

Consideraciones entrópicas para describir la fase de alto cubrimiento que aparece en un sistema de varillas rígidas largas adsorbidas sobre redes en 2D

- Antonio J. Ramirez-Pastor,¹ Pedro Marcelo Pasinetti,¹ Eugenio E. Vogel,² Gonzalo Saravia²

¹INFAP, CONICET, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales, Universidad Nacional de San Luis

²Departamento de Ciencias Físicas - Universidad de La Frontera, Temuco, Chile

El estudio de sistemas de varillas largas y finas en solución ha sido de gran interés para la mecánica estadística desde hace muchos años. Onsager [Ann. N. Y. Acad. Sci. 51, 627 (1949)] fue el primero en notar que, interactuando sólo a través de interacciones de volumen excluido, estos objetos presentan orden orientacional de tipo nemático a altas densidades. Posteriormente, Flory [J. Chem. Phys. 10, 51 (1942)] y Huggins [J. Phys. Chem. 46, 151 (1942)] extendieron el trabajo anterior, desarrollando la base fundamental sobre la cual el efecto de la orientación de las moléculas puede ser añadido. A pesar del esfuerzo de Flory y otros autores posteriores, la inherente complejidad de un sistema de barras rígidas sobre una red ha impedido el desarrollo de soluciones analíticas satisfactorias, apareciendo la simulación computacional como una importante herramienta para estudiar este tipo de problemas. En este sentido, un sistema de k -meros lineales sobre una red cuadrada fue estudiado por Ghosh y Dhar [Eur. Phys. Lett. 78, 20003 (2007)] mediante simulación Monte Carlo. Los autores encontraron fuerte evidencia numérica sobre la existencia de un orden nemático a densidades intermedias para tamaños $k \geq 7$ y aportaron argumentos teóricos sobre una segunda transición nemático-isotrópico (NI) ocurriendo a densidades próximas a 1. Así, a medida que aumenta la densidad, aparecen tres fases sobre la superficie para sistemas de varillas largas: una fase desordenada de baja densidad (fase D), una fase nemática de densidad intermedia (fase N) y una fase de alta densidad en la que no hay orden orientacional (fase O). Las fases D y N han sido extensivamente estudiadas en la literatura [Linares, Romá, Ramirez-Pastor, J. Stat. Mech. P03013 (2008)]. No ha ocurrido lo mismo con la fase de alto cubrimiento. En este contexto, nos proponemos en este trabajo avanzar sobre la caracterización de la fase O, usando la entropía configuracional de la fase adsorbida como principal cantidad de estudio. El abordaje del problema incluye simulaciones de Monte Carlo en la asamblea gran canónica y cálculos básicos de combinatoria.