

Simulación

Monte Carlo

Propios, Simpático, DL_MONTE

Dinámica Molecular

DL_POLY, DL_MESO, HOOMD, GRÖMACS

Recursos computacionales:
Cluster UNCaFiQT (INIFTA/SNCAD)
GPGPU Nvidia GTX 570

Sistemas-modelo

Materiales magnéticos
Materiales metálicos
Superficies
Interfases
Vidrios
Fluidos complejos

Teoría

Renormalisation Group
Density Functional Theory
Finite Size Scaling
Short Time Dynamics
Transition Path Sampling
Mode Coupling

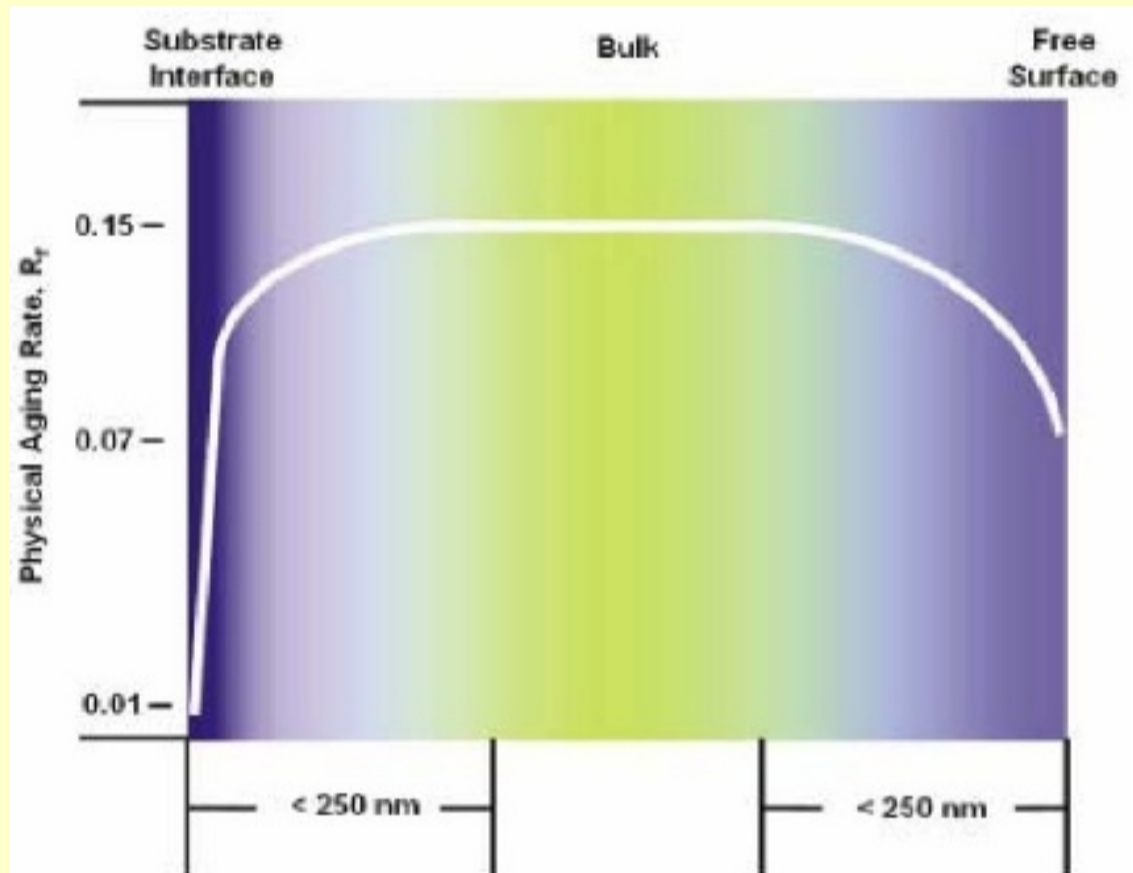
“Simulaciones moleculares de fluidos complejos”

