



**RECTORADO**

SAN LUIS, 3 de agosto de 2023.-

**VISTO:**

El EXPE: 4362/2023, mediante el cual se solicita la protocolización del Curso de Posgrado: “ADSORCIÓN IRREVERSIBLE Y PERCOLACIÓN EN MODELOS DE GAS DE RED DE OBJETOS EXTENDIDOS”; y

**CONSIDERANDO:**

Que el Curso de Posgrado se propone dictar en el ámbito de la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales del 14 al 28 de agosto de 2023 con un crédito horario de OCHENTA (80) horas presenciales y bajo la coordinación del Dr. Antonio José RAMIREZ PASTOR.

Que la Comisión Asesora de Posgrado de la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales recomienda aprobar el curso de referencia.

Que el Consejo de Posgrado de la Universidad Nacional de San Luis en su reunión del 25 de julio de 2023, analizó la propuesta y observa que el programa del curso, bibliografía, metodología de evaluación y docentes a cargo, constituyen una propuesta de formación de posgrado de calidad en su campo específico de estudio.

Que, por lo expuesto, el Consejo de Posgrado aprueba la propuesta como Curso de Posgrado, según lo establecido en Ordenanza CS N° 35/2016.

Que corresponde su protocolización.

Por ello, y en uso de sus atribuciones:

**EL RECTOR DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN LUIS**



**RECTORADO**

**RESUELVE:**

ARTÍCULO 1º.- Protocolizar el dictado del Curso de Posgrado: “ADSORCIÓN IRREVERSIBLE Y PERCOLACIÓN EN MODELOS DE GAS DE RED DE OBJETOS EXTENDIDOS”, del 14 al 28 de agosto de 2023 en el ámbito de la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales con un crédito horario de OCHENTA (80) horas presenciales.

ARTÍCULO 2º.- Protocolizar el equipo docente constituido por: Responsable: Dr. Raúl LÓPEZ, DU N° 21704353 y Colaborador: Dr. Antonio José RAMIREZ PASTOR, DU N° 18446668, ambos pertenecientes a la Universidad Nacional de San Luis.

ARTÍCULO 3º.- Aprobar el programa del Curso de referencia, de acuerdo al ANEXO de la presente disposición.-

ARTÍCULO 4º.- Comuníquese, Publíquese en el Digesto Administrativo de la Universidad Nacional de San Luis, insértese en el Libro de Resoluciones, y archívese.-

NGV

Documento firmado digitalmente según Ordenanza Rectoral N° 15/2021 por: Rector MORIÑIGO, Víctor Aníbal – Secretaria de Posgrado REYES, Nora Susana.

**RECTORADO**

ANEXO

IDENTIFICACIÓN DEL CURSO

UNIDAD ACADÉMICA RESPONSABLE: Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales.

DENOMINACIÓN DEL CURSO: “ADSORCIÓN IRREVERSIBLE Y PERCOLACIÓN EN MODELOS DE GAS DE RED DE OBJETOS EXTENDIDOS.”

CATEGORIZACIÓN: Perfeccionamiento.

FECHA DE DICTADO DEL CURSO: 14 al 28 de agosto de 2023.

MODALIDAD DE DICTADO: Presencial.

CRÉDITO HORARIO TOTAL: 80 horas (40 hs. teóricas y 40 hs. prácticas).

COORDINADOR: Dr. Antonio José RAMIREZ PASTOR, DU N° 18446668.

EQUIPO DOCENTE:

RESPONSABLE: Dr. Raúl LÓPEZ.

COLABORADOR: Dr. Antonio José RAMIREZ PASTOR.

PROGRAMA ANALÍTICO:

FUNDAMENTACIÓN:

Desde su introducción en la década de 1950 por Hammersley y Broadbent, el problema de la percolación ha sido un punto central de la mecánica estadística y se ha aplicado a una amplia gama de fenómenos en física, química, biología y ciencia de los materiales, donde la conectividad y el agrupamiento juegan un papel importante. La teoría de la

## RECTORADO

percolación también ha proporcionado información sobre el comportamiento de modelos más complicados que exhiben transiciones de fase y fenómenos críticos.

