



# Simulación de Monte Carlo: aplicaciones en ciencias de superficies

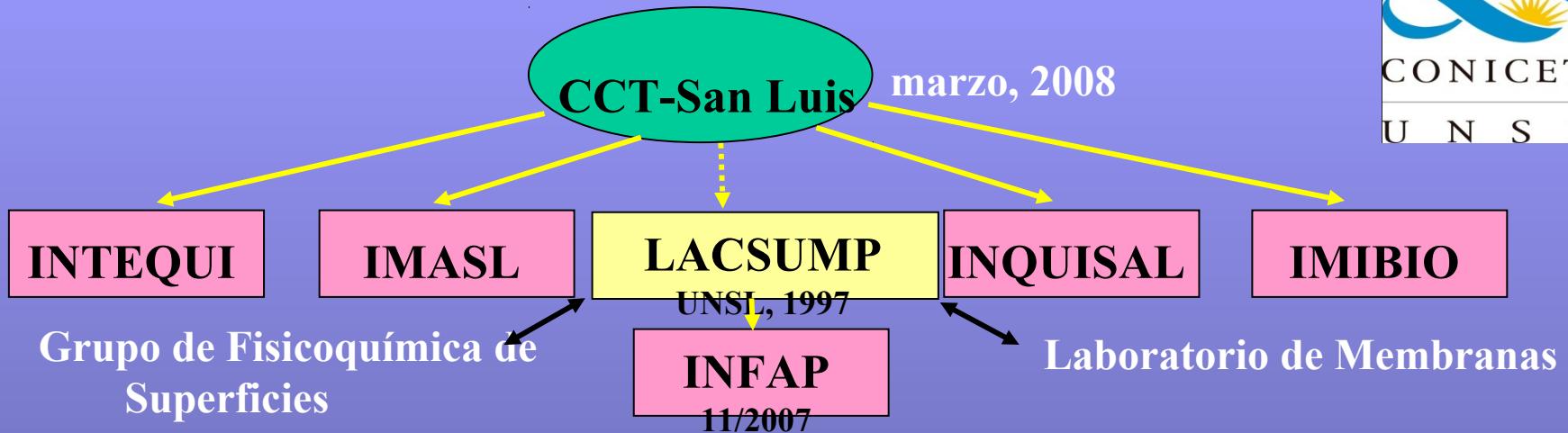
A. J. Ramirez Pastor,

Grupo de Simulación y  
Mecánica Estadística de Sistemas Complejos

*Dpto. de Física, Instituto de Física Aplicada, Universidad Nacional de  
San Luis-CONICET, Ejército de los Andes 950, 5700, San Luis,  
Argentina*

Segundo Encuentro RED COMPUMAT  
*99 Reunión Nacional de Física,  
Tandil, Argentina, setiembre 2014*

# INFAP: Breve historia



**Grupo de Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos:** Mecánica estadística de procesos superficiales. Sistemas magnéticos y vidrios. Transiciones de fase...

**Grupo de Sistemas Granulares y Redes Complejas:** Sistemas granulares y sus propiedades fundamentales, aplicaciones a la minería, almacenamiento de granos, industria farmacéutica, y otras.

**Grupo de Cinética de Procesos en Superficies e Interfases:** Cinética de la fase adsorbida, Simulación del fenómeno de rozamiento.

**Laboratorio de Fisicoquímica de Superficies:** Espectroscopías XPS, AES y TPD en Ultra Alto Vacío, microscopía nanoscópica de efecto túnel y de fuerza atómica. Aplicaciones a sistemas nanoestructurados.

**Laboratorio de Sólidos Porosos:** Desarrollo, síntesis y caracterización de sólidos porosos, procesos de adsorción y reacciones moleculares, aplicaciones a almacenamiento y separación de gases y a procesos catalíticos.

**Laboratorio de Membranas:** Desarrollo, síntesis y caracterización de membranas, procesos separativos y de filtración, aplicaciones industriales y ambientales.

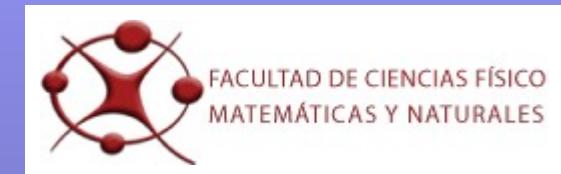
**Laboratorio de bajas temperaturas y sistemas micromecánicos**

**Laboratorio de procesos biotecnológicos**



Universidad Nacional de San Luis

Facultad de Ciencias  
Físico-Matemáticas y Naturales



Departamento de Física

Grupo de Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos

Doctorado de Física (CONEAU, A)

Maestría en Superficies y Medios Porosos  
(CONEAU, A)

En el ámbito de la Mecánica Estadística....

**Teoría** (lápiz y papel): Campo medio, Cuasi-química, Renormalización, Teoría de “clusters”, etc.

**Simulación computacional:**

Como *experimento de máquina*, a fin de corroborar resultados teóricos.

Como una herramienta que nos permita abordar sistemas “no alcanzables” vía “lápiz y papel”.

# Cluster de Alta Perfomance Baco

30 PC con CPU tipo Intel Core 2 QUAD4 Q9550 y más de 40 PC con CPU tipo Intel i7-3370 / 2600. Total más de 500 nodos actualmente operativos en el CLUSTER. SERVER con CPU tipo Intel Core 2 QUAD4 Q9550 con Disco Redundante de 1TB.

