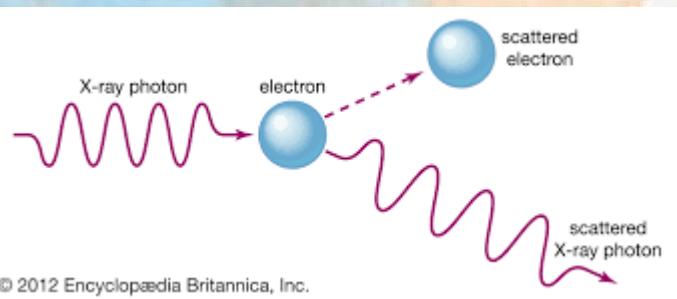
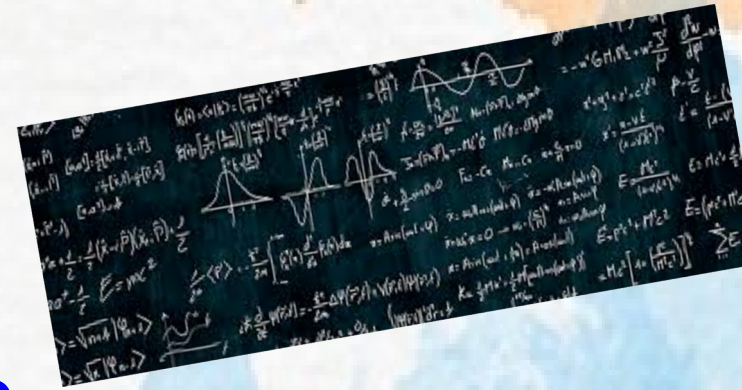


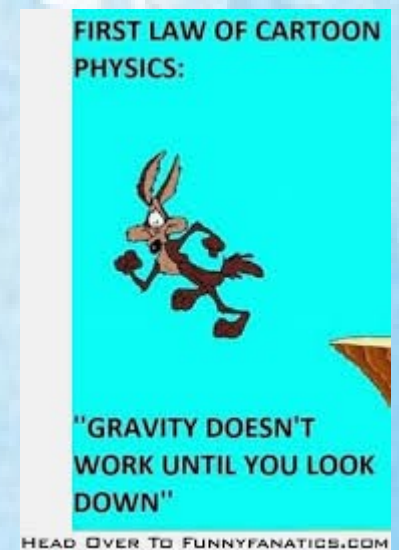
# Métodos de Monte Carlo

## *EJEMPLOS \_2*



Mayo 2023  
*Prof. Gloria Buendía*

# LA CoNGA-PHYSICS

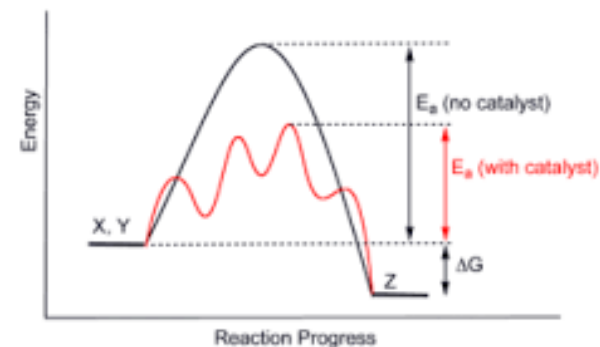


# *Proyectos Mayo 2023*

- 1) Modelo de Blume-Capel**
- 2) Ferrimagneto de Ising**
- 3) ZGB model**
- 4) YK model**
- 5) Modelo para formación de opinión**



# Catalysis (Shortcut)



Process in which the rate of a chemical reaction (or biological process) is increased by an “external” factor: the catalyst. The catalyst does not take part in the reaction.

In many cases (**heterogeneous catalysis**) the catalyst provides a surface on which the reaction occurs.