Dr. Andres De Virgiliis

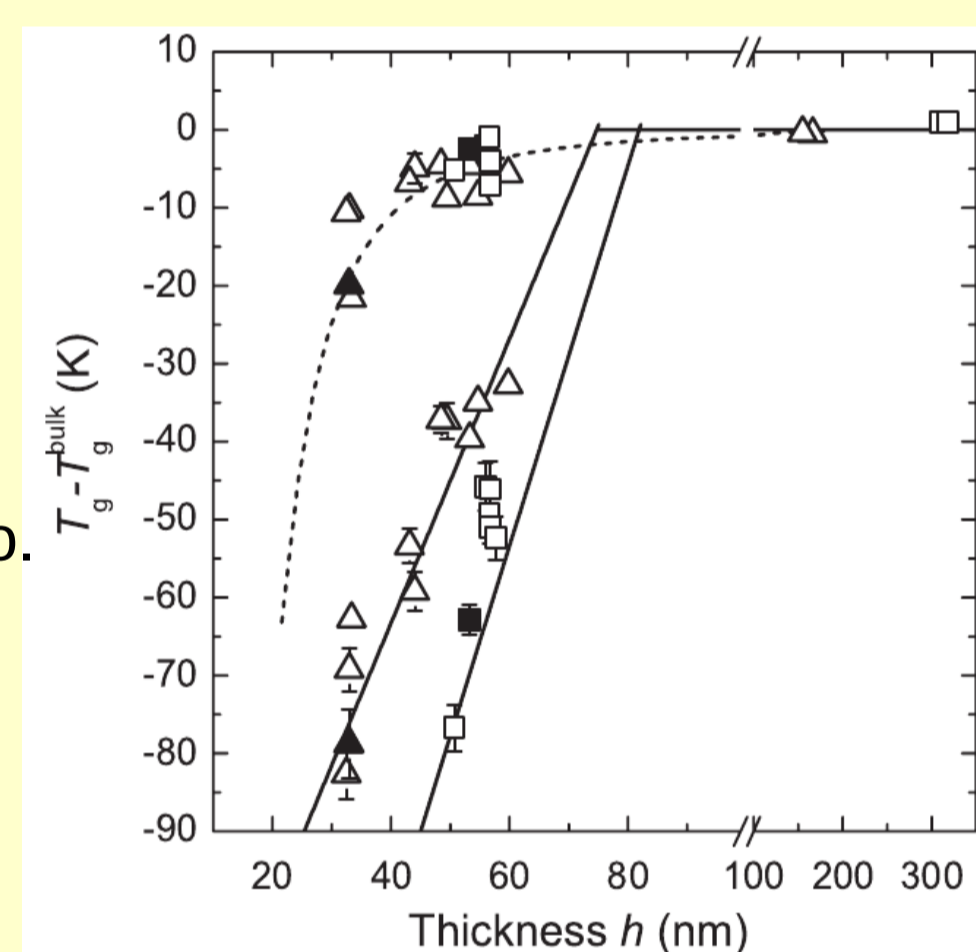
A.) Transición vítrea en films delgados de polímeros:

- Estudio del impacto que tienen sobre la transición vítrea, tanto la superficie libre del film como el sustrato sobre el que se deposita.
- Influencia del grado de polimerización (presencia de *entanglements*).
- Test del mecanismo propuesto por de Gennes para la dependencia de la temperatura de transición con el espesor del film.
- Influencia de la topología del polímero: cadenas lineales vs. estrellas. Diferentes mecanismos de relajación en cada caso.