Todas las unidades están bajo Sistema Operativo Scientific Linux 5.0 y con sistema de gestión de colas de procesos (mecanismo de checkpoint y prioridad) llamado Condor



Responsable: Ing Diego Gabutti, Profesional CONICET

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

**L 1:** “Termodinámica estadística en sistemas con múltiple ocupación de sitios”

**Integrantes:** Dr. José Luis RICCARDO, Inv. Independiente CONICET

Dr. Federico J. ROMA, Inv. Adjunto CONICET

Dr. Pedro M. PASINETTI, Inv. Adjunto CONICET

Dra. Mara V. DAVILA, Inv. Asistente CONICET

Mg. Fabricio SÁNCHEZ , Doctorando UNSL

**Mg.** Guillermo GARCIA, Doctorando UNSL

Lic. Gonzalo DOS SANTOS, Becario Doctoral CONICET

Lic. Juan I. LOPEZ, Becario Doctoral



## Función de partición

$$Q(M, N, T) = \Omega(M, N) \exp(-\beta N E_k)$$

## Energía libre

$$\beta F(M, N, c, T) = -\ln Q(M, N, c, T) = -\ln \Omega(M, N, c) + \beta N \cdot E_k$$

## Funciones Termodinámicas

$$\mu = \left( \frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T, M}$$

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_{M, N}$$

## Monómeros



## $k$ -meros



# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

Tesis de Maestría del Lic. Guillermo García, en el tema “Efecto de las interacciones laterales sobre la adsorción en multicapas”. Universidad Nacional de San Luis. 2009.

Tesis de Maestría del Ing. Fabricio Sánchez, en el tema “Efecto de la heterogeneidad superficial sobre la adsorción en multicapas”. Universidad Nacional de San Luis. 2009.

Tesis de Doctorado en Física de la Lic. Mara Dávila, en el tema “Termodinámica de adsorción y transiciones de fase en modelos de gas de red con múltiple ocupación de sitios y heterogeneidad superficial”. Universidad Nacional de San Luis. Junio 2010.

Tesis de Licenciatura en Física (Universidad Nacional de San Luis) del Auxiliar en Física Gonzalo Dos Santos. Tema “Adsorción de varillas rígidas alineadas en 2D: teoría y simulación de Monte Carlo”. Abril 2012.

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

**“Critical behavior of repulsive dimers at 2/3 monolayer coverage”**, F. Romá, J. L. Riccardo, A. J. Ramirez-Pastor, Physical Review B, 77, 195401, 2008 (cond-mat/0612301). El trabajo fue seleccionado para aparecer en la portada de Physical Review B, como parte del Kaleidoscope correspondiente al mes de Mayo de 2008.

**“Statistical Thermodynamics and Surface Phase Transitions of Interacting Particles Adsorbed on One-Dimensional Channels Arranged in a Triangular Cross-Sectional Structure”**, P. M. Pasinetti, F. Romá, J. L. Riccardo and A. J. Ramirez-Pastor, Invited Paper in SOLID STATE PHENOMENA, Vol. 150, pp. 73-100, 2009.

**“Fractional Statistical Theory and Use of Quasi-Chemical Approximation for Adsorption of Interacting  $k$ -mers”**, M. Dávila, J. L. Riccardo, A. J. Ramirez-Pastor, Surface Science, 603, 683-689, 2009.

**“Configurational Entropy of Adsorbed Rigid Rods: Theory and Monte Carlo Simulations”** P. M. Centres and A. J. Ramirez-Pastor, Physica A, 388, 2001-2019, 2009.

**“A Simple Statistical Mechanical Approach for Studying Multilayer Adsorption of Interacting Rigid Polyatomics”**, G. D. García, F. O. Sánchez-Varretti, F. Romá, A. J. Ramirez-Pastor, Surface Science, 603, 980-991, 2009.

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

**“Fractional statistics description applied to adsorption of alkane binary mixtures in zeolites”, M. Dávila, J. L. Riccardo, A. J. Ramirez-Pastor, J. Chem. Phys., 130, 174715, 2009.**

**Multilayer Adsorption of Polyatomic Species on Homogeneous and Heterogeneous Surfaces, , F. O. Sánchez-Varretti, G. D. García, A. J. Ramirez-Pastor, F. Romá, J. Chem. Phys., 130, 194711, 2009. (cond-mat/08105531). El artículo fue seleccionado para ser publicado por el Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology (American Institute of Physics and the American Physical Society), vol. 19, issue 2, 2009.**

“

**Surface Area Measurements with Linear Adsorbates: An Experimental Comparison of Different Theories”, D. S. Rawat, A. D. Migone, J. L. Riccardo, A. J. Ramirez-Pastor and F. J. Romá, Langmuir, 25, 9227-9231, 2009.**

**“Configurational entropy in generalized lattice-gas models”, A. J. Ramirez-Pastor, F. Romá, J. L. Riccardo, Invited Review in International Journal of Modern Physics B, 23, 4589-4627, 2009.**

**“Exact statistical thermodynamics of alkane binary mixtures in zeolites: new interpretation of the adsorption preference reversal phenomenon from multisite-occupancy theory”, M. Dávila, J. L. Riccardo, A. J. Ramirez-Pastor, Chem. Phys. Lett., 477, 402-405, 2009.**

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

**“Critical behavior of interacting monomers on one-dimensional channels arranged in a triangular cross-sectional structure: attractive nearest interactions along the channels”, P. M. Pasinetti, F. Romá, J. L. Riccardo, A. J. Ramirez-Pastor, J. of Chemical Physics, 132, 054111, 2010.**

**New Isotherm for Multisite Occupancy Adsorption of Long Straight Rigid Rods, D. A. Matoz-Fernandez, D. H. Linares, A. J. Ramirez-Pastor, Langmuir, 27, 2456, 2011.**

**Modeling Multilayer Adsorption of Interacting Polyatomic Species on Heterogeneous Surfaces, F. O. Sánchez-Varretti, G. D. García, A. J. Ramirez-Pastor, Physica A, 391, 1158-1171, 2012.**

