

**Programa del 5o Taller de Materia Condensada Blanda
27 al 29 Noviembre 2018
16:00-18:00 hrs Facultad de Física de la Universidad Veracruzana, Salón 1
Organiza UV-CA-198: Optica Aplicada y Materia Condensada Blanda**

**LGAC Optica aplicada:
Dra. Patricia Padilla, Dr. Héctor Cerecedo (sabático)**

**LGAC Materia condensada blanda:
Dra. Norma Bagatella, Dr. Adrián Huerta**

27 - Noviembre - 2018

16:00 - 16:30 *"Recuento de los avances anuales, retos y perspectivas de la materia blanda"*

Dr. Adrián Huerta
UV-CA-198 LGAC: *Materia Condensada Blanda*.
Facultad de Física
Universidad Veracruzana

16:30-17:00 *"La biología, la química y la física de la epilepsia"*

Dra. María Leonor López Meraz,
UV-CA-333 *Neurofisiología (Consolidado)*
Centro de Investigaciones Cerebrales y
Doctorado en Investigaciones Cerebrales,
Universidad Veracruzana

17:00 - 18:00 *"Efectos de la luz sobre la salud de la población desde un enfoque cronobiológico"*

Dr. José Enrique Meza Alvarado,
UV-CA-222 *Biología Molecular y Celular (Consolidado)*
Centro de Investigaciones Biomédicas
Universidad Veracruzana

28 - Noviembre - 2018

16:00 - 16:30 *"Estudio mediante dinámica molecular de la interacción entre líquidos iónicos y pinocembrina"*

Fís. Alejandra Tayde Cadillo Martínez
Maestría en Física - Facultad de Física
Universidad Veracruzana

16:30 - 17:00 *"Obtención de propiedades fisicoquímicas a partir de química computacional"*

Dra. Myrna H. Matus, UV-CA-280 Química y Propiedades Biológicas de Productos Naturales (Consolidado)

17:00 - 17:30 *"Estudio de las propiedades termodinámicas y estructurales de un sistema 2D con partículas atractivas"*

Fís. Marcos Suárez Muñoz
Ayudante de Investigador
Facultad de Física
Universidad Veracruzana.

17:30 - 18:00 *"Modelos unidimensionales en equilibrio termodinámico"*

Fernando Barrios
Facultad de Física
Universidad Veracruzana.

29 - Noviembre - 2018

16:00 - 16:30 *"Estudio de la percolación de restricciones en un sistema de discos duros"*

Fís. Víctor Hugo Vásquez Herrera
(egresado)
Facultad de Física
Universidad Veracruzana

16:30 - 17:00 *"Implicaciones dinámicas y termodinámicas de la percolación: Modelos "Forest fire" e Ising"*

Fís. Gustavo Vázquez
Maestría en Física - Facultad de Física
Universidad Veracruzana

17:00 - 17:30

Acuerdos y conclusiones

Resúmenes
27 Noviembre 2018

16:00 - 16:30 hrs "Recuento de los avances anuales, retos y perspectivas de la materia blanda"

Dr. Adrián Huerta
Facultad de Física
Universidad Veracruzana

Parte de este año aún me encontraba durante mi estancia sabática en el laboratorio de micromanipulación óptica del Instituto de Física de la UNAM (IFUNAM). Durante esta plática haré un breve recuento de las actividades realizadas en las colaboraciones con los Dr. Alejandro Vásquez, Dra. Karen Volke, Dr. Gerardo Garcia Naumis, del IFUNAM, Dr. Andriy Trokhymchuk y Dr. Taras Bryk, del "Institute for Condensed Matter Physics" de la academia de ciencias de Ucrania, con quienes tuve la oportunidad de interactuar. También mencionaré brevemente las tesis dirigidas que concluyeron durante este tiempo, así como las perspectivas de las actividades que realizarán los estudiantes que continuarán trabajando en la maestría, nuevos integrantes, de servicio social y licenciatura. Finalmente y a raíz de esta estancia se concluyó con el ensamblado de una pinza óptica propuesta desde el últimos proyectos de ciencia básica de Conacyt y Prodep. Apoyados por la ahora Mtra. Laura Pérez del lab. de micromanipulación de la UNAM, quien recientemente participó en el Encuentro Xalapeño de Física. Como se ha discutido usaremos la pinza para el estudio de los mecanismos de interacción entrópica, de los que ya hemos hablado en talleres anteriores de esta serie de reuniones, así como nuevas perspectivas que se abren para la aplicación de dicho instrumento, así como de sus posibles mejoras y colaboraciones, enfatizando su importancia para la posibilidad de brindar algún tipo de servicio en el futuro dentro de la Universidad Veracruzana.