The reactants are temporary **adsorbed** ( $\neq$  absorbed) on the surface, they react on the surface, and the products are **desorbed**

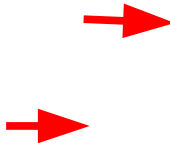
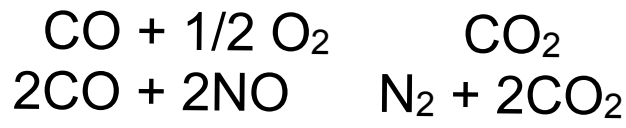
Good catalyst needs to adsorb the reactants strongly enough for them to react, but weakly enough for the product to break away and leave the sites available for a new reaction

# Catalysis:

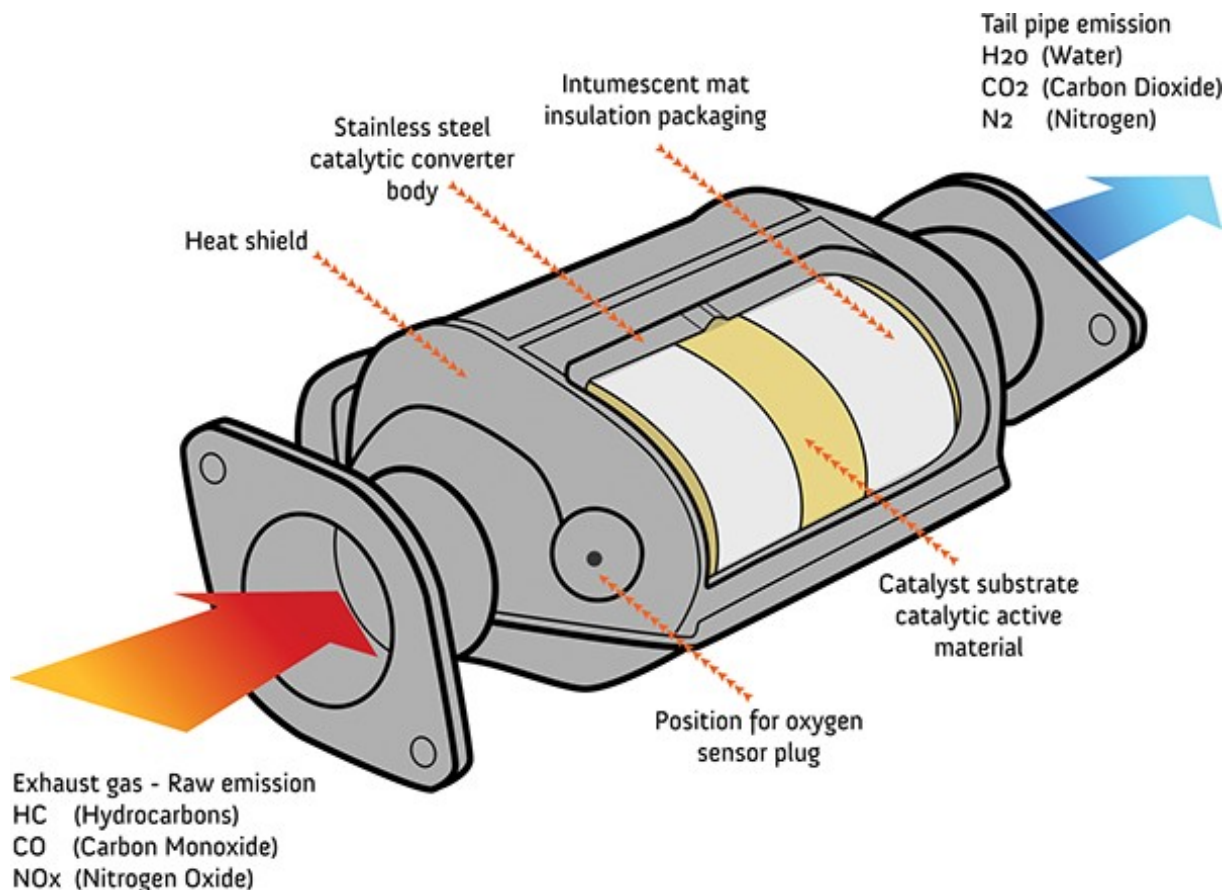
\*\*\*Huge technical applications:

Large scale production of chemicals

Pollution control: provides a way to get rid of CO. Catalytic converters reduce CO emissions by adsorbing CO and desorbing CO<sub>2</sub>



These reactions do not occur on the atmosphere!! they require a catalyst: a surface.



