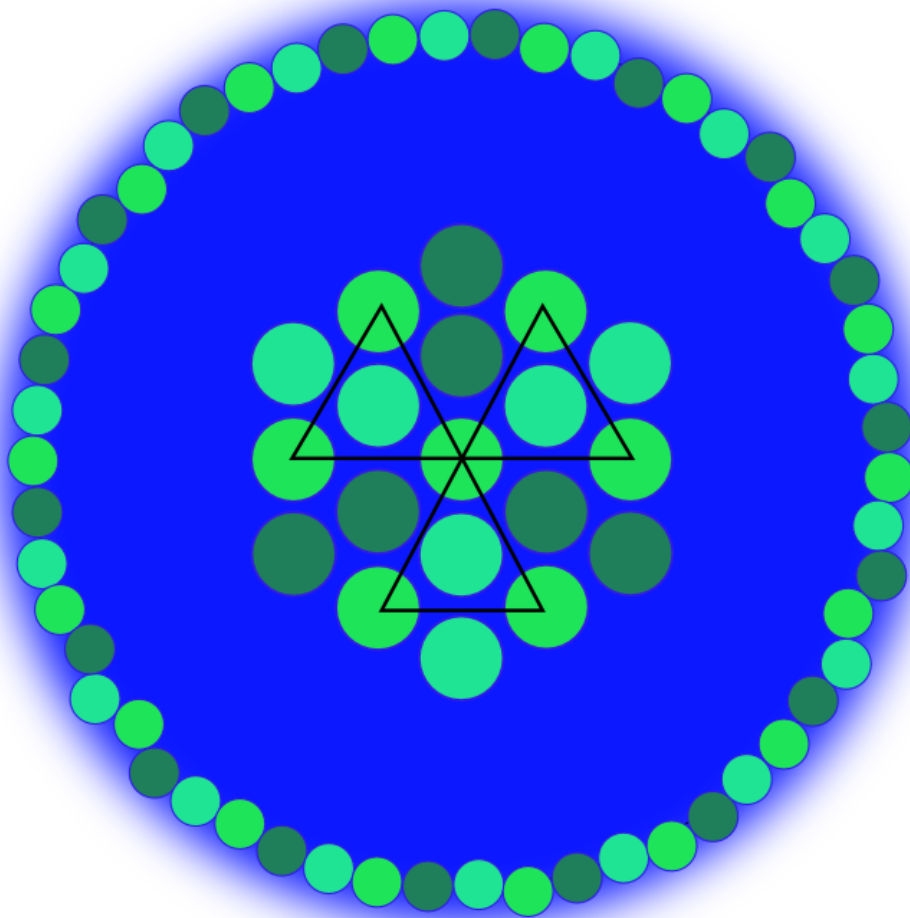


Workshop on the Role of Caging Phenomenon in the
Structure and Dynamics in Many-Particle Systems

Resumen y Propuestas de las
Actividades realizadas
del 10 de Octubre
al 1 de Noviembre 2015

Marco Carrillo & Arantza Zavala

November 19, 2015



Contents

1	Gathering (10-Octubre al 1-Noviembre)	3
2	Jueves 29 de Octubre: Simulación y Teoría	4
2.1	<i>“Caging mechanism and frustration of freezing”</i> Dr. Adrián Huerta	4
2.2	<i>“Collective Dynamics and Caging”</i> Dr. Taras Bryk	4
2.3	<i>“Augmented van der Waals and Caging Phenomenon”</i> Dr. Andrij Trokhymchuk	4
2.4	<i>“Formation, Structure, and Dynamics of Colloidal Halos”</i> Dr. José Méndez	5
3	Viernes 30 de Octubre: Coloides Experimentales y Materia Granular	7
3.1	<i>“Estudio de las Transiciones de Fase en un Sistema Confinado a Cuasi-1D”</i> Arantza Zavala	7
3.2	<i>“Avalanches in 2D Granular Systems”</i> Dr. Rodrigo Sánchez	7
3.3	<i>“Magnetic Particles: Structural and Dynamical Properties”</i> Dra. Rosario Moctezuma	8
3.4	<i>“Lattice Gas: Widom Line and Redundant Percolation”</i> Román Perdomo	8
4	Sábado 31 de Octubre: Ciencia de los Alimentos	10
4.1	<i>“Estudio del Comportamiento Estructural de una Submonocapa de Chía”</i> Lic. Cathy Morales	10
4.2	<i>“Micro/Nanoesferas basadas en Pecticidas de Bajo Metoxilo/ Arabinosilanos Ferulados como Sistemas de Liberación Dirigida de Proteínas Modelo”</i> Dr. Agustín Rascón Rascón	10
5	Propuestas discutidas durante la sesión <i>Conclusions and new proposals</i>	12

