G.J., and Kuz, V.A.. Monte Carlo simulation of a binary mixture on the surface of a sphere. Lateral phase transition and pattern formation Molecular Physics 108, 1329-1335 (2010).

Meyra, A.G., Zarragoicoechea, G.J., and Kuz, V.A.. Vegetation patterns in limited resource ecosystems: a statistical mechanics model and Monte Carlo simulations. *Molecular Physics* 110, 173-178 (2012).

Meyra, A. G., Zarragoicoechea, G. J., & Kuz, V. A.. Self-organization of plants in a dryland ecosystem: Symmetry breaking and critical cluster size. *Physical Review E* 91(5), 052810 (2015).

Stradner, A. et al. Equilibrium cluster formation in concentrated protein solutions and colloids. *Nature* 432, 492 (2004).

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:
- Una copia en papel A-4 (puntos 1 al 22).
 - 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".
 - Informe del Director de tareas (en los casos que corresponda), en sobre cerrado.
- B. Envío por correo electrónico:
- Se deberá remitir por correo electrónico a la siguiente dirección: infinvest@cic.gba.gob.ar (puntos 1 al 22), en formato .doc zipeado, configurado para papel A-4 y libre de virus.
 - 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.
- C. Sistema SIBIPA:
- Se deberá peticionar el informe en la modalidad on line, desde el sitio web de la CIC, sistema SIBIPA (ver instructivo).

Nota: El Investigador que desee ser considerado a los fines de una promoción, deberá solicitarlo en el formulario correspondiente, en los períodos que se establezcan en los cronogramas anuales.