



VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

Relación entre estructura y comportamiento de fase de mezclas ternarias con surfactantes

De Virgiliis Andres¹, Bea Edgar A.²

¹ IFLYSIB (CONICET/UNLP), ² CAC (CNEA)
adevir@iflysib.unlp.edu.ar

En los últimos años, la relación entre el equilibrio de fases y la microestructura de sistemas ternarios con surfactantes ha sido estudiada en profundidad, tanto teórica como experimentalmente. Todavía persisten algunas cuestiones sin resolver, sin embargo. Una tiene que ver con los exponentes críticos asociados con la transición orden-desorden entre fases puras y fluido desordenado. Otra se relaciona con la definición misma de una microemulsión, es decir el fluido isótropo pero estructurado cuyo factor de estructura muestra un pico para un $q \neq 0$.

Mediante simulaciones Monte Carlo del modelo de Widom [1,2], que describe una mezcla del tipo agua-aceite-surfactante, con igual fracción de agua y aceite, monitoreamos el factor de estructura $S(q)$ promediado en las tres direcciones espaciales. La ubicación de la curva crítica orden-desorden, y los exponentes asociados, se definen a partir de la divergencia de la longitud de correlación ξ y de la susceptibilidad χ , obtenidas de $S(q)$ ajustado con la expresión de Ornstein-Zernicke.

Por otra parte, para valores de composición y temperatura correspondientes a la fase desordenada, el factor de estructura se interpreta en términos del modelo de Teubner y Strey [3], que utiliza dos escalas de longitud características para describir la microestructura: una longitud de correlación d que mide la quasi-periodicidad entre agua y aceite (como ocurre en la fase lamelar), y una longitud de persistencia ζ que representa la dispersión en los valores de d . La divergencia de esta última define la línea de desorden, mientras que la línea de Lifshitz se define a partir de la condición $q_{\max} = 0$. La evolución del pico q_{\max} del factor de estructura con la composición de la mezcla, se compara con valores experimentales y con teorías microscópicas [4].

Nuestros resultados confirman que el modelo de Widom es consistente con la forma funcional de Teubner y Strey, pudiendo localizar tanto la línea de desorden como la línea de Lifshitz. Además, la variación continua que observamos en los exponentes críticos permite dilucidar las discrepancias existentes entre los diferentes experimentos [5].

- [1] Widom B., *J. Chem. Phys.* **1989**, 90, 2437; *ibid* **1986**, 84, 6943.
- [2] Bea E. A., Trobo M. L., De Virgiliis A., *Physica B* **2019**, 553, 113.
- [3] Teubner M., Strey R., *J. Chem. Phys.* **1987**, 87, 3195.
- [4] Gompper G., Schick M., *Phys. Rev. B* **1990**, 41, 9148.
- [5] Bea E. A., De Virgiliis A., *en preparación*.