1 Gathering (10-Octubre al 1-Noviembre)

Previo al Workshop on the Role of Caging Phenomenon in the Structure and Dynamics of Many-Particle Systems, desde la segunda semana de octubre se estuvieron realizando reuniones de discusión cada martes y jueves durante tres horas. En estas sesiones estudiantes e investigadores presentaron y discutieron su trabajo con el propósito de obtener una retroalimentación así como para establecer lazos de colaboración. Algo que caracterizó estas sesiones fue la presencia del Dr. Taras Bryk y del Dr. Andriy Trokhymchuk de la National Academy of Sciences of Ukraine. Algunos de los temas tratados fueron los temas de tesis de los estudiantes de la Licenciatura en Física de la Universidad Veracruzana Arantza Zavala y Roman Perdomo y las experiencias del curso de Introducción a los Métodos de Simulación Monte Carlo y Dinámica Molecular por parte de los estudiantes Marcos Suárez, Jahaziel Domínguez y Gustavo Vázquez. A continuación se presenta el programa que se siguió en el gathering:

- Martes 13 de Octubre *Estudio de las fases de un sistema confinado en cuasi-1D*, planteado por Arantza Zavala.
- Jueves 15 de Octubre *Estudio del comportamiento termodinámico y estructural del modelo de "Lattice Gas" para temperaturas supercríticas*, planteado por Román Perdomo.
- Martes 20 de Octubre *Posibles extensiones a los estudios de Monte Carlo y Dinámica Molecular*, planteado por Marcos Suárez, Jahaziel Domínguez y Gustavo Vázquez y *Avances del modelo de celdas en cuasi-2D* planteado por Gustavo Vázquez.
- Martes 27 de Octubre *Comparación con los modelos q-1D de Arantza* planteado por el Dr. Adrián Huerta y *Expreimentos con Chia y posibles modelos* planteado por el Dr. Rodrigo Sánchez.



Figure 1: Imagenes del gathering de los martes y jueves.

2 Jueves 29 de Octubre: Simulación y Teoría

Las conferencias de este día se concentraron en el aspecto analítico y computacional del fenómeno de empaquetamiento. Uno de los organizadores, el Dr. Adrián Huerta, dio inicio a las pláticas después de la inauguración. Le siguieron dos de sus colaboradores de la National Academy of Sciences of Ukraine, el Dr. Taras Bryk y el Dr. Andrij Trokhymchuk. Entre estas pláticas se dio un espacio para tomar café y atender los cartéles que se prepararon para una sesión de pósters. Finalmente, el primer día del evento terminó con la conferencia del Dr. José Méndez del Departamento de Física del CINVESTAV. La afortunada coincidencia entre el tema de su plática y el tema de tesis de la alumna Arantza Zavala podría dar pie a futuras colaboraciones.

2.1 “*Caging mechanism and frustration of freezing*” Dr. Adrián Huerta

Resumen: El fenómeno de empaquetamiento en el modelo de discos duros nos permite estudiar transiciones de fase como la cristalización. Ligeras modificaciones a las propiedades físicas de los discos duros demuestran dar una fenomenología rica al sistema. Una forma de estudiar las consecuencias de los cambios en la geometría de los discos duros es a través de la función de distribución radial.

Propuestas: Los estudiantes interesados podrían realizar tesis en colaboración continuando con el análisis del modelo de discos duros ‘ligeramente deformados’.



Figure 2: Dr. Adrián Huerta - Universidad Veracruzana.