**Catalytic converter**



# Modelo ZGB (Ziff-Gulari-Barshad 1986)

Modelo para la oxidación catalítica de CO en una superficie. Sistema fuera del Equilibrio, hay un flujo constante de reactivos.

El monóxido de carbono CO (producido principalmente por la combustión de automóviles) es un gas venenoso, pero cuando se combina con el oxígeno se convierte en dióxido de carbono CO<sub>2</sub>, que es menos tóxico, pero que también tiene graves consecuencias para el ambiente.

PERO esta reacción



Se necesita de la presencia de un *catalizador* para que la reacción se produzca. En este caso el catalizador es una superficie donde el CO y el O reaccionan luego de adsorberse.

Catalizador: elemento que permite que una reacción se produzca sin participar en ella.

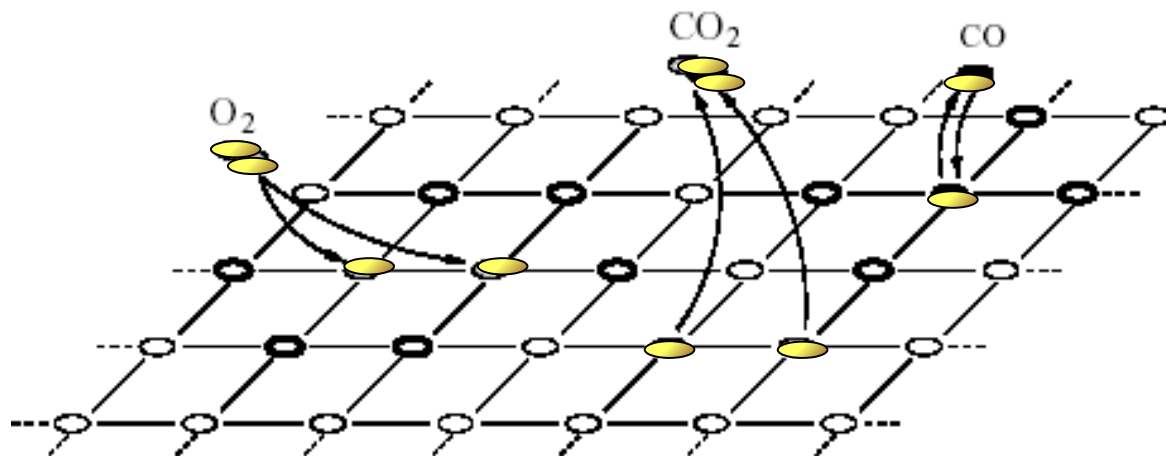
**Catálisis Heterogénea:** el catalizador tiene una estructura diferente a los Reactantes, como en este caso que es una superficie .

# ZGB model

- Describes some aspects of the catalytic oxidation of CO on a surface.