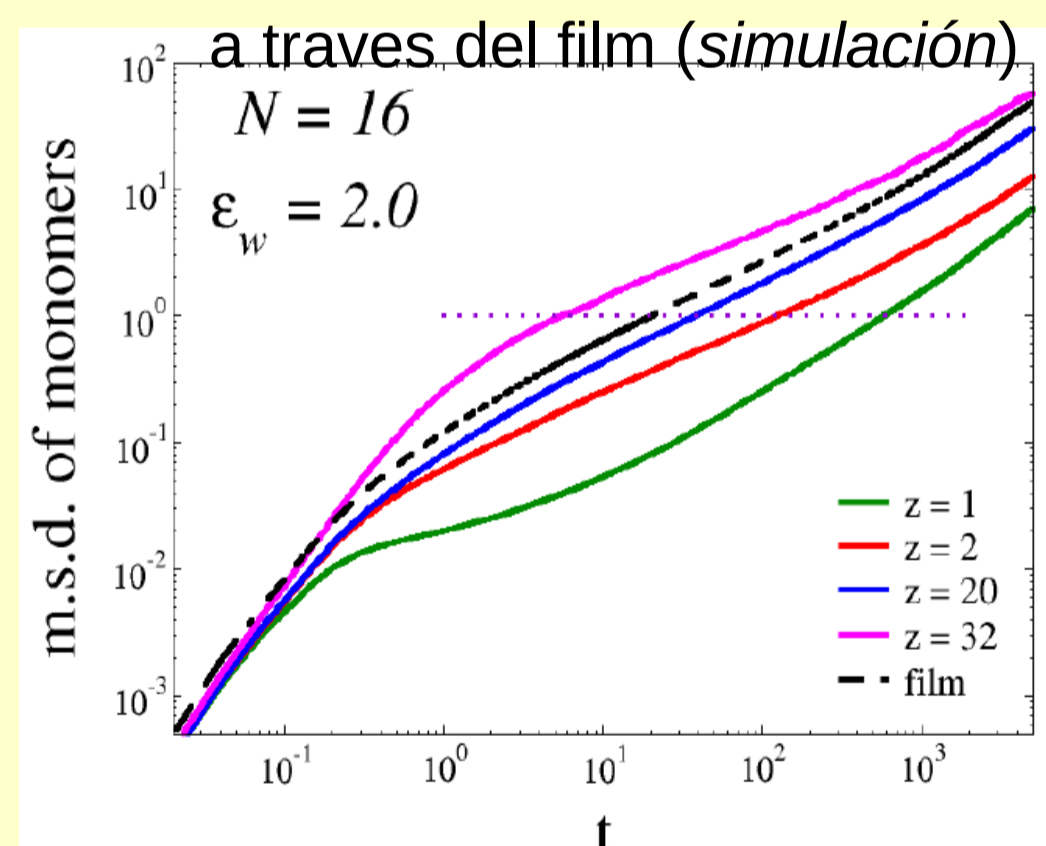
Perfil de *aging* a través del film (experim.)



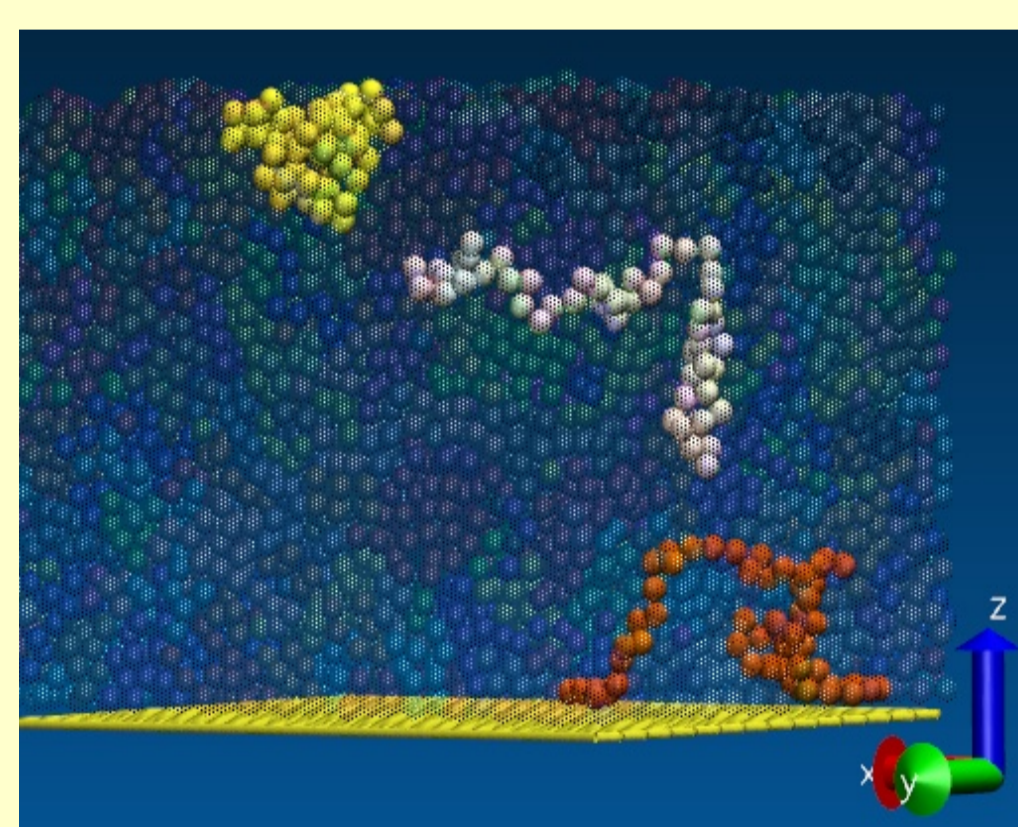
El comportamiento con el espesor del film difiere según el tipo de sustrato y el tamaño del polímero. (experim.)