Por lo general, el modelo de percolación en una red se clasifica en dos categorías, a saber, el modelo de sitio y el modelo de enlace. En el modelo de sitio [enlace], los sitios [enlaces] de una red se ocupan aleatoriamente e irreversiblemente con una probabilidad  $\theta$  o están vacíos (desocupados) con una probabilidad  $1 - \theta$ . Los sitios ocupados vecinos más cercanos (enlaces) forman estructuras llamadas islas. En el límite de una red infinita, hay un valor bien definido de  $\theta$ , conocido como umbral de percolación  $\theta_c$ , en el que una isla infinita se extiende de un lado al otro del sistema. La transición de percolación es entonces una transición de fase geométrica donde la concentración crítica separa una fase de islas finitas de una fase donde está presente una isla macroscópica, o infinito. La determinación exacta de  $\theta_c$  es posible en muy pocos casos.

Un fenómeno interesante ocurre cuando la red está ocupada por objetos extensos (objetos que ocupan más de un sitio de red). En estas condiciones, el estado final generado por la adsorción aleatoria e irreversible es un estado desordenado (conocido como estado de saturación o jamming) en el que no se pueden depositar más objetos debido a la ausencia de espacio libre de tamaño y forma apropiados. La cobertura limitante o de jamming correspondiente,  $\theta_j$ , es menor que la correspondiente al estado de llenado total que se alcanza mediante adsorción reversible (en equilibrio termodinámico), esto es,  $\theta_j < 1$ . Por lo tanto, la cobertura de jamming tiene un papel importante en la determinación del umbral de percolación, y la interacción (o interplay) entre jamming y percolación (el cual es un tema central del curso) es un problema relevante y de actualidad en el área de la mecánica estadística de los modelos de gas de red en presencia de objetos extendidos.

## OBJETIVOS:

Introducir al alumno en el estudio de los principales problemas que surgen a partir de la adsorción aleatoria e irreversible de objetos extendidos sobre una red. Se pretende lograr al término del curso que: (1) el alumno comprenda el concepto de cubrimiento de saturación y su relación con las propiedades percolativas del sistema; (2) el alumno se familiarice con algunas de las aproximaciones teóricas desarrolladas para estudiar este tipo de problemas; y (3) el alumno se introduzca en la generación y utilización de

## RECTORADO

algoritmos numéricos de programación óptimos para atacar los principales modelos de adsorción irreversible.

### CONTENIDOS MÍNIMOS:

Adsorción con múltiple ocupación de sitios. Adsorción secuencial aleatoria. Cinética de llenado y cubrimiento de saturación. La “transición de jamming”: el exponente  $\nu$ . RSA en redes euclidianas, fractales y complejas. El concepto de percolación. Percolación de sitios y enlaces. Percolación mixta “sitio y enlace” y “sitio o enlace”. Umbral de percolación y exponentes críticos. Percolación de objetos extendidos. Interplay jamming-percolación.

### PROGRAMA DETALLADO:

**BOLILLA 1, INTRODUCCIÓN:** Adsorción con múltiple ocupación de sitios: breve reseña histórica. Simulación de Monte Carlo. Objetivos y organización del curso.

**BOLILLA 2, ADSORCIÓN SECUENCIAL ALEATORIA (RSA, por sus siglas en inglés):** Descripción del modelo. Motivaciones y aplicaciones. (A) Reacciones en cadenas de polímeros 1D. (B) Quimisorción y reacción en superficies monocristalinas 2D. (C) Deposición de macromoléculas y partículas microscópicas. (D) Sistemas biológicos, ecológicos y sociológicos. (E) Procesos de crecimiento multicapa y de estado sólido 3D.