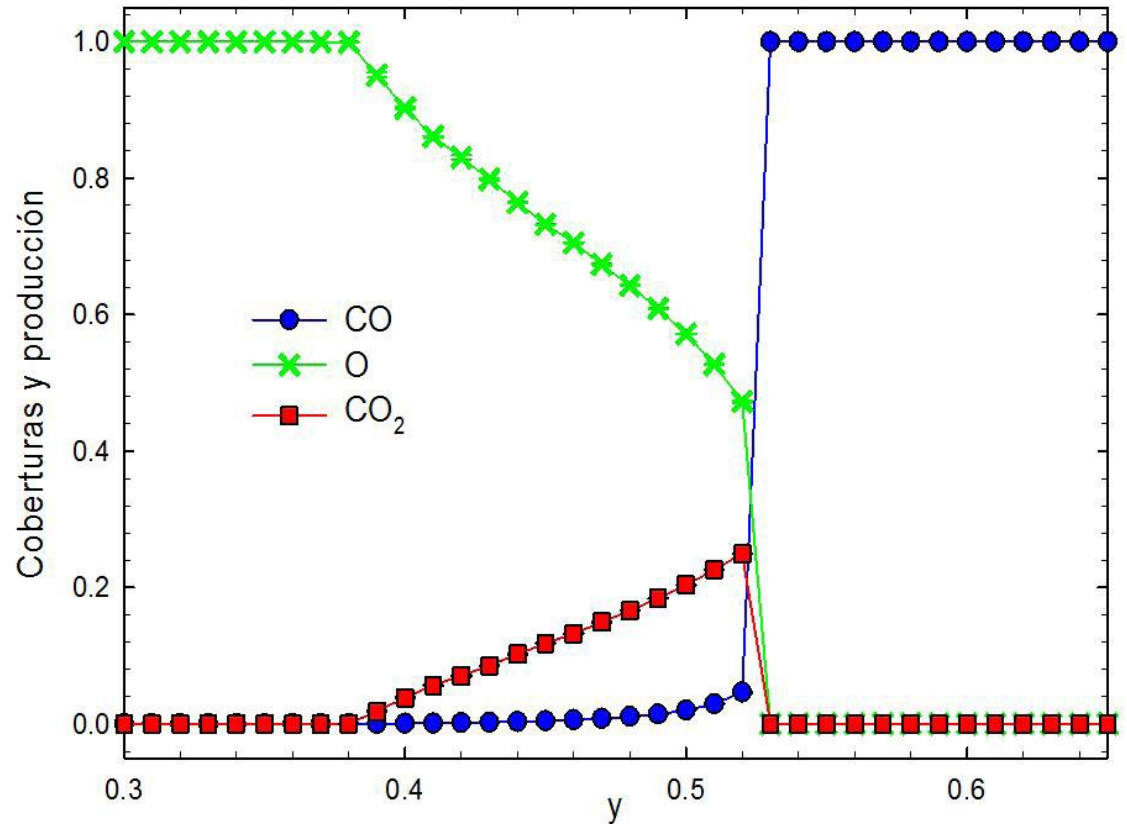
$\text{O}_2$  two nn sites (NN),  
CO one site



The process is controlled by only one parameter  $y$ , that represents the probability that the molecule that reaches the surface is a CO ( $1-y$   $\text{O}_2$ )  $y$  is proportional to the relative amount of CO in the gas.

- The model **ZGB** has **2 phase transitions: continuous at  $y_1$ , discontinuous at  $y_2$**
- $y < y_1$  Poisoned with O
- $y > y_2$  Poisoned with CO

Coverages and reaction rates *(cantidades a medir)*



## Limitations

- Real systems do not become poisoned with Oxygen
- Temperature effects. At high T there are transitions between states with high and low CO coverages
- Role of impurities

# Simulación modelo ZGB

Configuración inicial -Despues del los **pasos de calentamiento**, Varie  $y$  desde 0 hasta 1 (A)

Pasos de Monte Carlo do MCC=1, MC (B)

En cada paso de MC debe seleccionar uno de los  $N=L \times L$  sitios al azar

Paso de selección de sitios  $i=1$ ,  $N=L \times L$  (C)

(1) Seleccione un sitio a al azar.  $i$  (Utilize un número al azar)  $r_1$

Si el sitio está lleno vaya a otro (1)

Si el sitio está vacío, seleccione un número al azar  $0 < r_2 < 1$

Si  $r_2 < y$  adsorba un CO  $cov(CO) \rightarrow cov(CO)+1$

Si no ( $r_2 > y$ ) trate de adsorber un  $O_2$  (escoja al azar uno de los 4 vecinos cercanos de  $i$  si está vacío adsorba un O en  $i$  y otro en el vecino  $j$ ) si está lleno, vaya a (1)  $cov(O) + 2$

