

# Modelado de Transiciones de Fases en Cistales Líquidos Confinados a 2D

## INTRODUCCIÓN

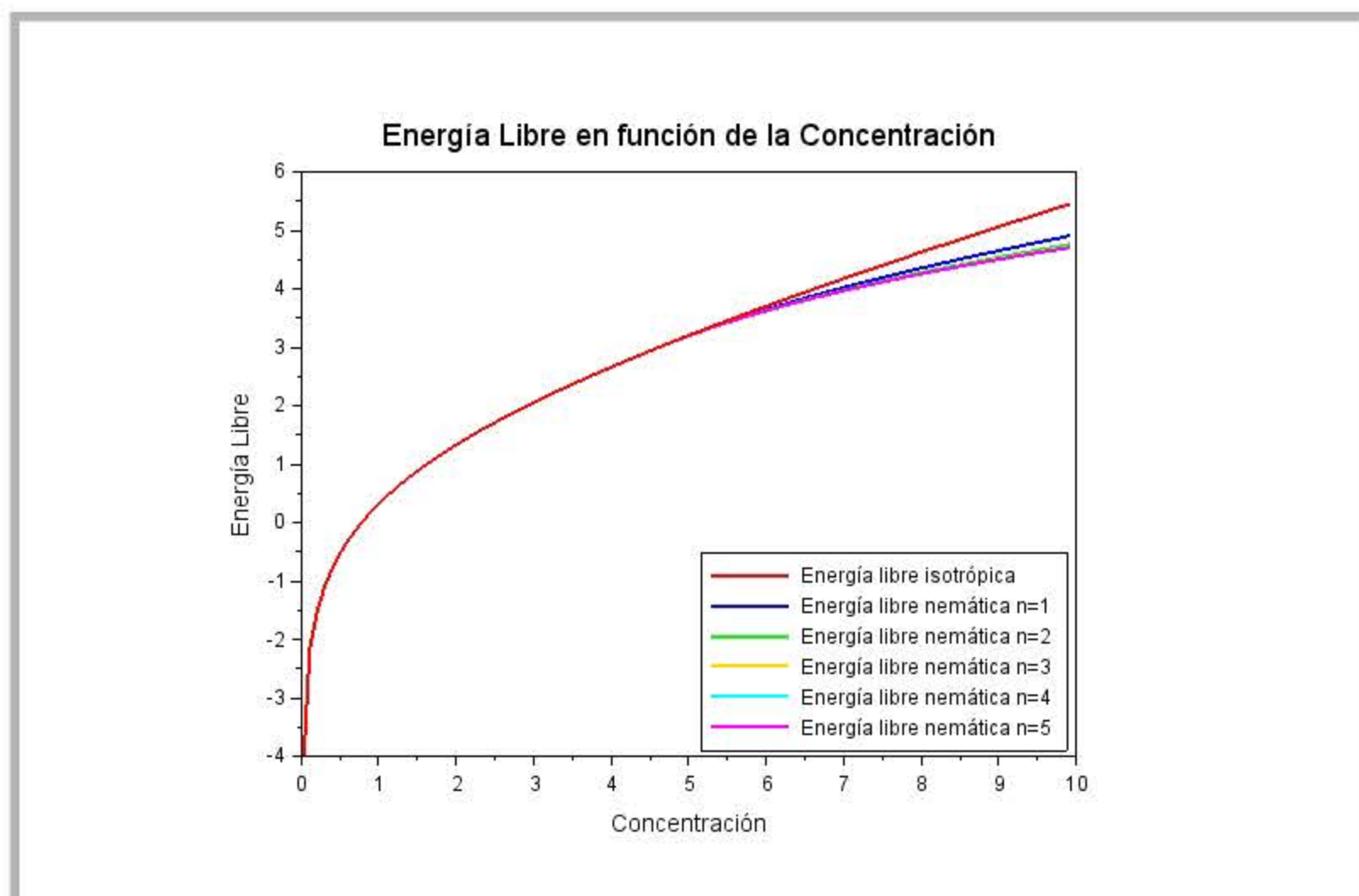
Los cristales líquidos (CL) son materiales que, en su estado líquido, presentan cierto grado de orden molecular. El ordenamiento de CL en dos dimensiones ha sido estudiado teóricamente y experimentalmente, y se ha encontrado un comportamiento no-universal de la transición nemática-isotrópica, que dependiendo de las características del material y sus interacciones puede ser de primer o segundo orden.

## OBJETIVOS

Estudiar teóricamente los diagramas de fases de materiales líquidos adsorbidos en una superficie. Formular un modelo termodinámico basado en la teoría de Onsager que considera interacciones de volumen excluido entre las moléculas, y extender el modelo para considerar interacciones atractivas.

## METODOLOGÍA

Se formuló un modelo con interacciones de volumen excluido en 2D. Se resolvió, mediante una expansión en funciones coseno, la función de distribución y el término de interacción. Se compararon los resultados con 3D.



