

Experimentos Numéricos

Desde el advenimiento de la tecnología informática, los científicos han desarrollado métodos de simulación experimental utilizando computadoras como una nueva y poderosa herramienta con la cual se pueden analizar fenómenos difíciles de manejar o procesar mediante el método científico tradicional. Sin embargo, muchas veces se ha etiquetado a la simulación como una rama de la teoría, nada mas incorrecto.

La concepción de una simulación parte directamente de la definición de un modelo del sistema real. Dicho modelo conserva las propiedades esenciales que estamos interesados en estudiar, pero no todas las características del sistema real, disminuyendo sustancialmente el número de variables innecesarias para analizar el problema en cuestión.

Para cada tipo de problema hay

una metodología de simulación adecuada. Podemos decir *que realizar una simulación por computadora es realizar un experimento numérico controlado*, relativamente simple y barato. De hecho, con cualquier PC hogareña actual podemos realizar una simulación simple!!!

Sin embargo para sistemas mas complejos se necesitan maquinas mas rápidas y con mayor capacidad de cálculo para tener resultados en tiempos razonables.

En particular, en el LACIFO, *estamos estudiando nanosistemas con métodos estocásticos (métodos al azar)*,

haciendo uso de Mecánica Estadística para electrodepositar metales sobre diversos nanosistemas metálicos con defectos superficiales (nanohuecos) y nanoparticulas(NP) de geometría icosaédrica. Para ello utilizamos la técnica de simulación de Monte-Carlo (en honor al famoso casino europeo), con la cual se imita la dinámica de un sistema regido por leyes estocásticas, es decir por el azar. Con estas técnicas hemos sido capaces de describir la termodinámica de estos procesos. Estos nanohuecos han sido observados en el laboratorio mediante

la técnica de microscopia de efecto túnel (STM). También, es posible establecer los dife-

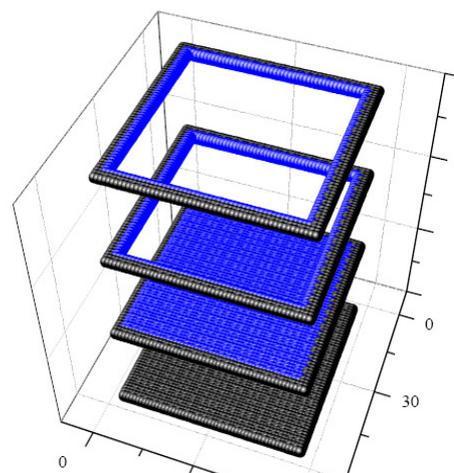


Figura 2

rentes regímenes de electrodeposición de estas nanoestructuras.

Uno de los puntos que estamos explorando es la electrodeposición sobre *nanohuecos cúbicos (NHC)*. Mediante el control del potencial electroquímico es posible llenar la nanocavidad en diversas etapas. La **figura 1** muestra un NHC de tres capas de profundidad, separadas por simplicidad visual. Los puntos son átomos. El metal A (puntos verdes) se deposita sobre los sitios de soporte (puntos negros) de menor energía. Dicho sitios son vértices y la base del NHC.

La **figura 2** muestra como el metal recubre todas las paredes interiores del NHC, induciendo la minimización de la energía del sistema.

