XVII Taller Regional de Física Estadística y Aplicaciones a la Materia Condensada

TREFEMAC 2019

24 al 26 de abril de 2019
San Luis - Argentina

Auspiciantes

Universidad Nacional de San Luis

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales

DEPARTAMENTO DE FÍSICA
Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales
Universidad Nacional de San Luis

CONICET SAN LUIS
Centro Científico Tecnológico San Luis
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas

AGENCIA
Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica

INFAP CONICET
Instituto de Física Aplicada

Comité Organizador

Dr. Antonio J. Ramirez Pastor
Dr. Fernando Bulnes
Dr. Raúl López
Dr. Marcelo Pasinetti
Dra. Valeria Cornette
Dr. Rolando Belardinelli
Dr. Paulo Marcelo Centres
Dr. Rodolfo Porasso
Dra. Jessica Benito
Mg. Julio Sirur Flores
Dr. Fabricio Sánchez-Varretti
Dr. Claudio Narambuena
Lic. Lucía Soledad Ramírez
Lic. Camila Villagrán
Lic. Julián José Riccardo
Lic. Rodrigo Delgado Mons
Lic. Juan Ignacio López Ortiz
Tec. Marcela Corallo
Prof. Adriana Gallard
Esp. Santiago Calzetti
Lic. Julio César Ochoa Saldaña

Comité Científico

Celso Manuel Aldao – Universidad Nacional de Mar del Plata
Sergio Alejandro Cannas – Universidad Nacional de Córdoba
Mario Campo – Universidad Nacional de La Pampa
Carlos A. Condat – Universidad Nacional de Córdoba
Marisa Alejandra Frechero – Universidad Nacional del Sur
Tomás Sebastián Grigera – Universidad Nacional de La Plata
Verónica I. Marconi – Universidad Nacional de Córdoba
Héctor O. Mártin – Universidad Nacional de Mar del Plata
Bernardo Gabriel Mindlin – Universidad de Buenos Aires
Silvina M. Ponce Dawson – Universidad de Buenos Aires
Antonio J. Ramirez Pastor – Universidad Nacional de San Luis
Claudio F. Narambuena – UTN, Regional San Rafael
Fabricio Sánchez-Varretti – UTN, Regional San Rafael
Daniel A. Vega – Universidad Nacional del Sur
Damián H. Zanette – Centro Atómico Bariloche

043 – Aproximación de Bragg-Williams aplicada al estudio de la electrosorción en un electrodo modificado

Pasinetti P. M.[1], Ramirez Pastor A. J.[1], Pinto O. A.[2]
[1] INFAP, CONICET, Fac. de Cs. Físico-Matemáticas y Naturales, UN de San Luis.
[2] Instituto de Bio-nano-tecnología, UN de Santiago del Estero.

In this work is presented the Bragg-Williams mean field theoretical approach to study the electrosorption phenomena on a modified electrode. The electrode surface is modified by the irreversible pre-adsorption of a non-electroactive species, which is capable of blocking a fraction of the surface adsorption sites. Then, a second electroactive species is adsorbed on the empty sites. Inter-species lateral interactions are considered. The adsorption/ desorption process involves charge transfer, that is, when a particle A is adsorbed, an electron is transferred to the electrode surface. The analysis is based on the study of adsorption isotherms and voltammograms, considering different interaction energies and impurities concentrations. The theoretical approximation is contrasted with Monte Carlo results and experimental data.

044 – Percolación Inversa con Múltiple Ocupación de Sitios

L. S. Ramirez[1*], P. M. Centres [1], y A. J. Ramirez-Pastor [1]
[1] Universidad Nacional de San Luis, Depto de Física e Instituto de Física Aplicada, Argentina
[*] *lsramirez@unsl.edu.ar*

El problema de percolación ha atraído un gran interés desde hace más de tres décadas ya que muestra un fenómeno de umbral y establece una técnica completa para el tratamiento de sistemas desordenados, modelos de geometría estocástica y fenómenos críticos. La percolación se enfoca en las preguntas que surgen cuando se considera la conectividad geométrica y da una idea de cuándo un sistema está macroscópicamente abierto a que un fenómeno ocurra.
El modelo de percolación puede representarse convenientemente como una red de sitios (o enlaces), donde cada elemento está ocupado con probabilidad p en el intervalo [0, 1] o vacío con probabilidad 1-p. En este trabajo, utilizamos la teoría de la percolación para describir la respuesta del sistema a la eliminación de componentes, fenómenos de interés primario en el estudio de robustez. Estudiamos la respuesta de una red inicialmente completamente ocupada cuando es diluida al eliminar grupos de componentes para encontrar la concentración mínima a la que se pierde la conectividad. Llamamos a este esquema "percolación inversa".
Mediante simulaciones numéricas y análisis de tamaño finito, se trataron cinco sistemas diferentes mediante la remoción de: (1) varillas rígidas de tamaño k (k-meros) en redes cuadradas y (2) redes triangulares; (3) k-meros de enlaces en redes cuadradas homogéneas y (4) en presencia de impurezas; y (5) baldosas de k x k en redes cuadradas.
Se encontró que el comportamiento del umbral inverso y las propiedades de Jamming difieren fuertemente del problema estándar. Para los casos (1) y (2), las fases percolativas y no-percolativas se extienden hasta el infinito en el espacio del parámetro k y, en consecuencia, el modelo presenta una transición de percolación para todo el rango de k. Para (3), (4) y (5), el bloqueo de la red es responsable de la existencia de un valor máximo de k a partir del cual ya no se produce la transición de la fase de percolación.
Este comportamiento no se había observado anteriormente para la percolación de sitios con múltiple ocupación y tiene fuertes implicaciones ya que significa que, a partir de cierto valor, el sistema no puede ser desconectado. Finalmente, se llevó a cabo un estudio exhaustivo de los exponentes críticos y la universalidad, que reveló que el problema pertenece a la misma clase de universalidad que el modelo de percolación aleatoria 2D.