Si realizó una adsorción de CO (O) en  $i$  revise en cualquier orden los vecinos de  $i$  ( $i,j$ ), si en alguno de ellos hay un O (CO), hay una reacción  $CO+O \rightarrow CO_2$ , deje ambos sitios vacíos, actualize coberturas y producción  $cov(CO)-1$ ,  $cov(O)-1$  y  $prod(CO_2) + 1$

Al finalizar un paso de MC, guarde los valores de las coberturas .



(C) Terminada la actualización de los sitios

Ahora tenemos la cobertura y producción para un paso de Monte Carlo al valor de  $y$

Repetimos para los demás pasos de Monte Carlo

(B) Terminados los pasos de Monte Carlo, calculamos los promedios, y los errores

Ahora tenemos los valores de las coberturas y productividad para  $y$

(A) Cambiamos de  $y$  y repetimos el proceso.

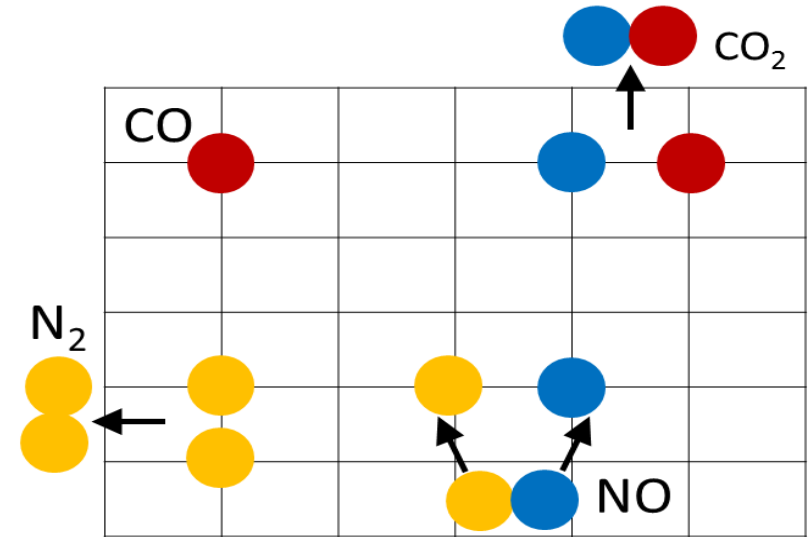
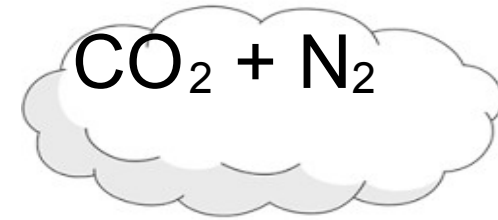
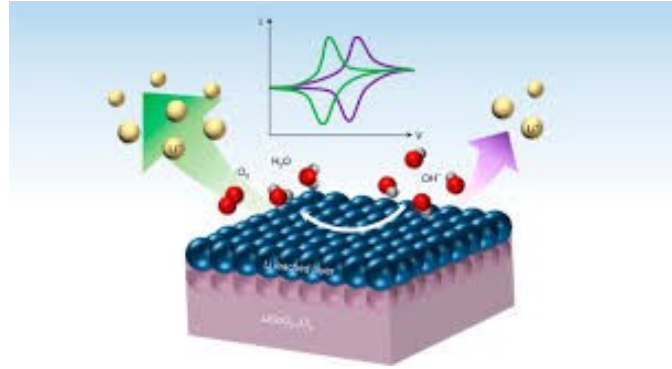
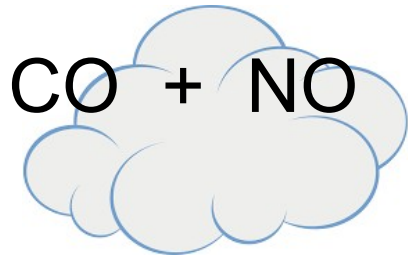
Este es el programa básico, podemos modificarlo añadiendo

- a) Desorción
- b) Coadsorción
- c) Difusión
- d) Impurezas

a) b) c) Efectos térmicos

# Yaldram-Kham Model (YK) 1991

Modelo de gas reticular: reduction de NO en una superficie.