**1. Monte Carlo study of binary mixtures adsorbed on square lattices, G. D. García, F. O. Sánchez-Varretti, F. Bulnes, A. J. Ramirez-Pastor, Surface Science, 602, 83-90, 2012.**

**First-order phase transitions in repulsive rigid k-mers on two-dimensional lattices, P. M. Pasinetti, F. Romá and A.J. Ramirez-Pastor, Journal of Chemical Physics, 136, 064113, 2012.**

**Statistical thermodynamics of long straight rigid rods on triangular lattices: Nematic order and adsorption thermodynamic functions, D. A. Matoz-Fernandez, D. H. Linares, A. J. Ramirez-Pastor, Langmuir, 28, 12788, 2012.**

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

**Adsorption of self-assembled rigid rods on two-dimensional lattices**, L. G. Lopez, A. J. Ramirez-Pastor, Langmuir, 28, 14917, 2012.

**“Critical behavior of attractive k-mers on two-dimensional lattices: a study from quasi-chemical approximation”**, P. Longone, M. Dávila, J. L. Riccardo, A. J. Ramirez-Pastor, Adsorption, 19, 11 2013.

**Fractional Statistical Theory of Adsorption Applied to Protein Adsorption**, E. Quiroga, P. M. Centres, N. A. Ochoa, A. J. Ramirez-Pastor, Journal of Colloid & Interface Science, 390, 183, 2013.

**Statistical thermodynamics of molecules with multiple adsorption states: application to protein adsorption**, E. Quiroga, A. J. Ramirez-Pastor, Chemical Physics Letters, 556, 330, 2013.

**Fractional statistics description applied to protein adsorption: effects of excluded surface area on adsorption equilibria**, E. Quiroga, J. L. Riccardo, and A. J. Ramirez-Pastor, Chem. Phys. Lett., 585, 189-192, 2013.

Adsorption preference reversal phenomenon from multisite-occupancy theory for two-dimensional lattices , D. A. Matoz-Fernandez, A. J. Ramirez-Pastor, Chemical Physics Letters, 610, 331, 2014.

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

**L 2: “Cinética y propiedades termodinámicas de sistemas desordenados”**

**Integrantes:** Dr. Félix D. NIETO, Inv. Independiente CONICET

Dra. Valeria C. CORNETTE, Inv. Asistente CONICET

Dr. Oscar A. PINTO, Inv. Asistente CONICET

Dr. Paulo CENTRES, Investigador UNSL

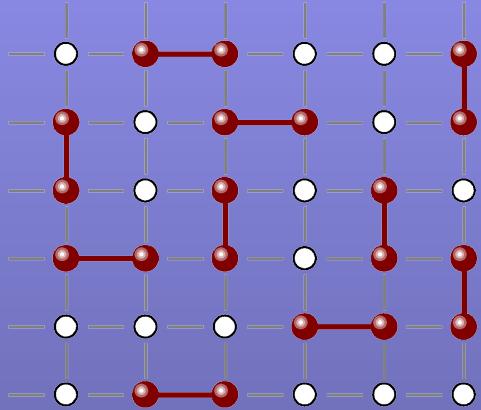
Dra. M. Cecilia GIMENEZ, Inv. Adjunta CONICET

Lic. Mariela GONZALEZ, Becaria Doctoral CONICET

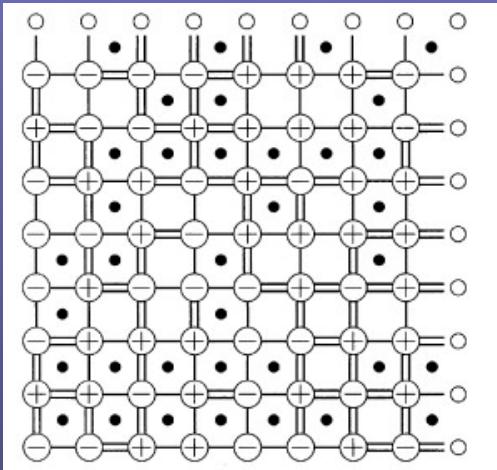
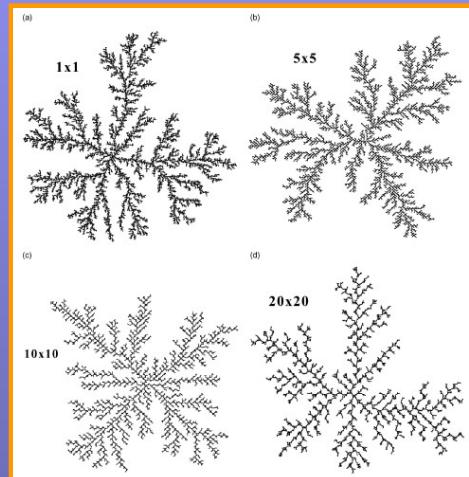
Al. Lucía S. RAMIREZ, Tesista grado UNSL

# Sistemas bajo estudio

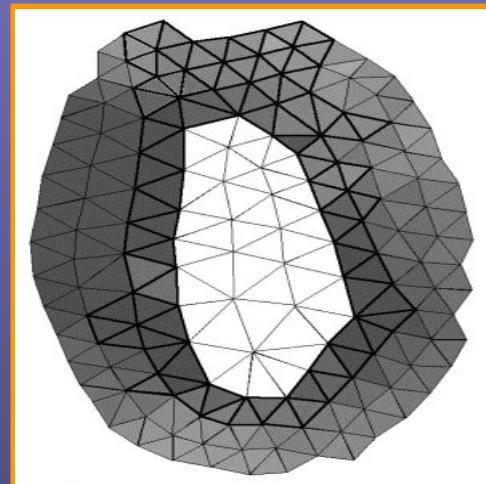
Percolación de k-meros



Crecimiento, deposición



Sistemas heterogéneos



# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

Tesis de Licenciatura en Física (Universidad Nacional de San Luis) del auxiliar Diego Pérez en el tema " Estudio del estado fundamental del modelo de vidrio de espín de Edwards-Anderson, para diferentes distribuciones de enlaces discretas ". Diciembre 2009.

Tesis de Licenciatura en Física (Universidad Nacional de San Luis) del auxiliar Guillermo Lencina en el tema “Diagrama de Fase de Percolación Sitio-Enlace para un Sistema de k-meros lineales”. Diciembre 2009.

Tesis de Licenciatura en Física (Universidad Nacional de San Luis) del Auxiliar en Física Romina Torres Astorga. Tema “Percolación de especies poliatómicas en presencia de impurezas”. Mayo 2012.

Tesis de Doctorado en Física de la Lic. Valeria Cornette, en el tema “Adsorción y difusión en superficies fractales”. Universidad Nacional de San Luis. Marzo 2009.

Tesis de Doctorado en Física del Lic. Alejandro Pinto, en el tema “Adsorción y difusión de partículas con interacciones no-aditivas”. Universidad Nacional de San Luis. Marzo 2011.

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

**“Adsorption thermodynamics of a lattice-gas model with non-additive lateral interactions”, O. A. Pinto, A. J. Ramirez-Pastor, F. Nieto, Surface Science, 602, 1763-1769, 2008.**

**“Percolation on heterogeneous surfaces under equilibrium conditions”, M. C. Giménez, A.J. Ramirez-Pastor and F. Nieto, Physica A, 387, 6526-6534, 2008.**

**“The ground state energy of the Edwards-Anderson spin glass model with a parallel tempering Monte Carlo algorithm”, F. Romá, S. Risau-Gusman, A. J. Ramirez-Pastor, F. Nieto, and E. E. Vogel Physica A, 388, 2821-2838, 2009.**

**Adsorption of interacting monomers on percolating clusters of polyatomic species V. Cornette, A. J. Ramirez-Pastor and F. Nieto, Physica A, 388, 4387-4396, 2009.**

**“Percolation of interacting particles on heterogenous surfaces”, M. C. Giménez, A. J. Ramirez-Pastor, F. Nieto, Physica A, 389, 1521-29, 2010.**

**“Adsorption thermodynamics of a lattice-gas model with non-additive lateral interactions on triangular and honeycomb lattices”, O. A. Pinto, A. J. Ramirez-Pastor, F. Nieto, Physica A, 389, 3456-3464, 2010.**

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

**Monte Carlo study of percolation on disordered triangular lattices**, P. M. Centres, F. Bulnes, A. J. Ramirez-Pastor, Physica A, 389, 4688-4695, 2010.

**Ground-state topology of the Edwards-Anderson pm J spin glass model**, F. Romá, S. Risau-Gusman, A. J. Ramirez-Pastor, F. Nieto, E. E. Vogel, Physical Review B, 82, 214401, 2010.

**“Random sequential adsorption of polyatomic species with the presence of impurities**, V. Cornette, A. J. Ramirez-Pastor, F. Nieto, Physica A, 390, 671, 2011.

**Lattice-gas model of non-additive interacting particles on nanotube bundles**, O.A. Pinto, P. M. Pasinetti, F. Nieto and A.J. Ramirez-Pastor, Journal of Chemical Physics, 134, 064702, 2011.

**Random sequential adsorption of polyatomic species on fractal substrates**, V. Cornette, A. J. Ramirez-Pastor, F. Nieto, Phys. Rev. E, 83, 051119, 2011.

**Statistical thermodynamics of straight rigid rods with non-additive lateral interactions: Theory and Monte Carlo simulations**, O. A. Pinto, F. Nieto, A. J. Ramirez-Pastor, Phys. Rev. E, 84, 061142, 2011.

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

**Ground-state energy and entropy of the two-dimensional Edwards-Anderson spin-glass model with different bond distributions**, D. J. Perez-Morelo, A. J. Ramirez-Pastor, F. Roma, Physica A, 391, 937-947, 2012.

**Percolation of aligned rigid rods on two-dimensional square lattices**, P. Longone, P. M. Centres, A. J. Ramirez-Pastor, Physical Review E, 85, 011108, 2012.

**Configurational entropy of systems with non-additive lateral interactions**, O. A. Pinto, A. J. Ramirez-Pastor, F. Nieto, Physica A, 391, 6390, 2012.

**Nonmonotonic size dependence of the critical concentration in 2D percolation of straight rigid rods under equilibrium conditions**, D. A. Matoz-Fernandez, D. H. Linares, A. J. Ramirez-Pastor, Eur. Phys. J. B, 85, 296, 2012 .

**“Percolation of dimers on a square lattice**, W. Lebrecht, J. Valdés, E. E. Vogel, F. Nieto, A. J. Ramirez-Pastor, Physica A, 392, 2013, 149 .

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

**“Percolation of polyatomic species on a simple cubic lattice”,** F. O. Sánchez-Varretti, G. D. García, P. M. Centres, A. J. Ramirez-Pastor, European Physical Journal B, 86, 403, 2013.

**Diffusion-limited aggregates grown on non-uniform substrates,** V. Cornette, P.M. Centres, A. J. Ramirez-Pastor and F. Nieto, Physica A, 392, 5879-5887, 2013.

**Site-bond percolation on triangular lattices: Monte Carlo simulation and analytical approach,** M.I. Gonzalez, P. Centres, W. Lebrecht, A.J. Ramirez-Pastor and F. Nieto, Physica A, 392, 6330-6340, 2013.

**Detailed mean field approximation in adsorption on nanoparticles,** O. A. Pinto, B. Lopez de Mishima, M. Dávila, A.J. Ramirez-Pastor, O. A. Oviedo, E. P. M. Leiva, Physical Review E, 88, 062407, 2013. El artículo fue seleccionado para aparecer en la portada de Physical Review E, como parte del Kaleidoscope correspondiente al mes de enero de 2013.

**Bond dimer percolation on square lattices,** W. Lebrecht, J. Valdés, E. E. Vogel, F. Nieto and A.J. Ramirez-Pastor, Physica A, 398, 234, 2014

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

**L 3:** “Adsorción y procesos de transporte de especies adsorbidas sobre superficies sólidas heterogéneas”

**Integrantes:** Dr. Fernando Manuel BULNES, Inv. Adjunto CONICET

Dr. Marcelo PASINETTI, Inv. Adjunto CONICET

Dra. María Cecilia GIMENEZ, Inv. Adjunto CONICET

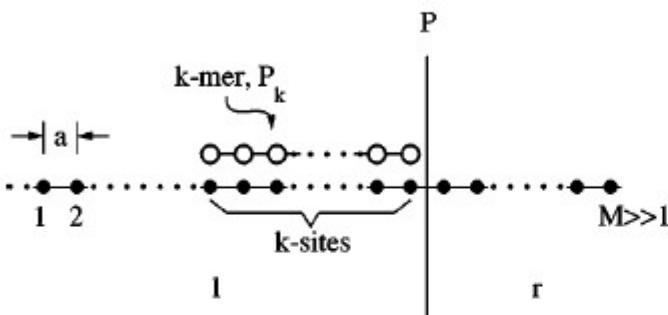
Dr. Roberto José FACCIO, Inv. UNSL

Lic. Mario RODRIGUEZ, Doctorando UNSL

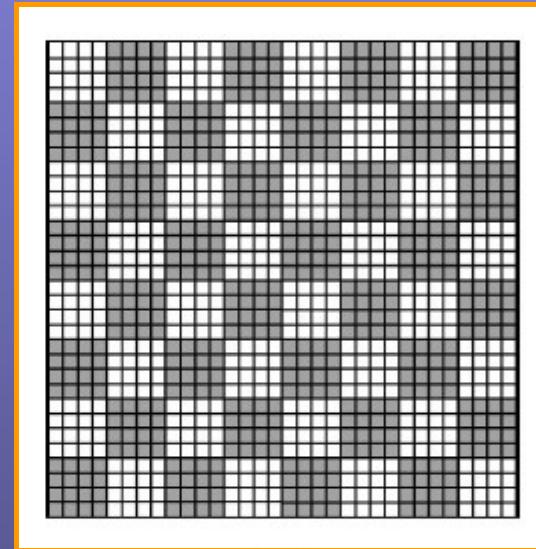
# PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”

L 3: “Adsorción y procesos de transporte de especies adsorbidas sobre superficies sólidas heterogéneas”

## Sistemas bajo estudio



Difusión superficial



Caracterización de sistemas heterogéneos

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

Tesis de Licenciatura en Física (Universidad Nacional de San Luis) del auxiliar Pablo Rinaldi en el tema "Adsorción de mezclas binarias sobre redes bidimensionales con distintas geometrías". Junio 2006.

Tesis de Licenciatura en Física (Universidad Nacional de San Luis) del auxiliar Paulo Centrés en el tema "Comportamiento de escaleo en adsorción sobre sustratos heterogéneos bivariados y determinación de la topografía energética superficial". Diciembre 2007.

Tesis de Licenciatura en Física (Fac. Cs. Fco. Mat. y Nat., Universidad Nacional de San Luis) del auxiliar Marcelo Perarnau en el tema “Adsorción de partículas interactuantes sobre redes diluidas de enlaces. Mayo 2008.

Tesis de Doctorado en Física del Lic. Paulo Centres, en el tema “Adsorción superficial en presencia de heterogeneidad energética y geométrica”. Universidad Nacional de San Luis. Diciembre 2010.

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

**“Monte Carlo study of multicomponent adsorption on triangular lattices”**, P. Rinaldi, F. Bulnes, A. J. Ramirez-Pastor and G. Zgrablich, Surface Science, 602, 1783-1794, 2008.

**“A Model for Underpotential Deposition in the Presence of Anions”**, M. C. Giménez, A. J. Ramirez-Pastor, E. P. M. Leiva, Journal of Chemical Physics, 132, 184703, 2010.

**“Critical behavior of repulsively interacting particles adsorbed on disordered triangular lattices”**, M. Perarnau, P. M. Centres, F. Bulnes, A. J. Ramirez-Pastor, Physical Chemistry Chemical Physics, 12, 13280-13286, 2010.

**Determination of the energetic topography of bivariate heterogeneous surfaces from adsorption isotherms**, P. M. Centres, F. Bulnes, G. Zgrablich, A. J. Ramirez-Pastor, Adsorption, 17, 403, 2011.

**Adsorption on Heterogeneous Surfaces with Simple Topographies**, P. M. Centres, M. A. Perarnau, F. Bulnes, J. L. Riccardo, A. J. Ramirez-Pastor, Adsorption Science and Technology, 29, 613-627, 2011.

**Monte Carlo study of binary mixtures adsorbed on square lattices**, G. D. García, F. O. Sánchez-Varretti, F. Bulnes, A. J. Ramirez-Pastor, Surface Science, 602, 83-90, 2012.

