



VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

Adsorción y transiciones de fases de cristales líquidos nemáticos en dos dimensiones: ecuación de Van der Waals generalizada

Zonta María Virginia, Ezequiel R. Soulé.

¹Instituto de Investigación en Ciencia y Tecnología de Materiales (INTEMA) – Universidad Nacional de Mar del Plata - CONICET, ersoule@fi.mdp.edu.ar

Resumen del trabajo:

En este trabajo se desarrolla una ecuación de estado generalizada de Van der Waals, para describir el comportamiento de partículas rectangulares de ancho B y largo L en una superficie, considerando orden orientacional. El modelo se construye combinando la teoría de partícula escalada para describir los efectos de volumen excluido, con interacciones de Maier-Saupe (v) nemáticas e interacciones isotrópicas de Van der Waals (χ). La minimización de la energía libre y el uso de relaciones termodinámicas permite describir las transiciones orden-desorden, coexistencia de fases, comportamiento presión-densidad-temperatura, y, combinado con un modelo de soluciones, la adsorción de las partículas (K_{ads}) en un sustrato.^{1,2}

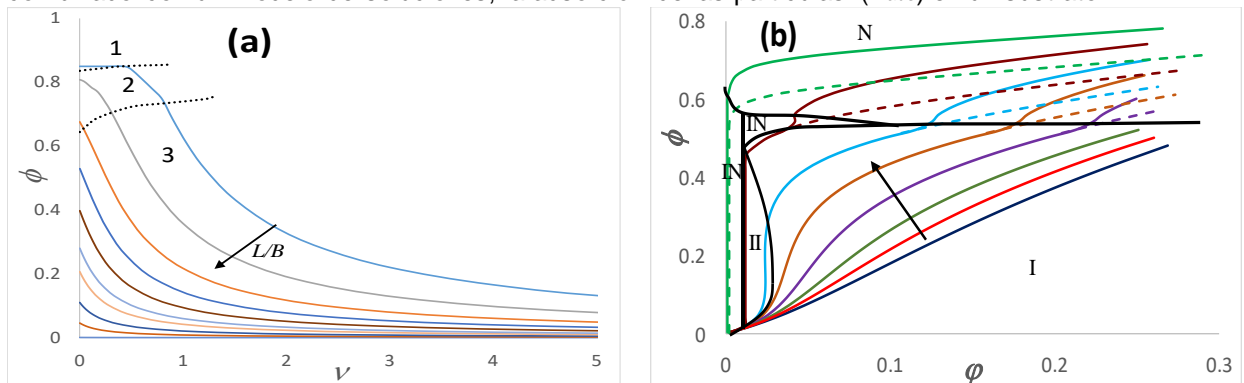


Figura 1. (a) Fracción de área (ϕ) en la transición orden-desorden en función del parámetro de interacción nemático y valores de L/B entre 1.5 y 10000. Las diferentes zonas indican tipos de transición: 1 isotrópica-tetrática, 2: isotrópica-nemática de segundo orden, 3 isotrópica-nemática de primer orden. (b) isothermas de adsorción en términos de la concentración de la solución (ϕ) en contacto con el sustrato, para $L/B=6$, $K_{ads}=1$, $\nu=0$, y χ entre 0 y 2.67 aumentando en la dirección de la flecha. Las líneas de guiones indica la fase isotrópica metaestable. La línea negra indica las transiciones de fases, definiendo las regiones de fase nemática (N), isotrópica (I), y coexistencias de fases.

La figura 1 muestra algunos resultados representativos. Puede verse en la figura 1(a) que a medida que aumentan L/B y ν , disminuye la concentración a la cual se observa la transición orden-desorden. Se observan diferentes tipos de transiciones según se indica en la figura. En la figura 1(b) se observa el comportamiento de adsorción. En condiciones en que existe coexistencia de fases en 2D, se observan discontinuidades en la cantidad de partículas adsorbidas, que involucran transiciones I-I o I-N en la superficie.

1:Zonta MV y Soulé ER, Physical Review E, **2019**, 100, 062703.

2: Soulé ER, Physical Review E, **2020**, 102, 062704.



VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