El proceso está controlado por un parámetro  $\gamma$ , la probabilidad de que que la molécula que llega a la superficie es CO, es proporcional a la presión parcial de CO en la atmósfera.

. It is very similar to the Ziff-Gulari-Barshad model (ZGB) for the  $\text{CO} + 1/2\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$  process.

# Monte Carlo simulations

Square lattice of  $L \times L$  (*catalytic surface*)

Select a site  $i$  at random,

**Empty:** CO adsorption with probability  $y$ , NO with  $1-y$

*The NO adsorption requires the existence of two nn empty sites,*

## **On the surface**

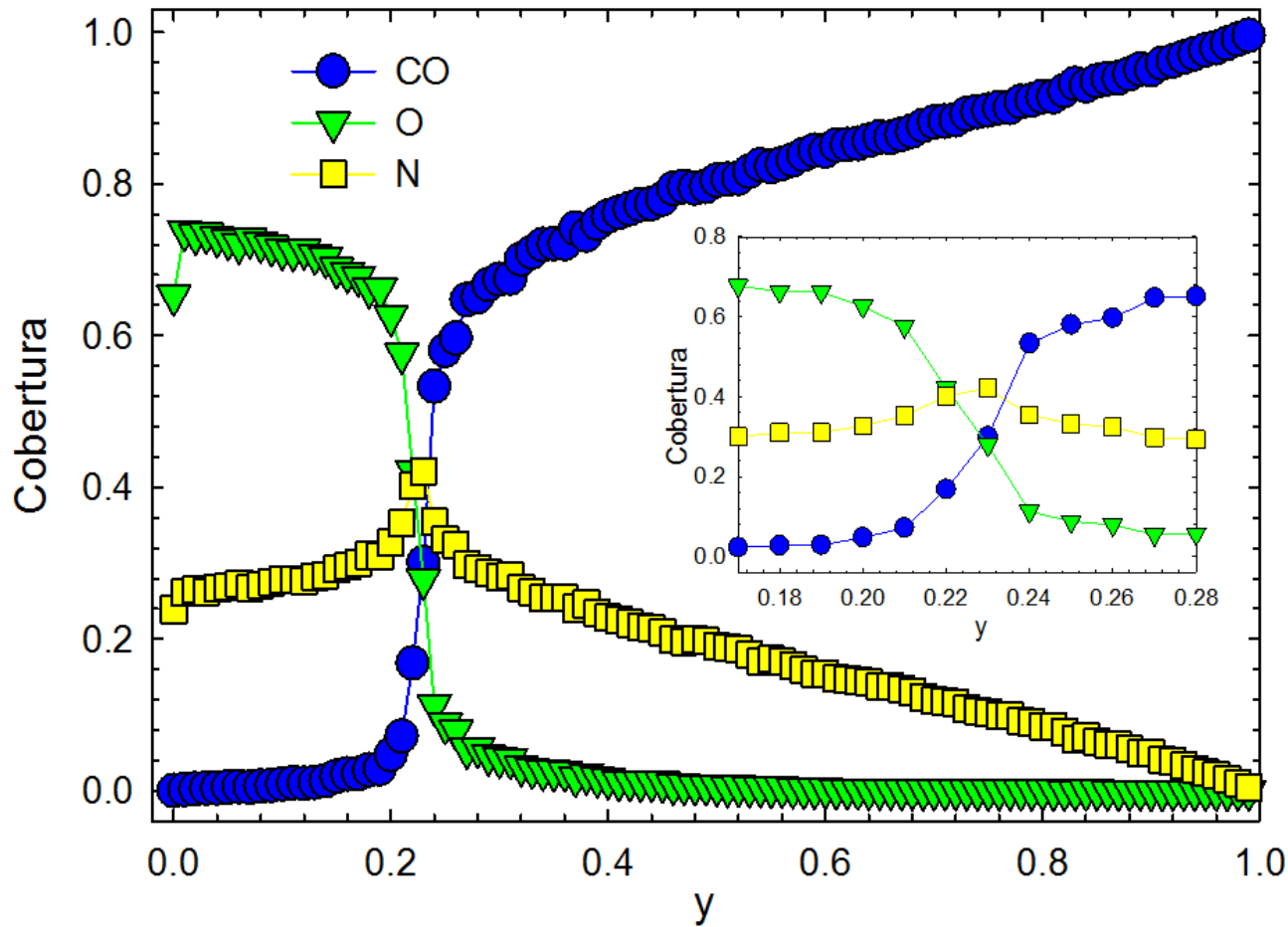
Pairs consisting of an nn CO and O react: a  $\text{CO}_2$  molecule is released, and two nn sites are vacated. Pairs consisting of nn N react and a  $\text{N}_2$  is released, two sites are vacated.

