



VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

Modelo termodinámico de las transiciones de fases inducidas por fotoisomerización en sistemas azobenceno.

Ezequiel R. Soulé.

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

Resumen del trabajo:

Los compuestos con grupos azobenceno tienen la capacidad de isomerizar de la forma *trans* (estable) a la forma *cis* mediante la aplicación de luz. La molécula *trans* es elongada y puede ser capaz de formar fases líquido-cristalinas, a diferencia de la *cis* que es isotrópica, por lo que la isomerización modifica las propiedades (e.g. ópticas) del material.

En este trabajo se propone un modelo para describir las transiciones de fases inducidas por fotoisomerización en función de la temperatura. A diferencia de modelos previos de bibliografía¹, se utiliza una expresión cinética de isomerización dependiente de las actividades termodinámicas y no de la concentración. Esto permite reproducir la observación experimental de que, en el estado foto-estacionario, la concentración de *trans* es más alta en las fases ordenadas respecto a la fase isotrópica.

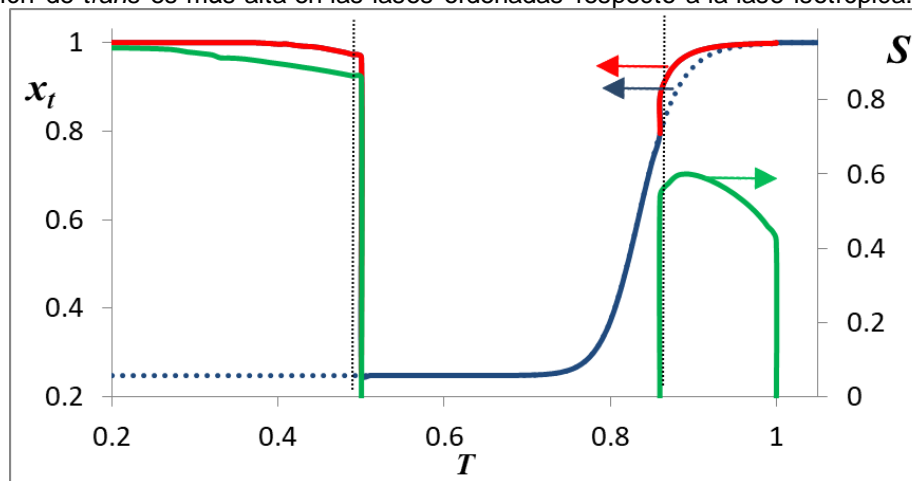


Figura 1. Isomerización y orden nemático en el estado foto-estacionario, en presencia de irradiación moderada. La curva roja es la fracción de *trans* en fase nemática, la curva azul en fase isotrópica (se indica línea punteada cuando esta fase es metaestable), y la verde el parámetro de orden nemático. Las líneas punteadas verticales indican las transiciones N-I

La figura 1 muestra los resultados de transiciones de fases inducidas por la fotoisomerización, en presencia de irradiación moderada (suficiente para generar isomerización, pero sin saturar la concentración de *cis*). A temperaturas altas la fracción de *trans* es cercana a uno y el material se comporta como un cristal líquido regular, pero al bajar la temperatura predomina la isomerización a la forma *cis*, lo que genera una transición a fase isotrópica. Al bajar aún más la temperatura, nuevamente se observa la fase nemática, en este caso de la solución saturada en isómero *cis*. Puede observarse que la fracción de *trans* es significativamente mayor en la fase nemática que en la isotrópica.

1: Sekkat S., Knoll W. Photoreactive Organic Thin Films, Elsevier, 2002.



VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

