

Monocapas moleculares: teoría y técnicas de simulación numérica

Prof. Silvina Gatica.

Duración propuesta: 30 horas, 15 clases de 2 horas en 5 semanas

Fecha propuesta: Septiembre-Octubre de 2019

Descripción: Este curso introducirá a los estudiantes a los fenómenos que se producen cuando gases moleculares interactúan con sustratos y a una gama de métodos que se utilizan para simular dichos sistemas. Se enseñarán métodos básicos de simulaciones de Monte Carlo y Dinámica Molecular aplicados al problema de la adsorción.

Financiación solicitada: Viáticos

Programa tentativo:

Clase #	Tema
1	Orientación e introducción: ¿Qué es adsorción? Descripción y aplicaciones.
2	Fuerzas intermoleculares: interacciones interatómicas, interacciones de un átomo con la superficie. La interacción de van de Waals.
3	Transiciones de fase en sistemas bidimensionales. Ejemplos: monocapas sobre grafito, grafeno y nanotubos de carbon.
4	Repaso de mecánica estadística: entropía y temperatura, ensambles canónico y gran-canónico, ergodicidad.
5	Introducción a la dinámica molecular (MD): el algoritmo de inicialización, fuerzas, integración de las ecuaciones de movimiento, ejemplos.
6	MD a temperatura constante, termostatos.
7	Modelos de fuerzas.
8	Ejemplos: MD de un gas monoatómico en volumen. MD de un gas monoatómico sobre una superficie plana.
9	Ejemplos: MD de un gas diatómico en volumen, MD de un gas diatómico sobre una superficie plana.
10	Cinética de adsorción y selectividad.
11	Introducción al método Monte Carlo: muestreo, el método de Metrópoli, el algoritmo, desplazamientos, ejemplos.
12	MC en varios ensambles: ensamble canónico, justificación del algoritmo, ejemplos.
13	MC en varios ensambles: grand-canónico, justificación del algoritmo.
14	Ejemplos: GCMC de un gas monoatómico sobre una superficie plana.

Textos:

1- D. Frenkel and B. Smit, "Understanding Molecular Simulation", 2nd Ed., Academic Press.

2- L. Bruch, M. Cole and E. Zaremba, Physical Adsorption: Forces and Phenomena, (Dover Books on Physics) (Voy a llevar varias copias)

También se recomienda como referencia:

D. Landau and K. Binder, "Monte Carlo Simulations in Statistical Physics"; J. Haile, "Molecular Dynamics Simulation", R K Pathria and Paul D. Beale, "Statistical Mechanics" 3rd Edition, Academic Press; Duong D. Do, "Adsorption Analysis: Equilibria and Kinetics", Imperial College Pr.

Evaluación:

Los estudiantes presentarán dos proyectos individuales basados en programación y ejecución de simulaciones.