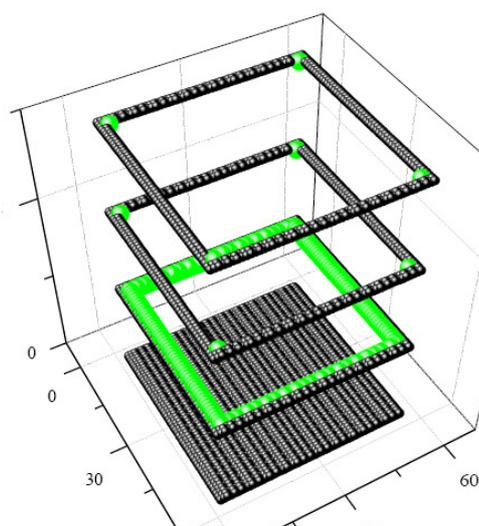


Figura 1

Otra tema de nuestro interés es explorar por simulación las propiedades de nanopartículas metálicas icosaédricas, **figura 3**. Dicho sistema se forma por la aglomeración de unos pocos cientos de átomos de oro que generan esta forma geométrica. Esta partícula posee tres clases de átomos con características diferentes, según la coordinación con sus vecinos próximos, distinguiéndose los vértices (rojo), las aristas (blancas) y las caras o facetas (negras). Una de las aplicaciones del método de Monte Carlo realizadas en el LACIFO recientemente es deposición de un metal (por ejemplo Plata) sobre dicha nanopartícula. En todos estos sistemas la energética de la interacción es la que domina su dinámica. La **figura 4** muestra la densidad de partículas de plata en función del potencial químico que controla el proceso. La primera meseta de la curva se corresponde con el llenado de las facetas (círculos negros), el segundo con el llenado de las aristas y finalmente el tercero con toda la nanopartícula llena a excepción de los vértices.

Los insertos de la **figura 4** muestran el estado de llenado de la NP, donde los puntos negros son átomos de plata y los verdes vacancias. Las líneas punteadas rojas sirven de ayuda visual. También es posible caracterizar este sistema por una medición de otras variables como la isoterma de adsorción, energía por sitios, calores isostéricos, entre otros. Lo más interesante es que estas características dependen fuertemente del tamaño de la NP.

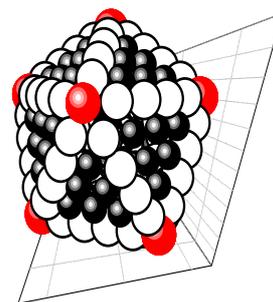


Figura 3

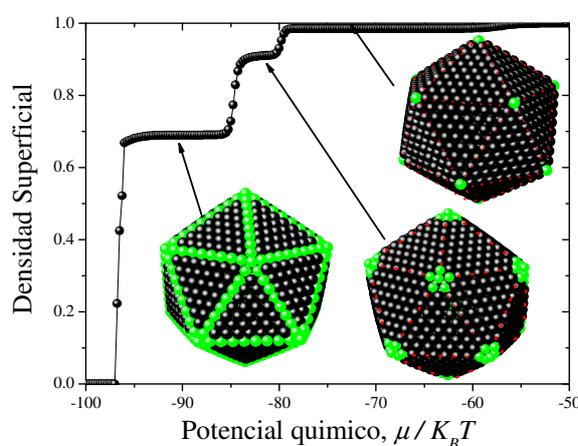


Figura 4

Colaboradores

Estos trabajos se desarrollan en colaboración con los Drs. Ezequiel Leiva y Oscar Oviedo del Instituto de Física Química (INFIQC) de la Universidad Nacional de Córdoba, y la Dra. Beatriz López de Mishima (INQUINOA-UNSE).

Herramientas de calculo

Las herramientas que se utilizan para realizar estos cálculos es una PC con un procesador Intel® i7, con 4 Gb de memoria RAM y disco duro de 1 Tb con la posibilidad de ejecutar hasta seis cálculos en simultaneo. Se tiene acceso a tres clústeres de computadoras del Departamento de Matemática y Física de la Facultad de Ciencias Químicas en la UNC., las cuales constan de tres agregados de cómputo, dos de los cuales proveen un total de alrededor de 100 procesadores cada uno.

Otros temas de interés y colaboraciones

🔗 Modelado de la cinética de la asociación de proteínas.

(Dr. Claudio Borsarelli, LACIFO)

🔗 Propagación de epidemias con modelos estocásticos fuera del equilibrio

(Dr. Miguel Angel Muñoz, Instituto Carlos V, Universidad de Granada, España)

🔗 Adsorción y difusión de mezclas de monómeros con interacciones no aditivas.

(Dr. Marcelo Pasineti, Dr. Félix Nieto, Dr. Antonio Ramírez-Pastor, Instituto de Física Aplicada, Universidad Nacional de San Luis)



CONTACTO

Dr. Alejandro Pinto
oapinto2010@gmail.com