

TREFEMAC 2021

XVIII Taller Regional de Física Estadística y Aplicaciones a la Materia
Condensada

28 de Junio - 2 de Julio

Modalidad virtual

Comité Organizador:

- Sergio A. Cannas, IFEG-CONICET, FaMAF-UNC, Córdoba, Argentina
- Francisco A. Tamarit, IFEG-CONICET, FaMAF-UNC, Córdoba, Argentina
- Silvia Menchón, IFEG-CONICET, FaMAF-UNC, Córdoba, Argentina
- Lucas Barberis, IFEG-CONICET, FaMAF-UNC, Córdoba, Argentina
- Juan I. Perotti, IFEG-CONICET, FaMAF-UNC, Córdoba, Argentina

Comité Científico:

- Celso Manuel Aldao - Universidad Nacional de Mar del Plata
- Mario Campo - Universidad Nacional de La Pampa
- Carlos A. Condat - Universidad Nacional de Córdoba
- Marisa Alejandra Frechero - Universidad Nacional del Sur
- Tomás Sebastián Grigera - Universidad Nacional de La Plata
- Héctor O. Martín - Universidad Nacional de Mar del Plata
- Bernardo Gabriel Mindlin - Universidad de Buenos Aires
- Silvina M. Ponce Dawson - Universidad de Buenos Aires
- Verónica I. Marconi - Universidad Nacional de Córdoba
- Claudio F. Narambuena - UTN, Regional San Rafael
- Fabricio Sánchez-Varretti - UTN, Regional San Rafael
- Daniel A. Vega - Universidad Nacional del Sur
- Damián H. Zanette - Centro Atómico Bariloche

weennessAlmeira N^{1 2}, Perotti J I^{1 2}, Chacoma A², Billoni O V^{1 2}¹ *Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Universidad Nacional de Córdoba*² *Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC*

En esta charla evaluamos la robustez de la triangulación de Poisson-Delaunay en dos dimensiones frente a ataques sobre nodos basados en la centralidad de intermediación o *betweenness*. Junto con la definición estándar de esta métrica, empleamos también una aproximación de corto alcance conocida como *q-betweenness*, la cual ignora caminos de longitud mayor a q . Para valores de q finitos, los ataques producen transiciones de percolación continuas que pertenecen a la clase de universalidad de percolación aleatoria. Por el contrario, al usar el valor exacto de *betweenness* la transición se vuelve discontinua y, en el límite termodinámico, ocurre tras remover una cantidad subextensiva de nodos. Este mismo comportamiento es observado para *q-betweenness* si se permite que el valor de q escale con el tamaño de la red como $q \sim L^\alpha$, con $\alpha \lesssim 1$. Nuestros resultados sugieren que la centralidad de *betweenness* codifica información sobre la robustez de la red en todas las escalas, por lo que no puede ser aproximada mediante métricas locales sin perder efectividad en el ataque.

Contacto: Nahuel Almeida, nahu1990@gmail.com**11. Interacción de alfa-lactoalbúmina con cadenas de polielectrolitos de diversa naturaleza: un estudio mediante simulaciones computacionales**Torres P^{1 2}, Baldor S³, Quiroga E⁴, Ramirez-Pastor A J⁴, Boeris V³, Narambuena C F^{1 2}¹ *Facultad Regional San Rafael - Universidad Tecnológica Nacional*² *Grupo Bionanotecnología y Sistemas complejos. CONICET-UTN-UNSL*³ *Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas - Universidad Nacional de Rosario*⁴ *Instituto de Física Aplicada, CONICET-UNSL*

