

Equilibrios líquido-vapor atípicos en coloides decorados

Noé G. Almarza*

Instituto de Química-Física Rocasolano
Consejo Superior de Investigaciones Científicas
C/ Serrano 119, E-28006 Madrid

Los recientes avances en la preparación de partículas coloidales a cuyas superficies se incorporan centros de interacción *enlazantes* están abriendo un interesante campo de estudio de la química-física supramolecular.^{1,2} Resulta de gran interés, tanto teórico como práctico, el análisis del efecto del número y de la topología de los citados centros de interacción sobre el diagrama de fases de estos sistemas.^{1,2} Por otra parte, el alto grado de direccionalidad de las interacciones presentes en los correspondientes modelos, así como el hecho de que las interacciones energéticas involucradas en la formación de fases condensadas sean mucho mayores que la energía térmica plantean interesantes retos desde el punto de vista de la simulación *molecular*.

Los modelos de partículas coloidales esféricas decoradas con dos tipos de centros de interacción (*A* y *B*) son particularmente interesantes³. Jugando con el número de centros de cada tipo, tamaños, distribución sobre la superficie de la esfera, e interacciones, pueden obtenerse distintos mecanismos de autoensamblado y diagramas de fase peculiares.

Uno de los resultados más sorprendentes es la aparición de los denominados líquidos *vacíos* (*empty liquids*)^{2,4-6}. En estos sistemas la densidad de una fase líquida, en equilibrio termodinámico con su vapor, puede disminuir con la temperatura, (FIG. 1) alcanzándose a bajas temperaturas densidades del líquido anormalmente bajas (típicas de aerogeles).

En esta contribución se presentarán resultados de simulación mediante métodos de Monte Carlo de modelos primitivos (en el continuo y sobre redes regulares) que ilustran la física subyacente a la aparición de diagramas de fases con distintas topologías.

Los modelos considerados representan partículas coloidales esféricas cuya superficie contiene dos zonas con características físico-químicas bien diferenciadas. Estas zonas se corresponden por una parte con dos centros de interacción (tipo *A*), y por otra con el resto de la superficie (zona de tipo *B*). Las interacciones entre pares de partículas son de corto alcance y dependen de las zonas de la superficie de las esferas que son atravesadas por el segmento que une los centros de las partículas.

Dentro de este marco, se mostrará como una adecuada selección de los parámetros de los modelos permite obtener distintos diagramas de fase. En concreto se considerarán los siguientes casos:

(a) Equilibrios líquido-vapor con fases líquidas presentando propiedades de líquidos vacíos, mediante modelos en red y en el continuo.

(b) Formación de fases con orden orientacional⁷⁻⁹, incluyendo fases nemáticas, originadas por la presencia de *moléculas* elongadas formadas por procesos de autoensamblado de partículas coloidales, considerándose modelos en red y en el continuo.

(c) Finalmente, considerando sistemas monocompone, se discutirá la posibilidad de encontrar diagramas de fase líquido-vapor reentrantes, en los que la coexistencia de fases aparece acotada entre dos temperaturas (temperaturas crítica inferior y superior).

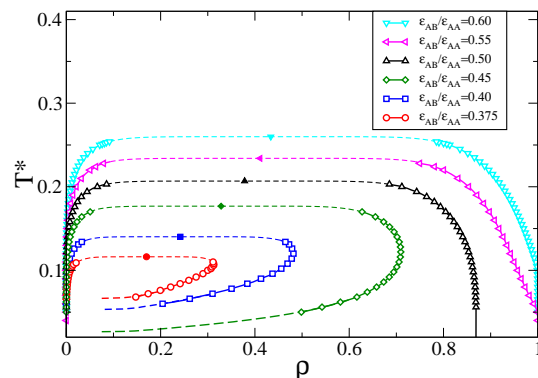


FIG. 1. Diagrama de fases del modelo 2A2B (Ref. 6) definido sobre una red bidimensional cuadrada

* noe@iqfr.csic.es

¹ F. Sciortino, Collect. Czech. Chem. Commun. **75**, 349 (2010).

² F. Sciortino and E. Zaccarelli, Current Opinion in Solid State and Materials Science, **15**, 246 (2011).

³ J.M. Tavares, P.I.C. Teixeira, and M.M. Telo da Gama, Phys. Rev E **80**, 021506 (2009).

⁴ J. Russo, J.M. Tavares, P.I.C. Teixeira, M.M. Telo da Gama, and F. Sciortino, J. Chem. Phys. **135**, 034501 (2011).

⁵ J. Russo, J.M. Tavares, P.I.C. Teixeira, M.M. Telo da Gama, and F. Sciortino, Phys. Rev. Lett. **106**, 085703 (2011).

⁶ N.G. Almarza, J.M. Tavares, M. Simões, and M.M. Telo da Gama, J. Chem. Phys. **135**, 174903 (2011).

⁷ N.G. Almarza, J.M. Tavares, and M.M. Telo da Gama, Phys. Rev. E **82**, 061117 (2010);

⁸ N.G. Almarza, J.M. Tavares, and M.M. Telo da Gama, J. Chem. Phys. **134**, 071101 (2011).

⁹ N.G. Almarza, J.M. Tavares, and M.M. Telo da Gama, Phys. Rev. E **85**, 053102 (2012).