



ADSORCIÓN DE CADENAS AUTO-ENSAMBLADAS SOBRE REDES

L.G. López ^{(1)*}, A.J. Ramirez-Pastor ⁽¹⁾

⁽¹⁾ Departamento de Física, Universidad Nacional de San Luis, INFAP-CONICET, ARGENTINA

*lglopez@unsl.edu.ar

RESUMEN

Mediante simulación de Monte Carlo en la asamblea gran canónica, estudiamos la adsorción de monómeros (con dos polos atractivos) sobre superficies homogéneas. Dichas unidades son capaces de auto-ensamblarse formando cadenas lineales con orientaciones discretas relativas al sustrato. En el modelo considerado aquí, la superficie está representada por una red bidimensional (cuadrada o triangular) y una transición de fase orientacional continua tiene lugar, conforme la temperatura disminuye o la densidad numérica de partículas aumenta. El proceso ha sido monitoreado siguiendo el comportamiento de las isothermas de adsorción (potencial químico como función del cubrimiento) para diferentes valores de temperatura. Los datos numéricos fueron comparados con predicciones analíticas de campo medio y funciones exactas, tanto para sistemas no interactuantes como para sistemas interactuantes unidimensionales. Los resultados obtenidos revelan la existencia de tres regímenes de adsorción, según sea la temperatura. Además, los diagramas de fases fueron calculados a partir de las singularidades en las isothermas de adsorción, mostrándose estas como cantidades sensibles a la transición. Estos y otros resultados se exponen y se discuten en el presente trabajo.

Palabras clave: Auto-ensamblado, Cadenas, Comportamiento crítico, Orden nemático.

Referencias

[1] López, L.G.; Ramirez-Pastor, A.J. *Adsorption of Self-Assembled Rigid Rods on Two Dimensional Lattices*, Langmuir, (2012), 14917 - 14924.