16:30-17:00 "La biología, la química y la física de la epilepsia"

Dra. María Leonor López Meraz
Centro de Investigaciones Cerebrales, Universidad Veracruzana
Doctorado en Investigaciones Cerebrales, Universidad Veracruzana

La epilepsia es un trastorno cerebral, que se caracteriza por una predisposición crónica a generar episodios de actividad eléctrica anormal que se manifiestan como crisis epilépticas. Las causas de la epilepsia son múltiples, pero las crisis epilépticas se presenta cuando hay una falla en la comunicación entre las neuronas, quienes se comunican a través de sustancias químicas (neurotransmisores) que eventualmente generan una señal eléctrica, es decir, el potencial de acción. Algunos neurotransmisores promueven la actividad de las neuronas, por lo que se llaman excitadores (por ejemplo, el glutamato), mientras que otras la disminuyen, por lo que se denominan inhibidores (por ejemplo, el ácido gama-aminobutírico o GABA). Estos mensajeros químicos funcionan en un equilibrio dinámico, pero cuando éste se pierde, ya sea por una mayor excitación o una menor inhibición, o ambos, se genera un aumento de la actividad neuronal, y además las neuronas se sincronizan, lo que origina las crisis epilépticas. Considerando lo anterior, se han diseñado modelos biológicos que pretenden mimetizar, a través de diferentes manipulaciones experimentales, los cambios que ocurren en las neuronas durante las crisis epilépticas para estudiar las causas y las consecuencias de la epilepsia.

17:00-18:00 "Efectos de la luz sobre la salud de la población desde un enfoque cronobiológico"

Dr. José Enrique Meza Alvarado
Centro de Investigaciones Biomédicas
Universidad Veracruzana

Las oscilaciones ambientales originadas por los movimientos de traslación y rotación de la tierra durante millones de años, han permitido que los seres vivos desarrollemos mecanismos de organización temporal, para garantizar la sobrevivencia de las especies. Los ritmos biológicos son parte de estos mecanismos y se definen como las oscilaciones de eventos

fisiológicos y conductuales con repeticiones en intervalos de tiempo regulares. Por sus implicaciones fisiológicas y efectos sobre la salud, los ritmos circadianos son los más estudiados y son aquellos que se repiten con intervalos de 24 horas aproximadamente. En organismos superiores, la luz ambiental es el principal sincronizador de estos ritmos, a través del fotorreceptor melanopsina, localizado en células ganglionares de la retina. Al percibir la luz, la melanopsina activa una cascada de señalización dentro de la célula, induciendo su despolarización y transmitiendo la información a las células del "reloj biológico" localizado en el hipotálamo, para marcar el tiempo a diversos mecanismos fisiológicos en todo el organismo. Actualmente, la exposición a la luz artificial ha originado desincronización entre el entorno ambiental y la fisiología de los individuos, generando trastornos fisiológicos que derivan en problemas de salud como cáncer, sobrepeso, obesidad y problemas psicológicos.

28 noviembre 2018

16:00-16:30 "Estudio mediante dinámica molecular de la interacción entre líquidos iónicos y pinocembrina"

Fís. Alejandra Tayde Cadillo Martínez
Maestría en Física - Facultad de Física
Universidad Veracruzana

La pinocembrina es un flavonoide presente en algunos productos naturales, incluidos los propóleos. La extensa investigación indica que pinocembrina tiene actividades biológicas potenciales, que han despertado un mayor interés entre los químicos y biólogos. Entre las actividades biológicas que se han reportado de la pinocembrina se encuentran efectos antimicrobianos, antioxidantes y antiinflamatorios. Debido a la importancia de este tipo de compuestos en la asistencia sanitaria resulta de interés estudiar los procesos de extracción, ya que actualmente se buscan aquellos que impliquen el uso de sustancias poco contaminantes y que contribuyan al ahorro energético es por esto que los disolventes verdes como el agua y los líquidos iónicos se utilizan como una alternativa a los disolventes tradicionales. Por lo anterior, en este trabajo se lleva a cabo un estudio de la solubilidad y los factores estructurales que influyen en las interacciones entre los líquidos iónicos y la molécula de pinocembrina utilizando simulaciones de dinámica molecular clásica. Es importante realizar este tipo de simulaciones por computadora debido a que proporcionan una ruta conveniente para calcular propiedades termodinámicas. Con este estudio se puede evaluar el rendimiento de los líquidos iónicos en los procesos de extracción de la pinocembrina.