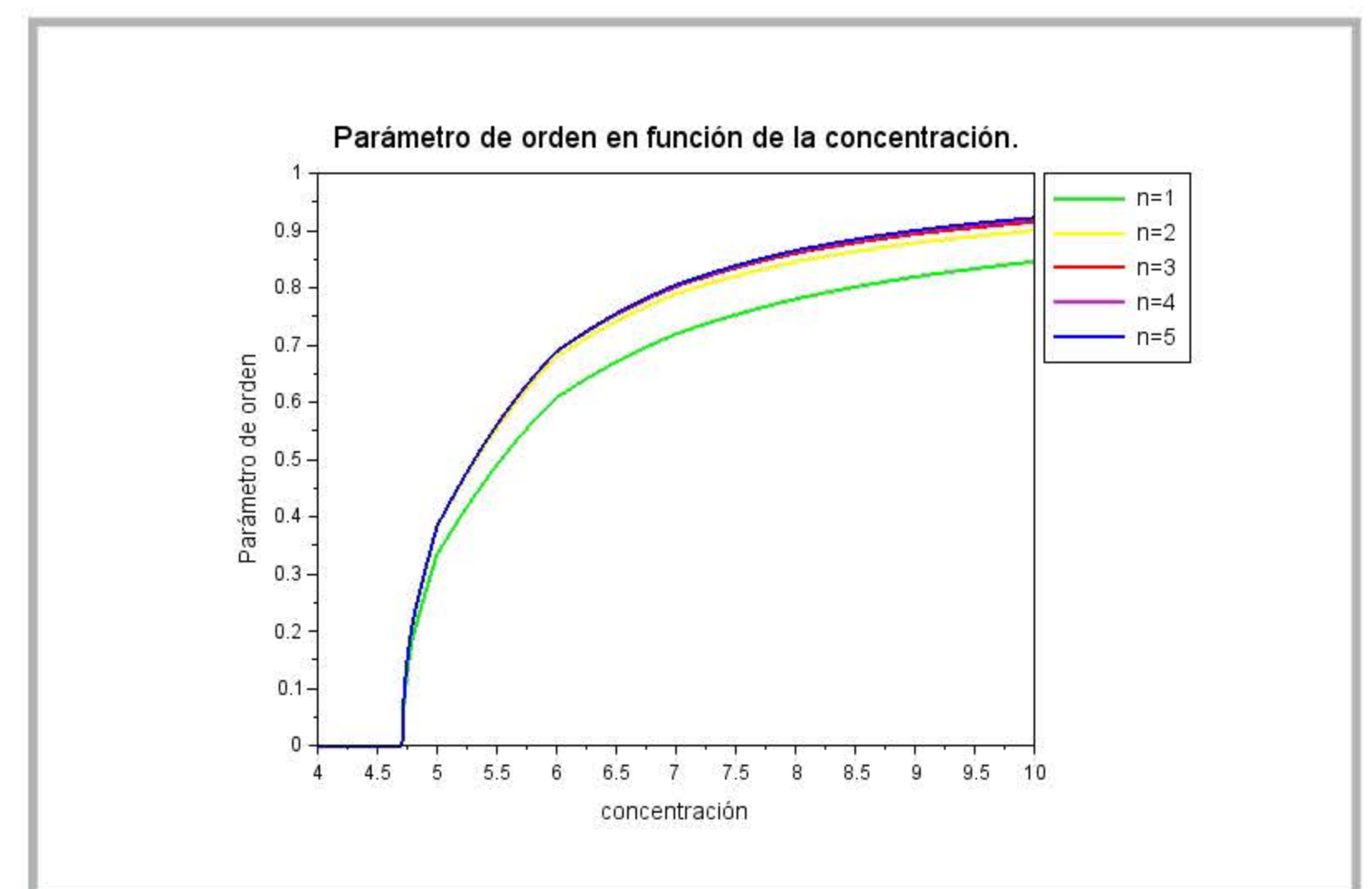
**Ing. María Virginia Zonta**

Ingeniería Química. UNL.

Universidad Nacional de Mar del Plata (UNMdP)

Dr. Ezequiel Soulé

Ingeniería, Arquitectura y Tecnología  
mariavirginiazonta@gmail.com



## RESULTADOS

Se observó que en 2D no existe coexistencia entre la fase isotrópica y nemática, sino que la transición de fases es continua y se produce para un valor de concentración adimensional de 4,712. (en el caso de 3D, hay coexistencia entre fases isotrópica y nemática con conc. de  $c_i=3,29$  y  $c_a=4,188$ ). Se está estudiando el modelo con la inclusión de interacciones atractivas tipo Maier-Saupe.

## CONCLUSIONES

Se estudió la transición de fases isotrópica-nemática en un CL confinado a 2D con interacciones de volumen excluido. El número de términos que se utiliza en la expansión afecta solamente el cálculo para parámetros de orden grandes, por lo tanto la concentración a la cual se produce la transición no se ve afectada por el número de términos.