2.2 “*Collective Dynamics and Caging*” Dr. Taras Bryk

Resumen: Basados en el reciente artículo *Collective excitations in 2D hard-disc fluid* Adrian Huerta, Taras Bryk, Andrij Trokhymchuk se iniciaron estudios de sistemas confinados en quasi-1D y mezclas con diferentes masas. **Propuestas:** Se plantea analizar diferentes casos de anchos de poro y razones de masas. Así como la posibilidad de extender estos estudios a casos de confinamiento quasi-2D

2.3 “*Augmented van der Waals and Caging Phenomenon*” Dr. Andrij Trokhymchuk

Resumen: Además del área libre, es importante tomar en cuenta el área excluida (o volumen excluido). La contribución del área excluida es más relevante cuando consideramos sistemas bidispersos



Figure 3: Dr. Taras Bryk - National Academy of Sciences of Ukraine

para $\sigma_1 \gg \sigma_2$, donde σ_i representa el tamaño de las partículas. Uno de los fenómenos más interesantes que se pueden estudiar al considerar el área excluida es el empaquetamiento energético.

Propuestas: Con la pinza que Karen Volke prestó a la FF-UV durante el Taller de Pinzas Ópticas se llegó a observar un caso de empaquetamiento que podía ser energético. Si realizáramos nuevas observaciones con muestras en las que podamos estar seguros que la contribución de otras interacciones, como la electromagnética, sea mínima sería posible realizar estudios sobre la interacción con el volumen excluido.



Figure 4: Dr. Andriy Trokhymchuk - National Academy of Sciences of Ukraine

2.4 “*Formation, Structure, and Dynamics of Colloidal Halos*” Dr. José Méndez

Resumen: Se tiene un halo coloidal cuando el movimiento de las partículas de una muestra está constreñido a una superficie curva (elipsoidal). La dinámica de las partículas depende fuertemente de la topología de la superficie. Dependiendo del valor de saturación de la muestra, una de las partículas podría rodear la superficie en repetidas ocasiones.

Propuestas: Es posible estudiar un halo coloidal bidimensional por medio de una pinza óptica. Sería interesante ver si es posible estudiar la dinámica de las partículas en 3D al proyectarlas en 2D

por medio una transformación conforme. Lo anterior permitiría estudiar la dinámica de las partículas casi sobre cualquier superficie curva (hiperboloides por ejemplo).



Figure 5: Dr. José Méndez - CINVESTAV

3 Viernes 30 de Octubre: Coloides Experimentales y Materia Granular

El segundo día del Workshop fue dedicado al aspecto experimental de la materia condensada. Con el propósito de incluir a más estudiantes de la Facultad de Física, la primera plática se dio durante el horario del Seminario Semanal de la Facultad de Física. En este espacio la alumna Arantza Zavala expuso sus avances de tesis, la cual es dirigida de manera conjunta por el Dr. Adrán Huerta y el Dr. Alejandro Vásquez, quien nos visitó desde el Instituto de Física de la UNAM. Las conferencias del Dr. Rodrigo Sánchez y la Dra. Rosario Moctezuma tendrían lugar en el Auditorio de la Facultad de Biología. Luego de un descanso durante el café y la sesión de pósters, el alumno Román Perdomo presentó los avances de su tesis de licenciatura durante la última plática del día. El viernes el evento terminó con una sesión para discutir los resultados mostrados hasta entonces y para hacer nuevas propuestas de trabajo.

3.1 “*Estudio de las Transiciones de Fase en un Sistema Confinado a Cuasi-1D*” Arantza Zavala

Resumen: Por medio modelos construidos a partir de las propiedades geométricas del sistema es posible relacionar el área libre por partícula con propiedades físicas que nos permitan estudiar el comportamiento termodinámico de los sistemas confinados a cuasi-1D. El problema se ha abordado por medio de Métodos de Monte Carlo, de Dinámica Molecular y experimentalmente. Para el estudio experimental se observaron micropartículas atrapadas en un círculo usando una pinza óptica con un modulador de fase simulando una lente axicón.