Movilidad de monómeros a través del film (simulación)



Beca doctoral
ANPCyT
PICT 2012-0262
Comienzo Abril '14



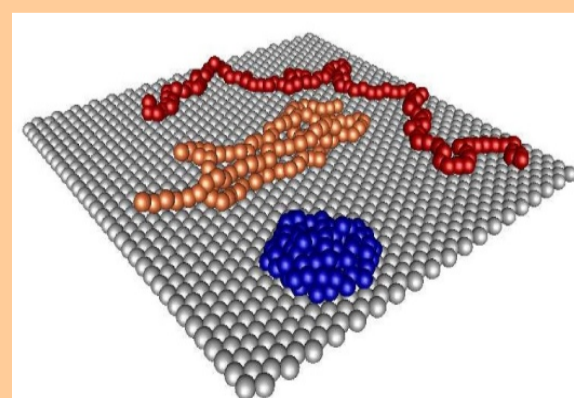
Colaboración: Dr. Tomas Grigera (MACFE), Dr. Daniel Vega (IFISUR-Bahia Blanca), Prof. Dr. Andrey Milchev (BAS-Sofia, Bulgaria)

C.) Difusión de polímeros en geometrías confinadas

Competencia entre el tamaño del polímero y una longitud característica impuesta por la geometría externa => leyes de escala.

1.- Cadenas adsorbidas: influencia del sustrato

Difusión lateral, sobre sustratos rígidos y/o blandos. Límite *diluido*: una sola cadena. Dificultad experimental. Ley de escala para D vs. N : diversos mecanismos.



2.- Dinámica en un tubo:

