



Ministerio de Cultura y Educación  
Universidad Nacional de San Luis  
Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales  
Departamento: Física  
Area: Area Unica - Física

(Programa del año 2024)  
(Programa en trámite de aprobación)  
(Presentado el 27/09/2024 15:56:35)

### I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
() Fenómenos superficiales; Descripciones teóricas y Simulaciones de MonteCarlo	LIC.EN FISICA	015/06	2024	2° cuatrimestre

### II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
LONGONE, PABLO JESUS	Prof. Responsable	P.Adj Exc	40 Hs
RICCARDO, JULIAN JOSE	Prof. Colaborador	JTP Semi	20 Hs
DAVILA, MARA VERONICA	Prof. Co-Responsable	P.Adj Exc	40 Hs

### III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
2 Hs	2 Hs	2 Hs	2 Hs	8 Hs

Tipificación	Periodo
B - Teoria con prácticas de aula y laboratorio	2° Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
05/08/2024	15/11/2024	15	112

### IV - Fundamentación

Que el/la estudiante adquiera los conocimientos analíticos y numéricos que le permitan comprender el comportamiento de los fenómenos superficiales en el marco de la múltiple ocupación de sitios.

### V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

Aprender los conceptos teóricos básicos que permiten describir el comportamiento de los fenómenos superficiales con múltiple ocupación de sitios.  
Aprender técnicas de simulación de Monte Carlo mediante modelos de gas de red que permiten medir propiedades termodinámicas.  
Realizar programas simples de simulaciones de Monte Carlo utilizando C y C++ para abordar el problema de múltiple ocupación.  
Realizar comparaciones entre las teorías de campo medio y los resultados obtenidos mediante simulaciones de Monte Carlo.

### VI - Contenidos

Aproximaciones teóricas para sistemas sin solución exacta ( $k > 1$ ). Resolución de problemas teóricos. Prácticas sobre técnicas de Simulaciones de Monte Carlo. Comparaciones de Simulaciones Monte Carlo y Aproximaciones Teóricas.

**Unidad 1: Ciencias de superficies. Modelo de gas de red. Adsorción con múltiple ocupación de sitios: breve reseña histórica. La importancia de la múltiple ocupación de sitios.**

**Unidad 2: Modelos para estudiar adsorción de k-meros sobre sustratos homogéneas ndimensionales. Función de partición para un gas de kmeros no interactuantes en n-dimensiones. Aproximación de Bragg Williams para  $k>1$ . Teoría de Flory-Huggins de polímeros en solución. Aproximación cuasi-química para  $k>1$ .**

**Unidad 3: Simulación de Monte Carlo. Estimador y muestreo simple. Muestreo de importancia. Cadena de Markov. El algoritmo de Metropolis.**

**Unidad 4: Aplicación de la técnica de simulación de Monte Carlo. Eficiencia del método Monte Carlo. Cálculo-estimación del número  $\rho$  por medio de técnicas Monte Carlo. Ejemplos de cálculo de integrales definidas por medio del método Monte Carlo. Modelo de adsorción para moléculas diatómicas (dímeros,  $k=2$ ) con y sin interacciones laterales.**

## VII - Plan de Trabajos Prácticos

A lo largo de todo el curso los/las estudiantes realizarán en grupo prácticas de laboratorio informático, que consistirá en programar mediante C (o C++) diferentes modelos simples relacionados a la asignatura. Luego deberán realizar una comparación cuantitativa y cualitativa de resultados obtenidos mediante las simulaciones y las aproximaciones analíticas desarrolladas en el curso.

## VIII - Regimen de Aprobación

Para aprobar el curso los/las estudiantes deberán:

- Tener el 75% de asistencias a las clases teóricas-prácticas.
- Realizar un programa de simulación de Monte Carlo para un fenómeno superficial con múltiple ocupación de sitios.
- Comparar los resultados de sus simulaciones con las aproximaciones teóricas que se dictaron durante la cursada.
- Exponer en forma individual discutiendo la importancia de la simulación de Monte Carlo como herramienta de modelización y cálculo de funciones termodinámicas para los fenómenos superficiales.

## IX - Bibliografía Básica

- [1] 1-T. L. Hill, An Introduction to Statistical Thermodynamics, AddisonWesley, Reading, MA, 1960.
- [2] 2- D. Nicholson and N. G. Parsonage, Computer Simulation and the Statistical Mechanics of Adsorption Academic, London, 1982.
- [3] 3-David P. Landau and Kurt Binder, A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Second Edition, Cambridge University Press, 2005.
- [4] 4.Daan Frenkel and Berend Smit, Understanding Molecular Simulation; From Algorithms to Applications Book, Second Edition, Academic Press, New York, 2002.

## X - Bibliografía Complementaria

- [1] 1- M. DÁVILA; F. ROMÁ; J. L. RICCARDO; A. J. RAMIREZ-PASTOR, Quasi-chemical approximation for polyatomics: statistical thermodynamics of adsorption SURFACE SCIENCE; Lugar:Amsterdam; Año: 2006 p. 2011-2025
- [2] 2- P. LONGONE; M. DÁVILA; A. J. RAMIREZ-PASTOR, Isotropicnematic phase diagram for interacting rigid rods on twodimensional lattices PHYSICAL REVIEW E ; Año: 2012 vol. 85 p. 11136 – 11143

### **XI - Resumen de Objetivos**

Realizar programas mediante simulaciones de Monte Carlo utilizando C y C++ para abordar el problema de múltiple ocupación. Luego realizar comparaciones con la teorías de campo medio para fenómenos superficiales.

### **XII - Resumen del Programa**

Simulaciones de Monte carlo. Aplicaciones. Ejemplos. Teorías de Campo medio.

### **XIII - Imprevistos**

Los docentes responsables del dictado del curso realizarán las modificaciones pertinentes de fechas y modalidad de dictado de clases teóricas y prácticas, según necesidades académicas

### **XIV - Otros**

Se solicita se apruebe el presente programa por 3 (tres) años

### **ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA**

#### **Profesor Responsable**

Firma:

Aclaración:

Fecha: