

Simulación de Monte Carlo: aplicaciones en ciencias de superficies

Antonio J. Ramirez-Pastor

Dpto. de Física, Instituto de Física Aplicada, Universidad Nacional de San Luis -
CONICET, Ejército de los Andes 950, D5700BWS San Luis, Argentina.

Los modelos de gas de red son ampliamente utilizados en la descripción mecánico-estadística de procesos que tienen lugar sobre superficies sólidas. En este marco, la simulación computacional, y en particular el método de Monte Carlo, ocupa un rol determinante, llenando un espacio intermedio entre la teoría tradicional y el experimento. Dicho en otras palabras, por un lado, los resultados de la simulación pueden ser comparados con aquellos predichos por una teoría, utilizando el mismo conjunto de fuerzas intermoleculares. Esto provee un test exacto de la teoría, evitando apartamientos de las hipótesis teóricas que generalmente aparecen en los experimentos, ya que es extremadamente difícil encontrar sistemas experimentales con las características ideales de los modelos. Cuando la simulación es usada en este sentido, conduce a lo que se llaman “experimentos de máquina”. Por otro lado, los resultados de la simulación pueden ser comparados con resultados experimentales y servir para verificar la bondad de las hipótesis de un modelo, principalmente la manera en que las interacciones intermoleculares son tratadas.

Con el transcurso de los años, los múltiples y muy variados desafíos planteados al cálculo computacional, junto a las soluciones propuestas en cada caso, han fortalecido la técnica, haciendo cada vez más amplio su campo de aplicación. En la presente charla abordaremos algunos ejemplos del uso de la simulación de Monte Carlo en procesos superficiales y “condiciones críticas” (existencia de transiciones de fase, múltiple ocupación de sitios, etc), presentando nuevas estrategias de cálculo y discutiendo las perspectivas de las mismas.