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

## **L 4: “Transiciones orientacionales en superficie”**

**Integrantes:** Dr. Daniel LINARES, Investigador UNSL

Dr. Daniel A. MATOZ, Becario Posdoc CONICET

Dr. Pablo LONGONE, Becario Posdoc CONICET

Lic. Luis LOPEZ, Becario Doctoral CONICET

Lic. Graciela GOMEZ, Maestrando UNSL



A LETTERS JOURNAL EXPLORING  
THE FRONTIERS OF PHYSICS

April 2007

EPL, 78 (2007) 20003  
doi: 10.1209/0295-5075/78/20003

[www.epljournal.org](http://www.epljournal.org)

# On the orientational ordering of long rods on a lattice

A. GHOSH<sup>(a)</sup> and D. DHAR<sup>(b)</sup>

*Department of Theoretical Physics, Tata Institute of Fundamental Research - Homi Bhabha Road, Mumbai 400 005, India*

received 13 November 2006; accepted in final form 27 February 2007  
published online 27 March 2007

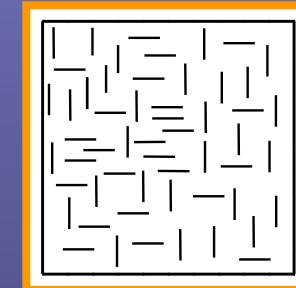
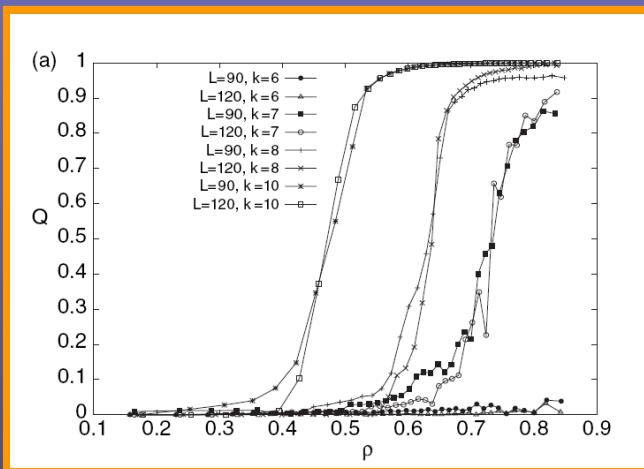
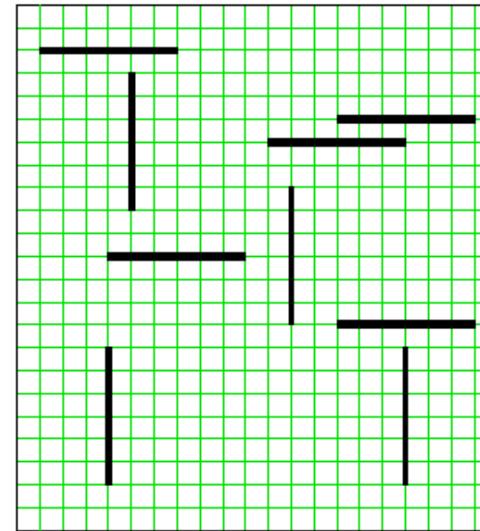
PACS 05.50.+q – Lattice theory and statistics (Ising, Potts, etc.)  
PACS 64.70.Md – Transitions in liquid crystals

**Abstract** – We argue that a system of straight rigid rods of length  $k$  on a square lattice with only hard-core interactions shows two phase transitions as a function of density  $\rho$  for  $k \geq 7$ . The system undergoes a phase transition from the low-density disordered phase to a nematic phase as  $\rho$  is increased from 0 at  $\rho = \rho_{c1}$ , and then again undergoes a re-entrant phase transition from the nematic phase to a disordered phase at  $\rho = \rho_{c2} < 1$ .

Copyright © EPLA, 2007

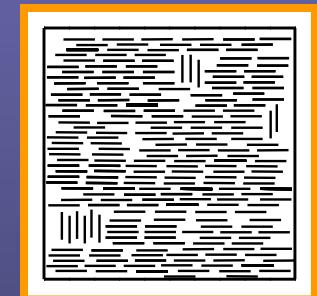


# Sistema



Baja densidad

Alta densidad





PHYSICAL REVIEW E 79, 021505 (2009)

## Structure and phase diagram of self-assembled rigid rods: Equilibrium polydispersity and nematic ordering in two dimensions

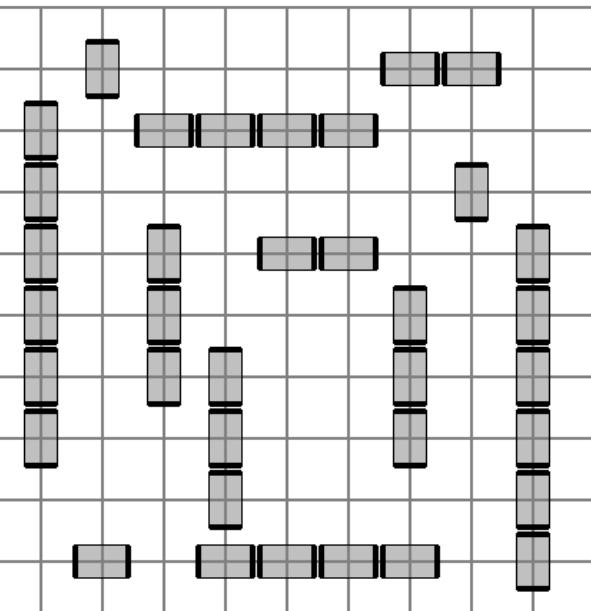
J. M. Tavares,<sup>1,2</sup> B. Holder,<sup>1</sup> and M. M. Telo da Gama<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>*Centro de Física Teórica e Computacional, Universidade de Lisboa, Avenida Professor Gama Pinto 2, P-1649-003 Lisbon, Portugal*