**BOLILLA 3, CUBRIMIENTO DE SATURACIÓN (O JAMMING COVERAGE):** El problema unidimensional homogéneo y con impurezas. Cálculo del cubrimiento de saturación a partir de la evolución temporal del cubrimiento superficial. El método de las dos etapas: aplicación al cálculo del jamming coverage para el problema de SAWs (self-avoiding walks) sobre redes en 2D. Cálculo del cubrimiento de saturación a partir de la probabilidad de alcanzar un determinado cubrimiento sobre la red. Cálculo del exponente de jamming.

**BOLILLA 4, EFECTOS DE LA GEOMETRÍA SOBRE EL CUBRIMIENTO DE SATURACIÓN:** Adsorción secuencial aleatoria en redes euclidianas, fractales y complejas. Modelos y definiciones básicas. Cálculo del exponente de jamming.

## RECTORADO

BOLILLA 5, PERCOLACIÓN: Concepto de percolación: ejemplos. Percolación en el contexto del modelo de gas de red. Percolación de sitios y enlaces. Percolación mixta “sitio y enlace” y “sitio o enlace”. Umbral de percolación. BOLILLA 6, UMBRAL DE PERCOLACIÓN: Determinación del umbral de percolación: red unidimensional, red de Bethe, red honeycomb y red triangular. Aproximaciones analíticas: método de Rosowski y renormalización de celda pequeña. Aproximación de Tsallis para percolación mixta. BOLILLA 7, SIMULACIÓN NUMÉRICA: Algoritmo de Hoshen-Kopelman para detectar diferentes islas y la existencia o no de un cluster de percolación. Técnica de Yonezawa-Sakamoto-Hori para determinar las propiedades de punto crítico: umbral de percolación y exponentes críticos. Curvas de probabilidad de percolación y escaleo de tamaño finito. BOLILLA 8, PERCOLACIÓN DE OBJETOS EXTENDIDOS: Cubrimiento de jamming para kmeros lineales depositados sobre una red unidimensional. Jamming y percolación de kmeros lineales depositados sobre redes en 2D: redes cuadrada, honeycomb y triangular. Jamming y percolación de kmeros lineales depositados sobre redes simple cúbicas en 3D. Jamming y percolación de baldosas ( $k \times k$ ) depositadas sobre redes en 2D y en 3D. Jamming y percolación de cubitos ( $k \times k \times k$ ) depositados sobre redes en 3D. Efecto de la dimensión del espacio y la dimensión del objeto depositado sobre el diagrama de fase de percolación del sistema. Efecto de las impurezas sobre las propiedades de percolación de objetos extendidos.

## SISTEMA DE EVALUACIÓN:

Aprobación de un proyecto individual de un caso de análisis (plazo de entrega: 8 de setiembre de 2023). Asistencia a la totalidad de las actividades.

## BIBLIOGRAFÍA:

- [1] D. Stauffer and A. Aharony, Introduction to Percolation Theory (Taylor & Francis, London, 1994).
- [2] M. Sahimi, Applications of Percolation (Theory Taylor & Francis, London, 1994).
- [3] P. L. Krapivsky, S. Redner, and E. Ben-Naim, A Kinetic View of Statistical Physics (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2010).