Propuestas:



Figure 6: Arantza Zavala - Facultad de Física

3.2 “*Avalanches in 2D Granular Systems*” Dr. Rodrigo Sánchez

Resumen: Se han realizado múltiples experimentos en los que un sistema de medios granulares exhibe el llamado colapso granular. Una comparación entre los estudios para sistemas aproximadamente monodispersos y sistemas polidispersos demostró que estos últimos presentan frustración en la cristalización.

Propuestas: A lo largo de estos estudios se ha establecido un proceso experimental que se puede seguir empleando en otros experimentos con medios granulares.



Figure 7: Dr. Rodrigo Sánchez - Universidad Veracruzana

3.3 “*Magnetic Particles: Structural and Dynamical Properties*” Dra. Rosario Moctezuma

Resumen: Medios granulares estimulados por campos magnéticos oscilatorios. **Propuestas:** Estudiar los sistemas granulares desde el punto de vista de la percolación de las partículas, así como se plantea una colaboración que incluiría dos fases: 1) Estudio de las estructuras formadas 2) Propuesta de un modelo Se realizará una estancia en la UASLP para discutir dichos detalles y la elaboración de un proyecto.

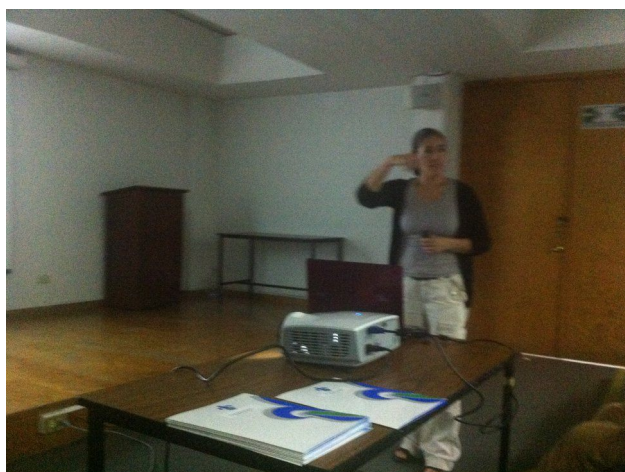


Figure 8: Dra. Rosario Moctezuma - Universidad Autónoma de San Luis Potosí

3.4 “*Lattice Gas: Widom Line and Redundant Percolation*” Román Perdomo

Resumen: Al realizar una analogía entre la percolación para el modelo de Ising y el Lattice Gas ha sido posible identificar distintas regiones para fases gaseosas, líquidas e intermedias por medio de las líneas de Widom y de Kertész.

Propuestas: Es posible estudiar versiones más complicadas del Lattice Gas, también se puede hacer un estudio de la conectividad y la redundancia de rigidez en el sistema.



Figure 9: Román Perdomo - Universidad Veracruzana

4 Sábado 31 de Octubre: Ciencia de los Alimentos

El último día del Workshop se centró en las aplicaciones de los temas discutidos en la industria de los alimentos. La Lic. Cathy Morales, ex-alumna de la Facultad de Física de la Universidad Veracruzana, expuso los resultados de su tesis de licenciatura. El Dr. Agustín Rascón habló sobre la gelificación de proteínas, siendo esta la última plática del Workshop.

4.1 “*Estudio del Comportamiento Estructural de una Submonocapa de Chía*” Lic. Cathy Morales

Resumen: Se observó el crecimiento de semillas de chía en agua dentro de un recipiente a cuasi-2D. Estudiando la evolución temporal de la dimensión fractal del sistema se pudo observar que ésta presenta una tendencia o una discontinuidad dependiendo de las propiedades de la muestra. Básicamente al ir saturando la muestra el movimiento de las partículas se va constriñendo conforme crecen las semillas. Un problema con este experimento fue que, al cabo de un periodo de tiempo, las semillas comienzan a germinar.

Propuestas: Usar otro tipo de solventes puede llegar a inhibir la germinación de las semillas, esto permitiría un estudio más prolongado del sistema.