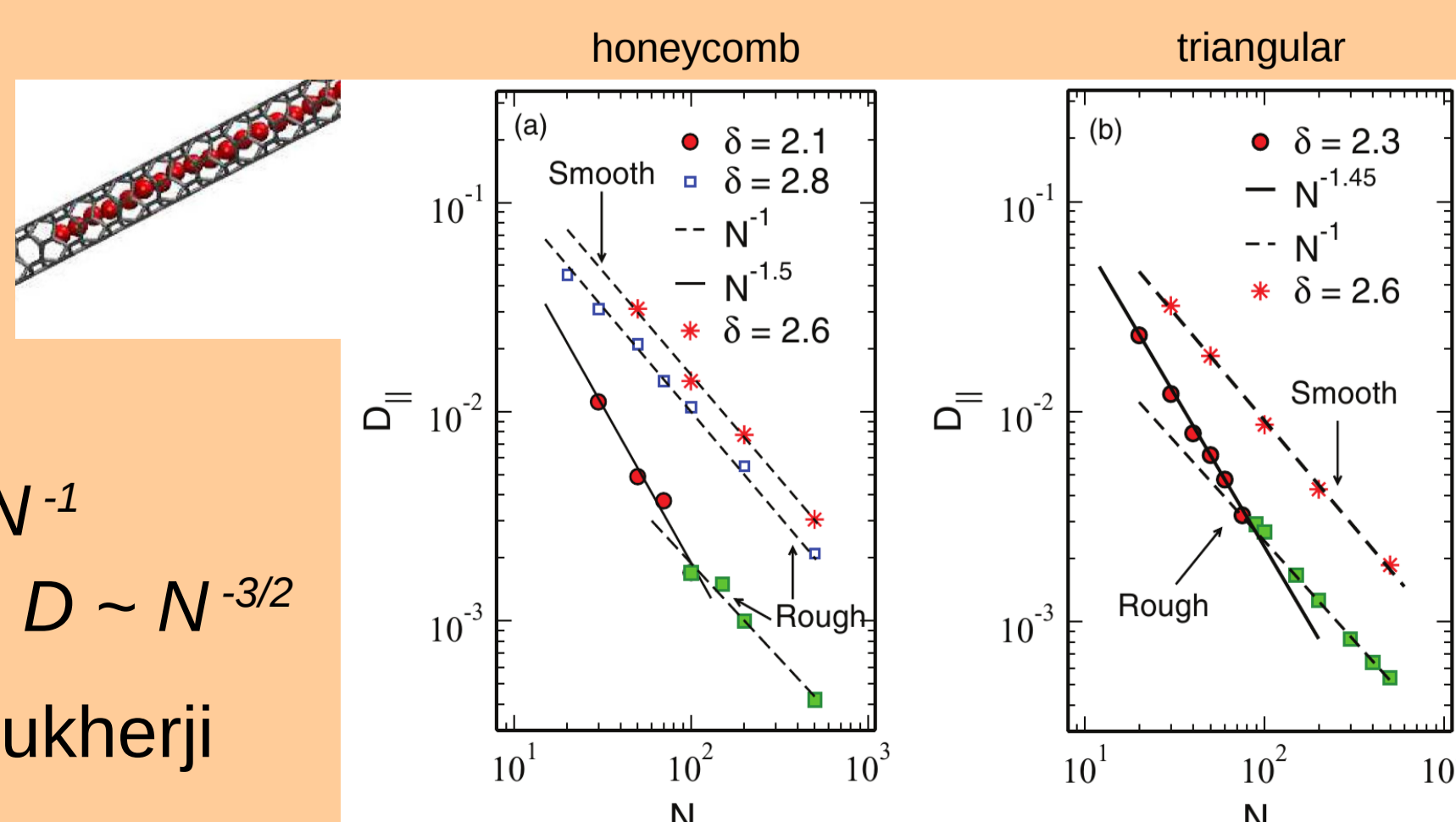
Resultados *independientes* del tipo de superficie del tubo.

Sustratos suaves: $D \sim N^{-1}$

Confinamiento moderado: $D \sim N^{-1}$

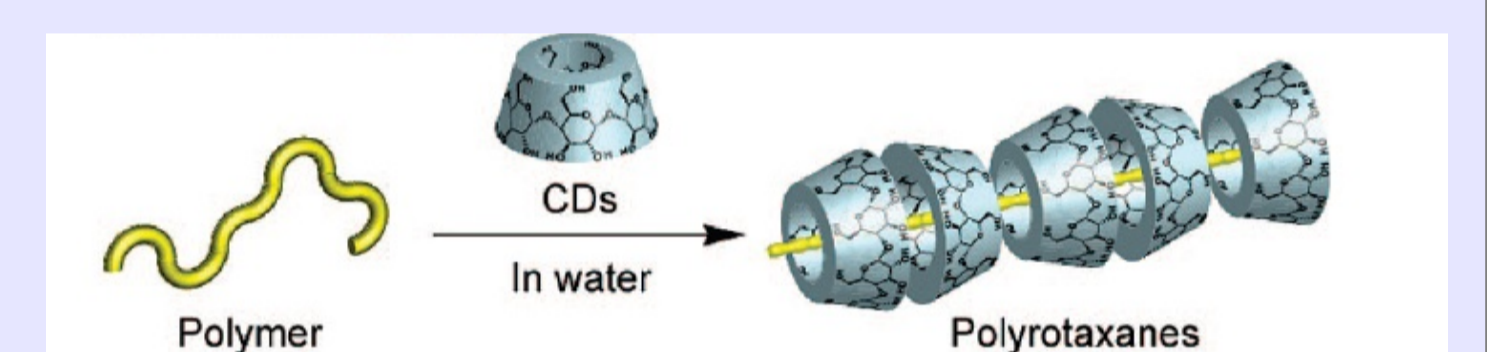
Fuerte confinamiento ($\delta \approx 2\sigma$): $D \sim N^{-3/2}$