**RECTORADO**

- [4] M. E. J. Newman, *Networks: An Introduction* (Oxford University Press, Oxford, UK, 2010).
- [5] R. Cohen and S. Havlin, *Complex Networks, Structure, Robustness and Function* (Cambridge University Press, Cambridge, 2010).
- [6] G. Grimmett, *Percolation* (Springer-Verlag, Berlin, 1999).
- [7] B. Bollobás and O. Riordan, *Percolation* (Cambridge University Press, New York, 2006).
- [8] J. Feder, *J. Theor. Biol.* 87, 237 (1980).
- [9] J. W. Evans, *Rev. Mod. Phys.* 65, 1281 (1993).
- [10] A. Cadilhe, N. A. M. Araújo, and V. Privman, *J. Phys.: Condens. Matter* 19, 065124 (2007).
- [11] N. A. M. Araújo and A. Cadilhe, *J. Stat. Mech.* (2010) P02019.
- [12] L. Budinski-Petković and U. Kozmidis-Luburić, *Phys. Rev. E* 56, 6904 (1997).
- [13] L. Budinski-Petković, I. Lončarević, M. Petković, Z. M. Jakšić, and S. B. Vrhovac, *Phys. Rev. E* 85, 061117 (2012).
- [14] L. Budinski-Petković, I. Lončarević, Z. M. Jakšić, S. B. Vrhovac, and N. M. Švrakić, *Phys. Rev. E* 84, 051601 (2011).
- [15] L. Budinski-Petković, I. Lončarević, Z. M. Jakšić, and S. B. Vrhovac, *J. Stat. Mech.* (2016) 053101.
- [16] E. J. Perino, D. A. Matoz-Fernandez, P. M. Pasinetti, and A. J. Ramirez-Pastor, *J. Stat. Mech.* (2015) P10011.
- [17] L. S. Ramirez, P. M. Centres, and A. J. Ramirez-Pastor, *J. Stat. Mech.* (2017) 113204.

**RECTORADO**

- [18] P. Longone, P.M. Centres, and A. J. Ramirez-Pastor, Phys. Rev. E 100, 052104 (2019).
- [19] Y. Y. Tarasevich, N. I. Lebovka, and V. V. Laptev, Phys. Rev. E 86, 061116 (2012).
- [20] M. G. Slutski, L. Y. Barash, and Y. Y. Tarasevich, Phys. Rev. E 98, 062130 (2018).
- [21] T. Schilling, M. A. Miller, and P. van der Schoot, Europhys. Lett. 111, 56004 (2015).
- [22] L. S. Ramirez, P. M. Centres, and A. J. Ramirez-Pastor, J. Stat. Mech. (2015) P09003.
- [23] M. Nakamura, J. Phys. A: Math. Gen. 19, 2345 (1986).
- [24] M. Nakamura, Phys. Rev. A 36, 2384 (1987).
- [25] A. J. Ramirez-Pastor, P. M. Centres, E. E. Vogel, and J. F. Valdés, Phys. Rev. E 99, 042131 (2019).
- [26] L. S. Ramirez, P. M. Centres, and A. J. Ramirez-Pastor, Phys. Rev. E 100, 032105 (2019).
- [27] P. Longone, P.M. Centres, and A. J. Ramirez-Pastor, Phys. Rev. E 85, 011108 (2012).
- [28] L. S. Ramirez, P. M. Centres, A. J. Ramirez-Pastor, and W. Lebrecht, J. Stat. Mech. (2019) 113205.
- [29] G. A. Iglesias Panuska, P.M. Centres, and A. J. Ramirez-Pastor, Phys. Rev. E 102, 032123 (2020).
- [30] L. S. Ramirez, P. M. Centres, and A. J. Ramirez-Pastor, Phys. Rev. E 97, 042113 (2018).
- [31] G. Kondrat, Z. Koza, and P. Brzeski, Phys. Rev. E 96, 022154 (2017).

## RECTORADO

- [32] W. Lebrecht, E. E. Vogel, J. F. Valdés, A. J. Ramirez-Pastor, P. M. Centres, M. I. González, and F. D. Nieto, Phys. Rev. E 92, 012129 (2015).
- [33] S. P. Finner, T. Schilling, and P. van der Schoot, Phys. Rev. Lett. 122, 097801 (2019).
- [34] Nikolai I. Lebovka, Mykhailo O. Tatochenko, Nikolai V. Vygornitskii, and Yuri Yu. Tarasevich Phys. Rev. E 104, 064104 (2021)
- [35] Yuri Yu. Tarasevich and Andrei V. Eserkepov Phys. Rev. E 107, 034105 (2023)
- [36] Y. Y. Tarasevich, A. V. Eserkepov, and I. V. Vodolazskaya Phys. Rev. E 105, 044129 (2022)
- [37] F. M. L. Pimentel, N. De La Cruz Félix, L. S. Ramirez, and A. J. Ramirez-Pastor Phys. Rev. E 107, 064128 (2023)
- [38] L. S. Ramirez, P. M. Pasinetti, and A. J. Ramirez-Pastor Phys. Rev. E 107, 064106 (2023)