Las proteínas del suero lácteo son de gran importancia como ingredientes en la industria alimenticia debido a sus propiedades funcionales. Estas proteínas tienen la capacidad de interactuar y formar complejos con polisacáridos. El objetivo de este trabajo es estudiar la interacción entre alfa-lactoalbúmina y cadenas de polielectrolito variando el pH y la concentración de sal. El presente estudio se llevó a cabo utilizando un modelo de grano grueso para representar la proteína y el polielectrolito (PE). Se llevaron a cabo simulaciones por el método de Monte Carlo. Se realizaron cálculos a tres concentraciones de sal: 1mM, 10mM y 100mM. En primera instancia se analizó la proteína aislada y se calculó su carga neta, se encontró que para las tres concentraciones de sal el punto isoeléctrico estaba alrededor de 4.9. Luego, en segunda instancia se estudió la interacción proteína-PE. Los resultados mostraron que debido a la presencia del polielectrolito aniónico se incrementa la carga positiva de la proteína comparada a condiciones aisladas por debajo del punto isoeléctrico. El incremento de la carga positiva favorece la interacción con el PE. Además, se encontró que el aumento en la concentración de sal también favorece el incremento de la carga neta positiva de la proteína en ese rango. Se cuantificó la adsorción del PE en la superficie de la proteína con un criterio estructural el cual tiene en cuenta la formación de pares iónicos. Estos datos fueron comparados con datos experimentales que indican la formación de un complejo midiendo la turbidez de la solución como una función del pH. Aplicando el método de Monte Carlo estudiamos la interacción entre alfa-lactoalbúmina y una cadena de polielectrolito aniónico. Se observó que el polianión fue adsorbido en la proteína en un rango de pH inferior al punto isoeléctrico, es decir donde ambos tienen carga opuesta. Se encontró que la presencia del polielectrolito modifica la carga

neta de la proteína y esto se debe al mecanismo de regulación de carga el cual es evidente en el rango de interacción de las macromoléculas.

Contacto: Paola Torres, paotorres89@gmail.com

12. Comportamiento subdifusivo en moléculas de quercetina en solución

Campo M G¹, Corral G M¹

¹ *Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad Nacional de La Pampa*

Estudiamos mediante dinámica molecular ⁽¹⁾ el comportamiento estructural y dinámico del agua y de moléculas de quercetina (QU) a diferentes concentraciones de QU en solución. Analizamos en profundidad las principales características dinámicas en términos de desplazamientos cuadrados medios (MSD), y hallamos una clara evidencia de la aparición de un comportamiento subdifusivo cuando la concentración de QU aumenta. El MSD exhibe una dependencia de la ley de potencia con el tiempo ⁽²⁾ ($MSD = 6D_{eff}t^\alpha$) donde α es el exponente de difusión y D_{eff} el coeficiente de difusión efectivo, siendo $\alpha \approx 1$ en un régimen de difusión fickiano. Observamos que con el aumento de concentración de QU, las moléculas de agua tienen una suave tendencia a un comportamiento subdifusivo, mientras que las de quercetina ingresan rápidamente en un claro comportamiento subdifusivo. Además, D_{eff} disminuye para ambos tipos de moléculas con el aumento de concentración de QU. Se encuentran correlaciones entre el comportamiento dinámico y diversas características estructurales como las funciones de distribución radial, la formación de puentes de hidrógeno, y la formación de agregados de QU.

(1) Berk Hess et al. *GROMACS 4: algorithms for highly efficient, load-balanced, and scalable molecular simulation*. In: Journal of chemical theory and computation 4.3 (2008), pp. 435-447.

(2) Samuel Hanot, Sandrine Lyonnard, and Stefano Mossa. *Sub-diffusion and population dynamics of water confined in soft environments*. In: Nanoscale 8.6 (2016), pp. 3314-3325. issn: 20403372. doi: 10.1039/c5nr05853h.

Contacto: Mario Guillermo Campo, mario@exactas.unlpam.edu.ar

MARTES 29 DE JUNIO

13. Consumo de Noticias en Twitter Revela Fragmentación de Agendas Mediáticas y Polarización Persistente

Cicchini T^{1 2}, del Pozo S M^{2 3}, Balenzuela P^{3 2}, Tagliazuchi E^{3 2}

¹ *Instituto del Cálculo, UBA-CONICET*

² *Departamento de Física, FCEyN, UBA*

³ *Instituto de Física de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales CONICET- Universidad de Buenos Aires*

Entender cómo la información fluye en redes sociales resulta fundamental para comprender los procesos de formación de opinión y cómo éstos subyacen la emergencia de polarización/tribalización en las cuales las sociedades se organizan entorno a ciertas temáticas. En este trabajo, se estudia el fenómeno de consumo de noticias en Twitter como una red bipartita, para dos períodos de tiempo distintos (en años consecutivos) para usuarios y medios de Argentina. El análisis mesoscópico de la proyección de las