Colaboración: Dr. Debashish Mukherji (MPIP-Mainz, Alemania)



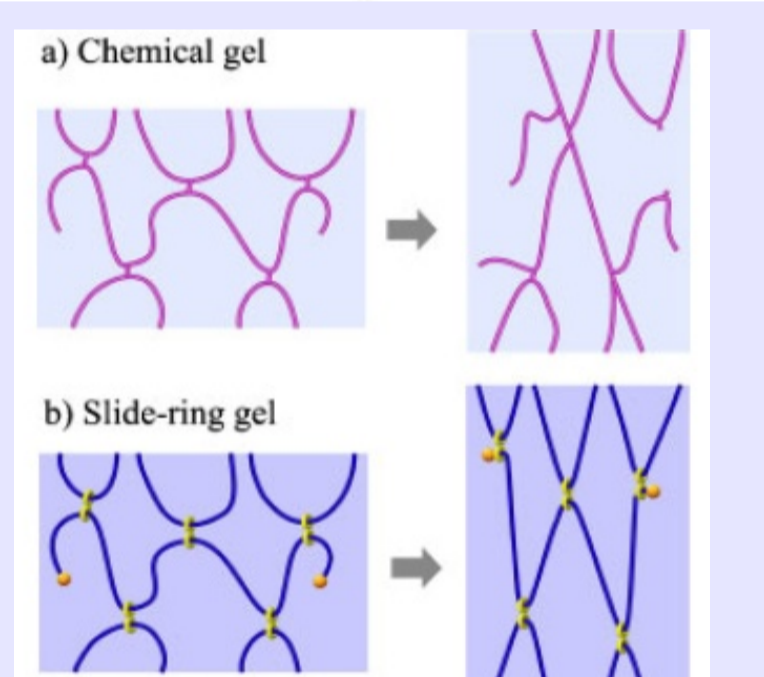
B.) Polirotaxanos: arquitecturas supramoleculares

Polímero (ej. PEG, PEO): *huésped*
Macrociclo (ej. CD): *anfitrión*



Las CD *deslizan libremente* a lo largo del PEG => nuevas propiedades estructurales y dinámicas.

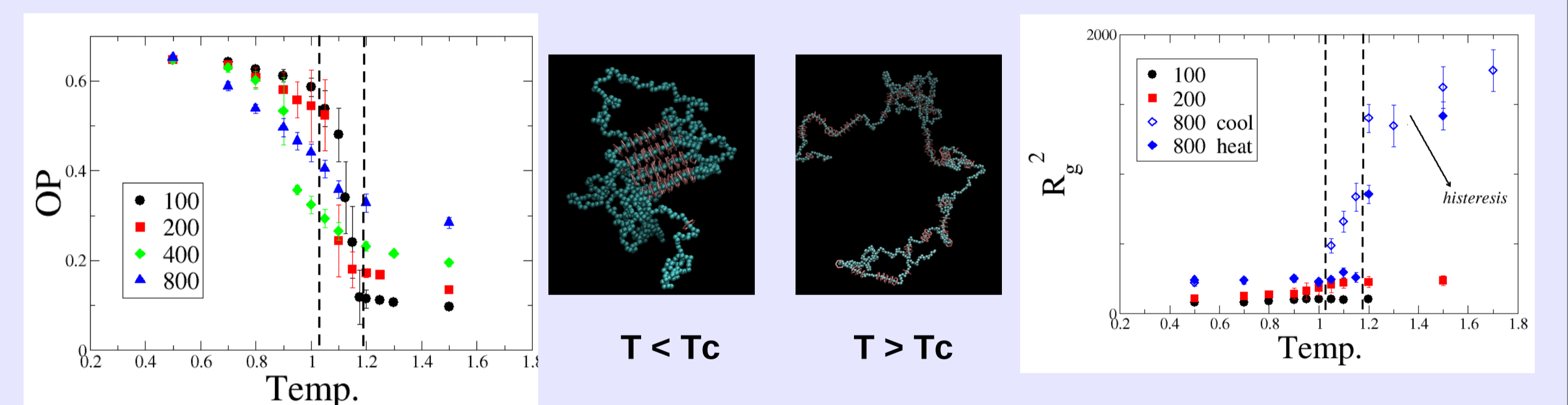
Deformación: conformación *anisotrópica* a tiempos cortos. Relajación: via “*efecto polea*”