## CARACTERÍSTICAS DEL CURSO:

DESTINATARIOS/AS Y REQUISITOS DE INSCRIPCIÓN: Los aspirantes deben ser graduados con título universitario de grado que impliquen 4 o más años de duración. Egresados con título de grado universitario en Física, Matemática, Informática, Química e Ingeniería.

CUPO: Máximo: 30 estudiantes.

PROCESO DE ADMISIÓN: En el caso de que el número de inscriptos supere el cupo máximo establecido, la selección se realizará fijando un cupo por carrera.

**RECTORADO**

**CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES:**

<b>Fecha</b>	<b>Tipo de actividad / temas a desarrollar</b>	<b>Docente/s responsable/s de la actividad</b>
14 de agosto	8:00-12:00 hs. (Teoría)	Dr. A. J. Ramírez Pastor.
	14:00-18:00 hs. (Práctico)	Dr. R. H. López.
15 de agosto	8:00-12:00 hs. (Teoría)	Dr. A. J. Ramírez Pastor.
	14:00-18:00 hs. (Práctico)	Dr. R. H. López.
16 de agosto	8:00-12:00 hs. (Teoría)	Dr. A. J. Ramírez Pastor.
	14:00-18:00 hs. (Práctico)	Dr. R. H. López.
17 de agosto	8:00-12:00 hs. (Teoría)	Dr. A. J. Ramírez Pastor.
	14:00-18:00 hs. (Práctico)	Dr. R. H. López.
18 de agosto	8:00-12:00 hs. (Teoría)	Dr. A. J. Ramírez Pastor.
	14:00-18:00 hs. (Práctico)	Dr. R. H. López.
22 de agosto	8:00-12:00 hs. (Teoría)	Dr. A. J. Ramírez Pastor.
	14:00-18:00 hs. (Práctico)	Dr. R. H. López.
23 de agosto	8:00-12:00 hs. (Teoría)	Dr. A. J. Ramírez Pastor.
	14:00-18:00 hs. (Práctico)	Dr. R. H. López.
24 de agosto	8:00-12:00 hs. (Teoría)	Dr. A. J. Ramírez Pastor.
	14:00-18:00 hs. (Práctico)	Dr. R. H. López.
25 de agosto	8:00-12:00 hs. (Teoría)	Dr. A. J. Ramírez Pastor.
	14:00-18:00 hs. (Práctico)	Dr. R. H. López.

**RECTORADO**

28 de agosto	8:00-12:00 hs. (Teoría)	Dr. A. J. Ramírez Pastor.
	14:00-18:00 hs. (Práctico)	Dr. R. H. López.

LUGAR DE DICTADO: Departamento de Física (aula 34), FCFMyN-UNSL.

FECHA PREVISTA PARA ELEVAR LA NÓMINA DE ESTUDIANTES APROBADOS/AS: Septiembre 2023.

**FINANCIAMIENTO DEL CURSO:**

COSTOS: Infraestructura.

FUENTES DE FINANCIAMIENTO: El curso se financia mediante el aporte del Departamento de Física - INFAP - CONICET FCFMyN - UNSL.

ARANCEL GENERAL: GRATUITO.

BECA A DOCENTES DE LA UNSL: Se realizará un descuento del 100% por lo que será GRATUITO en este caso.

BECA A ESTUDIANTES DE LA UNSL: Se realizará un descuento del 100% por lo que será GRATUITO en este caso.

## Hoja de firmas