<sup>2</sup>*Instituto Superior de Engenharia de Lisboa, Rua Conselheiro Emídio Navarro 1, P-1950-062 Lisbon, Portugal*

<sup>3</sup>*Departamento de Física, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, Campo Grande, P-1749-016 Lisbon, Portugal*

(Received 15 December 2008; published 20 February 2009)



$$H = -w \sum_{\langle i,j \rangle} |\vec{r}_{ij} \cdot \vec{\sigma}_i| |\vec{r}_{ji} \cdot \vec{\sigma}_j|, \quad (1)$$

where  $\langle i,j \rangle$  indicates a sum over NN sites;  $w$  represents the NN lateral interaction between two neighboring  $i$  and  $j$ , which are aligned with each other and with the intermolecular vector  $\vec{r}_{ij}$ ; and  $\vec{\sigma}_i$  is the occupation vector with  $\vec{\sigma}_i = 0$  if the site  $i$  is empty,  $\vec{\sigma}_i = \hat{x}$  if the site  $i$  is occupied by a particle with orientation along the  $x$ -axis, and  $\vec{\sigma}_i = \hat{y}$  if the site  $i$  is occupied by a particle with orientation along the  $y$ -axis.

Llamamos varilla o filamento autoensamblado a cada cluster lineal o secuencia de monómeros ligados.

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

Tesis de Licenciatura en Física (Fac. Cs. Fco. Mat. y Nat., Universidad Nacional de San Luis) del auxiliar Daniel Matoz en el tema “Adsorción en monocapa de moléculas poliatómicas no interactuantes”. Marzo 2010.

Tesis de Licenciatura en Física (Fac. Fco. Mat. y Nat., Universidad Nacional de San Luis) de Pablo Longone en el tema “Efecto de las interacciones laterales sobre la transición isotrópico-nemática en un sistema de barras rígidas adsorbidas sobre redes cuadradas ”. Junio 2010.

Tesis de Licenciatura en Biología Molecular (Fac. Qca. Bqca. Farmacia., Universidad Nacional de San Luis) del al. Luis López en el tema “Estudio de los efectos del abarrotamiento molecular sobre la formación de heterodímeros mediante simulación de Monte Carlo ”. Junio 2010.

Tesis de Doctorado en Física (Fac. Cs. Fco. Mat. y Nat., Universidad Nacional de San Luis) del Lic Daniel Matoz en el tema “Comportamiento crítico de segmentos lineales adsorbidos sobre una red ”. Marzo 2013.

Tesis de Doctorado en Física (Fac. Cs. Fco. Mat. y Nat., Universidad Nacional de San Luis) del Lic. Pablo Longone en el tema “Estructura y diagrama de fases de moléculas poliatómicas interactuantes adsorbidas en 2D y 3D ”. Marzo 2014.

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

**Entropy-Driven Phase Transition in a System of Long Rods on a Lattice**, D. H. Linares, F. Romá, A. J. Ramirez-Pastor, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiments, P03013, 2008 (cond-mat/07124361).

**“Determination of the Critical Exponents for the Isotropic-Nematic Phase Transition in a System of Long Rods on Two-dimensional Lattices: Universality of the Transition”**, D. A. Matoz-Fernandez, D. H. Linares, A. J. Ramirez-Pastor, Europhysics Letters, 82, 50007, 2008 (cond-mat/07080395).

**“Critical Behavior of Long Straight Rigid Rods on Two-dimensional Lattices: Theory and Monte Carlo simulations”**, D. A. Matoz-Fernandez, D. H. Linares, A. J. Ramirez-Pastor, Journal of Chemical Physics, 128, 214902, 2008 (cond-mat/08043614).

**“Critical Behavior of Long Linear k-mers on Honeycomb Lattices”**, D. A. Matoz-Fernandez, D. H. Linares, A. J. Ramirez-Pastor, Physica A, 387, 6513-6525, 2008.

**“Critical exponents and universality for the isotropic-nematic phase transition in a system of self-assembled rigid rods on a lattice “**, L. G. López, D. H. Linares, A. J. Ramirez-Pastor, Phys. Rev. E, 80, 040105(R), 2009 (cond-mat/09040269). **El artículo fue seleccionado para ser publicado por el Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology (American Institute of Physics and the American Physical Society), sección Supramolecular and Biochemical Assembly, vol. 20, issue 18, 2009.**

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

**“Effect of the lateral interactions on the critical behavior of long straight rigid rods on two-dimensional lattices”, P. Longone, D. H. Linares, A. J. Ramirez-Pastor, Papers in Physics, 1, 010005, 2009**

**Critical behavior of attractive rigid rods on two-dimensional lattices**, P. Longone, D. H. Linares, A. J. Ramirez-Pastor, Journal of Chemical Physics, 132, 184701, 2010.

**“Critical behavior of self-assembled rigid rods on triangular and honeycomb lattices”, L. G. López, D. H. Linares, A. J. Ramirez-Pastor, Journal of Chemical Physics, 133, 134702, 2010. El artículo fue seleccionado para ser publicado por el Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology (American Institute of Physics and the American Physical Society), sección Structural Properties, vol. 22, issue 16, 2010.**

**Phase diagram of self-assembled rigid rods on two-dimensional lattices: Theory and Monte Carlo simulations**, L. G. López, D. H. Linares, A. J. Ramirez-Pastor, S. A. Cannas, Journal of Chemical Physics, 133, 134706, 2010. El artículo fue seleccionado para ser publicado por el Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology (American Institute of Physics and the American Physical Society), sección Supramolecular and Biochemical Assembly, vol. 22, issue 16, 2010.