Modelo “de grano grueso” del sistema:

Cadena aislada (solvente implícito). En función de la temperatura, *transición de colapso* mediada por los anillos.

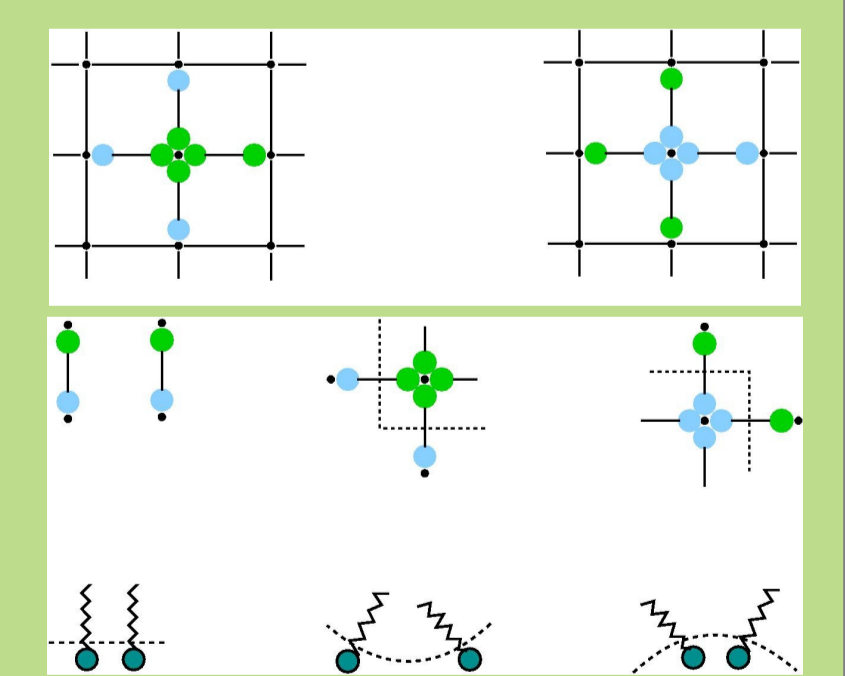
Al enfriar: los anillos se ordenan (nemático) y el polímero se contrae.



Colaboración: Dr. Claudio Pastorino (CAC-CNEA)

D.) Modelo de Widom para microemulsiones

- Tres especies de moléculas, AA (aceite), BB (agua), AB (surfactante), confinadas a los extremos de una red cúbica simple, con ocupación única. Sólo los extremos de moléculas del mismo tipo (sólo extremos A o extremos B) convergen en un dado sitio de red.



- Simulación Monte Carlo (Metropolis) en una red cúbica simple con $N=L^3$ sitios. Condiciones de contorno periódicas. Repesado de histogramas. Extrapolación mediante teoría de escala de tamaño finito.

- Universalidad: Colapso de $P(m)$ con exponentes críticos del modelo Ising 3d.

- Tensión superficial (interfase agua-aceite): calculada a partir de la barrera de energía.