16:30-17:00 "Obtención de propiedades fisicoquímicas a partir de química computacional"

Dra. Myrna H. Matus
Universidad Veracruzana

La química computacional es un área de la química que incluye conceptos y métodos de física, matemáticas y computación, la cual es cada vez más utilizada por otras áreas del conocimiento para obtener datos de respaldo o comparación con el experimento, o en donde el experimento es difícil de llevar a cabo. Lo anterior es debido al desarrollo de equipos de cómputo, que en la actualidad pueden llevar a cabo hasta miles de billones de operaciones de punto flotante en un segundo (petaFLOPs), lo cual permite calcular datos en muy buena concordancia con el experimento. En esta ponencia se presentan algunos ejemplos en donde se emplea la química computacional para obtener datos termoquímicos, los cuales reproducen tendencias experimentales o, en algunos casos, se encuentran dentro de la exactitud química (+/- 1 kcal/mol).

17:00-17:30 "Estudio de las propiedades termodinámicas y estructurales de un sistema 2D con partículas atractivas"

Fís. Marcos Suárez Muñoz (Ayudante de Investigador)

Facultad de Física
Universidad Veracruzana

Se presentará un estudio de un sistema para partículas que interactúan mediante un pozo cuadrado de potencial con diferentes alcances $\lambda = 1.5$, $\lambda = 2.0$ y $\lambda = 2.5$, específicamente en la región de transición de fase fluido-sólido para ver cual es la naturaleza de ésta, mediante propiedades termodinámicas. Además de un análisis de las propiedades estructurales para los diferentes puntos de las ecuaciones de estado pertenecientes a estos sistemas. Por último, se hará una discusión del posible diagrama de fases de la región de transición fluido-sólido (trabajo que se encuentra en proceso) y el problema de tamaño finito para estos sistemas.

17:30 - 18:00 hrs "Modelos unidimensionales en equilibrio termodinámico"

Fernando Barrios

Facultad de Física, Universidad Veracruzana.

Trabajos previos han estudiado sistemas finitos unidimensionales de barras duras considerando masas iguales (modelo de Tonks) y no considerándolas. Para la función de distribución del momento, se ha observado una falta de concordancia entre simulaciones de dinámica molecular y lo predicho por la teoría en equilibrio termodinámico del ensamble canónico; dicha discrepancia se debe principalmente a que las simulaciones se encuentran en el contexto del ensamble *microcanónico*, o en su defecto, de *dinámica molecular*. Sin embargo, se ha mostrado que, en límite termodinámico, para el caso de masas distintas, los resultados de simulaciones y teoría coinciden.

29 noviembre 2018

16:00 - 16:30 hrs "Estudio de la percolación de restricciones en un sistema de discos duros"

Fís. Víctor Hugo Vásquez Herrera (Egresado)

Facultad de Física, Universidad Veracruzana

Se presentará un estudio de percolación de restricciones para un sistema de discos duros variando el empaquetamiento η . En éste trabajo se estudiaron dos tipos de percolación, de conectividad y redundancia. Por otra parte se calculó la ecuación de estado para un sistema de discos duros bidimensional utilizando el método de Monte Carlo con un ensamble NVT para un sistema de 400 discos. También se calculó la función de distribución radial $g(r)$, y con el algoritmo de dinámica molecular, el desplazamiento cuadrático medio para ver la relación de la percolación con las propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas del sistema.

16:30 - 17:00 "Implicaciones dinámicas y termodinámicas de la percolación: Modelos "Forest fire" e Ising"

Fís. Gustavo Vázquez

Maestría en Física - Facultad de Física

Universidad Veracruzana

Se darán a conocer los resultados de los problemas básicos de percolación, como son "forest fire" y el modelo de Ising realizados en el transcurso del semestre del programa cómputo científico de la maestría en física, el primero fuera de equilibrio termodinámica y el segundo en equilibrio termodinámico. "Forest fire" es un ejemplo de un sistema discreto, el cual consiste en una red cuadrada representada por árboles colocados de manera aleatoria. De acuerdo a la densidad del sistema, dependerá el tiempo de incendio del bosque. En cambio, el modelo de Ising consiste en partículas puntuales igualmente en una red cuadrada, cada una con un spin que puede tomar valores arriba o abajo produciendo una magnetización total del sistema. Dicha magnetización se va perdiendo conforme bajamos la densidad del sistema. Ambos problemas presentan una densidad crítica en la cual existe una percolación.