We start with an empty lattice, wait until the system reaches an steady state and start to collect data. We measure

**Coverages:** # of sites of the surface covered by a specie/ $(L \times L)$

**Reaction rates:** # of reactions that occurs in one MCS/ $(L \times L)$

Time unit: Monte Carlo Step per Site, in which each site is visited on average once. ( $L \times L$  visits).



In a square lattice, the YK model **does not have a stable reactive phase**. Once the steady state is reached there is no production of  $N_2$  or  $CO_2$

**Well known result !!!**

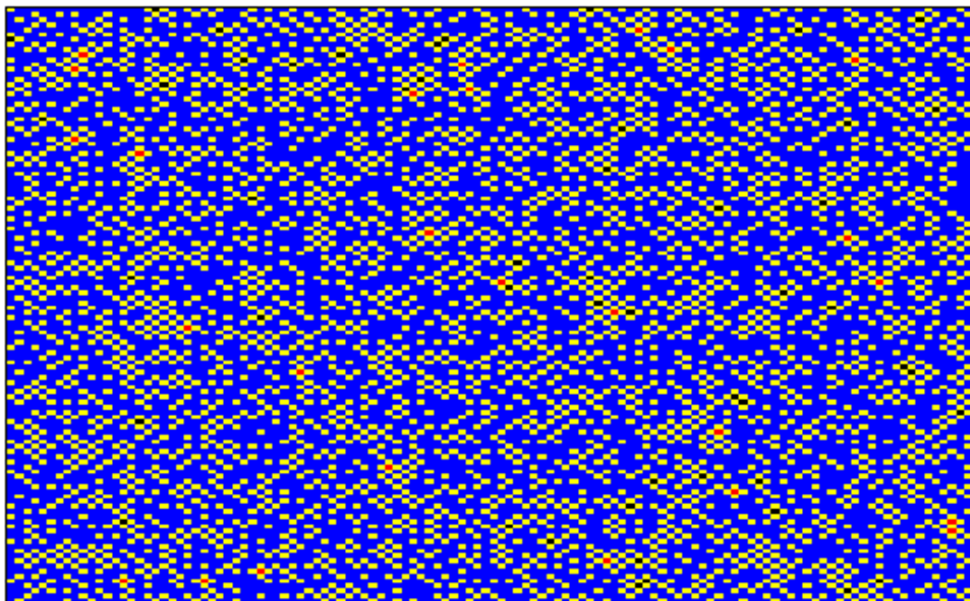
This is due to the topology of the lattice. YK has a reactive phase in an hexagonal lattice. The ZGB model has a reactive phase in a square lattice.