**Isotropic-nematic phase diagram for interacting rigid rods on two-dimensional lattices**, P. Longone, M. Dávila, A. J. Ramirez-Pastor, Physical Review E, 85, 011136, 2012.

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

**Comment on: Effect of polydispersity on the ordering transition of adsorbed self-assembled rigid rods**, L. G. López, D. H. Linares, A. J. Ramirez-Pastor, Physical Review E, 85, 053101, 2012.

**Critical behavior of self-assembled rigid rods on two-dimensional lattices: Bethe-Peierls approximation and Monte Carlo simulations**, L. G. López, D. H. Linares, A. J. Ramirez-Pastor, D. Stariolo, and S. A. Cannas, J. Chem. Phys. 138, 234706 (2013).

# Adsorción en metal-organic frameworks (MOFs)

Dra. María Celeste Bernini, Inv. Asistente CONICET

## Members

## Snurr Research Group

Professors

Postdocs

Grad Students

Undergrads

Visitors

Alumni



Celeste Bernini

BSc, Chemistry, Universidad Nacional de San Luis, Argentina, 2005

PhD, Chemistry, Universidad Nacional de San Luis, Argentina, 2009

Simulations of uptake and release of drug molecules in bio-compatible metal organic frameworks.

## Music - Multipurpose Simulation Code

### Overview

Music is the name of our general purpose molecular simulation code. It has been designed from the ground-up as an object-oriented molecular simulation code, intended both for users and developers. The object-orientedness results in faster development - new features can be easily "plugged in" to the code with only minimal effort. It is written in Fortran 90, the widely used scientific programming language. Look at the bottom of this page for information about [Obtaining the Code](#) and the download link.

We currently use Music for simulation of diffusion and adsorption in zeolites. It has also been used for liquid and gas simulations as well, and may be easily extended for solid simulations. It includes such forcefield elements as 12-6 Lennard-Jones and Buckingham potentials. Coulombic interactions are handled with Ewald summations and also smooth cutoff schemes. Molecules may be fully flexible, including bond vibration, bond angles, bond torsion, and intramolecular repulsion. Another strong point of music is that it can combine MD and MC simulations easily to create hybrid sampling schemes. (e.g., Hybrid Monte Carlo)

**Screening of bio-compatible Metal Organic Frameworks as potential drug-carriers by using CB-GCMC simulations: the case of ibuprofen as a model drug,** Maria C. Bernini, David Fairén-Jimenez, Marcelo Pasinetti,

Antonio J. Ramirez-Pastor and Randall Q. Snurr, *J. Mater. Chem. B*, 2, 766, 2014.

# TAREAS EN EJECUCIÓN

Tesis de Maestría de la Lic. Graciela Gómez, en el tema “Estudio de la transición de fase nemática-isotrópica experimentada por especies bidimensionales en superficies”.

Tesis de Doctorado en Física del Lic. Guillermo García, en el tema “Adsorción secuencial irreversible y percolación de especies poliatómicas sobre redes euclídeas y fractales”.

Tesis de Doctorado en Física del Ing. Fabricio Sánchez, en el tema “Adsorción de moléculas poliatómicas en los regímenes de monocapa y multicapa. Estudio teórico y de simulación de Monte Carlo”.

Tesis de Doctorado en Física del Lic. Luis López, en el tema “Diagrama de fases para un sistema de monómeros con interacciones asimétricas depositados sobre los sitios de una red y en el continuo: autoensamblado, estructuras y transiciones de fase”.

Tesis de Doctorado en Física del Lic. Gonzalo Dos Santos, en el tema “Estudio de sistemas conformados por cadenas poliméricas rígidas y flexibles: comportamiento crítico, estructuras y transiciones de fase”.

Tesis de Doctorado en Física del Lic. Mario Rodríguez, en el tema “Propiedades dinámicas y de equilibrio en sistemas de moléculas poliatómicas adsorbidas sobre superficies heterogéneas”.

Tesis de Doctorado en Física de la Lic. Mariela González, en el tema “Percolación explosiva en presencia de múltiple ocupación de sitios”.

Tesis de Doctorado en Física del Lic. Juan I. López, en el tema “Adsorción de mezclas de gases simples y poliatómicos”.

# **PROYECTO: “Simulación y Mecánica Estadística de Sistemas Complejos”**

## **FINANCIAMIENTO**

Proyecto P 3-2-2000 “Simulación y mecánica estadística de sistemas complejos”, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas y Naturales. Universidad Nacional de San Luis. San Luis. 2012-2015, Monto recibido: Aproximadamente \$ 20000 (pesos) por año.

Proyecto PICT-2010-1466 “Mecánica Estadística de Sistemas Complejos: Aplicaciones a Física de Superficies y Magnetismo”. 2011-2013. Monto: \$ 330.000 (pesos). Entidad que financia: ANPCyT (PICT BICENTENARIO).

Proyecto PIP 112-201101-00615 “Mecánica Estadística de Sistemas Complejos en Presencia de Heterogeneidad: Aplicaciones a Física de Superficies y Magnetismo”. 2012-2014. Monto: \$ 300000 (pesos). Entidad que financia: CONICET, Argentina.

Proyecto PICT-2013-1678 “Mecánica Estadística de Sistemas Complejos y sus Aplicaciones a Física de Superficies”. 2014-2016. Monto: \$ 525.000 (pesos). Entidad que financia: ANPCyT, Argentina.

Proyecto 1100156 “Interactions among magnetic nanocylinders and topics in statistical physics”. Entidad que financia: FONDECYT, Chile. Monto recibido: Aproximadamente U\$ 3500 (dólares) por año.

# Muchas gracias!!!



100 RNF, San Luis, 2015