Figure 10: Lic. Cathy Morales - Egresada de la Universidad Veracruzana

4.2 “*Micro/Nanoesferas basadas en Pecticidas de Bajo Metoxilo/ Arabinoxilanos Ferulados como Sistemas de Liberación Dirigida de Proteínas Modelo*” Dr. Agustín Rascón Rascón

Resumen: Por medio del fenómeno de la fisión de Coulomb ha sido posible gelificar sustancias dentro de una esfera de tamaño definido. La cáscara de la esfera puede ser de un material tal que proteja el interior, algún químico por ejemplo, del medio en el que se mueve la esfera.

Propuestas: Al ser un trabajo multidisciplinario está latente la posibilidad de aplicar los modelos y teorías desarrollados hasta ahora en este sistema en específico.

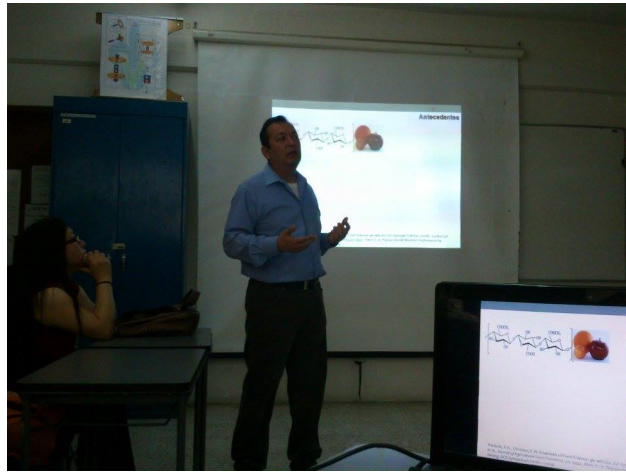


Figure 11: Dr. Agustín Rascón - CIAD, A.C.



Figure 12: Participantes del Workshop

5 Propuestas discutidas durante la sesión *Conclusions and new proposals*

Durante la sesión destinada para conclusiones y propuestas se dejó en claro que los temas tratados durante el Workshop son de común interés para los participantes del mismo. Un esfuerzo conjunto de los participantes nos permitiría concretar futuros proyectos como por ejemplo:

- Tesis en colaboración: Gracias a que varios alumnos de la Facultad de Física de la Universidad Veracruzana asistieron al Workshop existe la posibilidad de que aquellos estudiantes interesados en alguno de los temas expuestos durante el evento se acerquen con el propósito de realizar una tesis en dicho tema.
- Movilidad: Una de las virtudes de la red es el impulso que da a la movilidad de sus miembros. Debido a las discusiones realizadas durante del Workshop es posible que se hayan estrechado los lazos de colaboración. Por lo mismo, es posible que se establezca una movilidad periódica entre los participantes del evento.
- Segunda edición del Workshop on the Role of Caging Phenomenon in the Structure and Dynamics of Many-Particle Systems: Existe la propuesta de volver a organizar este evento con el propósito de observar el avance obtenido en un año así como aumentar la cantidad de investigadores y estudiantes involucrados en este proyecto.
- Taller en Pinzas Ópticas: Año con año se realizan múltiples escuelas de ciencia en todo el país, sin embargo el carácter de la mayoría tiende a ser más presencial que inclusivo. Se tiene la propuesta de impulsar un taller en pinzas ópticas en el que los participantes pongan manos a la obra.

Es obvio que las propuestas anteriores requieren de muchos recursos para poder concretarse, algunas de las fuentes de financiamiento consideradas hasta ahora son

- DGDAIE
A través del Cuerpo Académico: “*Óptica Aplicada y Materia Condensada Blanda*” es posible hacer una solicitud a la Universidad Veracruzana para que a través del programa Superación Académica PRODEP tipo Superior.
- Ciencia Básica Conacyt
Estableciendo un enfoque común para los temas discutidos durante el Workshop y concentrando los resultados obtenidos hasta ahora es posible elaborar una propuesta de proyecto para Ciencia Básica de Conacyt.
- Red de Materia Condensada Blanda
La permanencia en la Red Temática de Materia Condensada Blanda es una buena opción que nos permitiría obtener recursos para futuros proyectos. Para esto es necesario vincular las acciones a proponer con los objetivos de la red para poder conseguir apoyo económico requerido.