Around  $y=0.23$  the configuration of the lattice changes

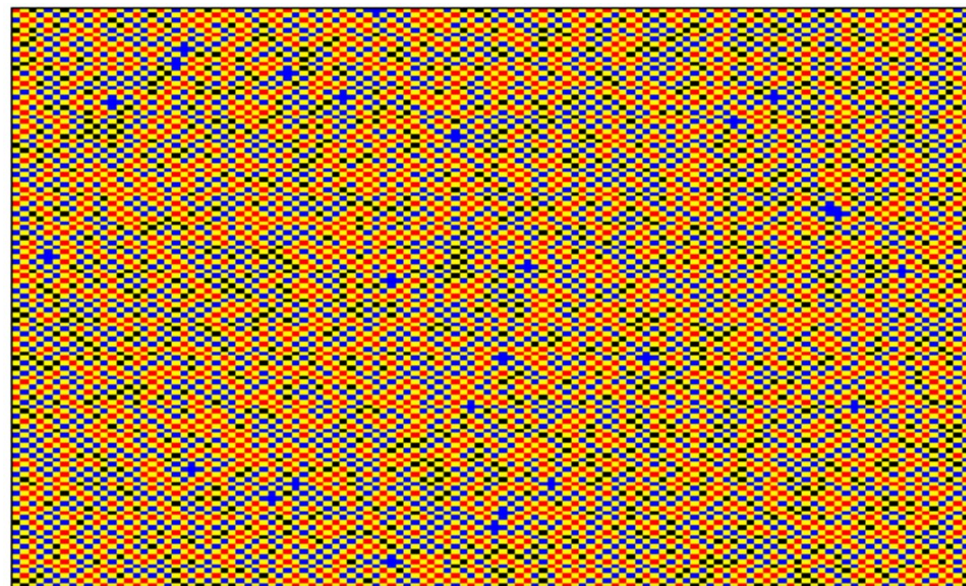


The desorption of CO favors the creation of N checkerboard structures at intermediate values of  $y$ . **O** **CO** **N** **Empty**

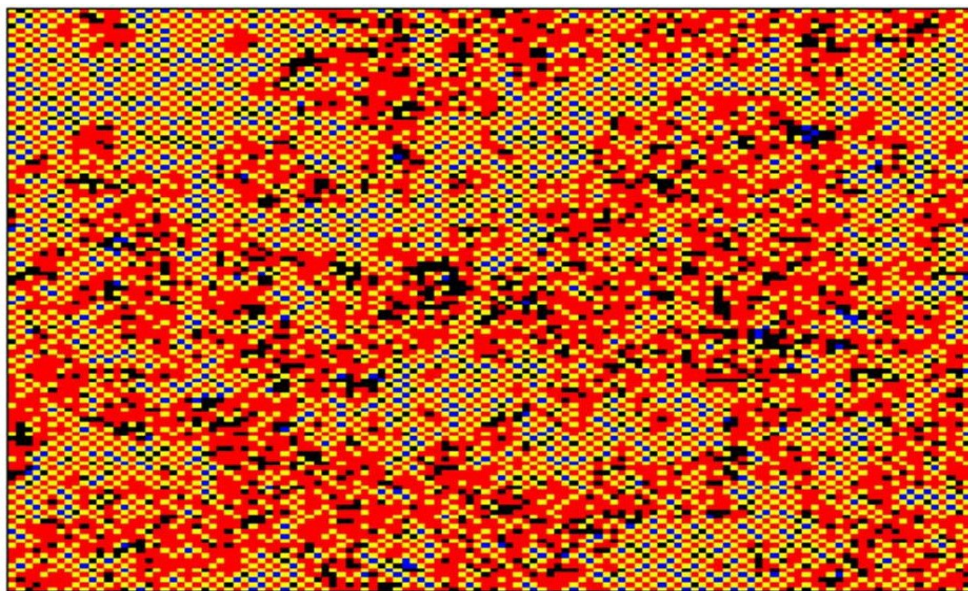
$y = 0.1$



$y = 0.35$



$y = 0.5$



$y = 0.9$

