

Modelo mecánico del proceso de adsorción de “k-meros”

Tomás de Navascués¹, Marcelo Pasinetti², Antonio Ramirez-Pastor², Eugenio Vogel^{3,4}, Martín Maza-Cuello¹, Diego Maza

¹ Departamento de Física y Matemática Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad de Navarra, E-31080 Pamplona, España.

² Departamento de Física, Instituto de Física Aplicada (INFAP), Universidad Nacional de San Luis-CONICET, Argentina.

³ Centro para el Desarrollo de la Nanociencia y Nanotecnología (Cedenna), Santiago, Chile.

⁴ Departamento de Ciencias Físicas, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile.

En este trabajo presentamos resultados experimentales preliminares sobre la posibilidad de explorar la dinámica y estados de equilibrio de un gas de “k-meros” en un símil mecánico, donde el material sustrato se modela con una base acanalada y los “k-meros” por varillas de longitud variable. Presentamos también algunos resultados numéricos que permiten predecir la dinámica esperable en el sistema.

Así, el sistema consta de una base en la cual se han trazado canaletas equiespaciadas una distancia de 5 mm con una configuración cuadriculada. Las canaletas tienen una profundidad de 1 mm y en ella pueden quedar atrapadas varillas que en principio se han elegido de 20 mm de longitud. Las varillas son cilindros rectos de grafito de 0.7 mm de diámetro.

La base se encuentra colocada sobre un vibrador vertical que produce oscilaciones armónicas en la dirección vertical. Las aceleraciones alcanzadas, tanto en la vertical como los posibles residuos en los otros ejes son medidas con un acelerómetro de 3 ejes insertado en el centro de la base. En principio pueden modificarse tanto la frecuencia como la amplitud de las oscilaciones. En este trabajo, se ha fijado la frecuencia de oscilación en 40 Hz y se ha variado la aceleración de la base hasta valores superiores a las 4 g's. Todo el sistema puede verse en la Fig. 1.

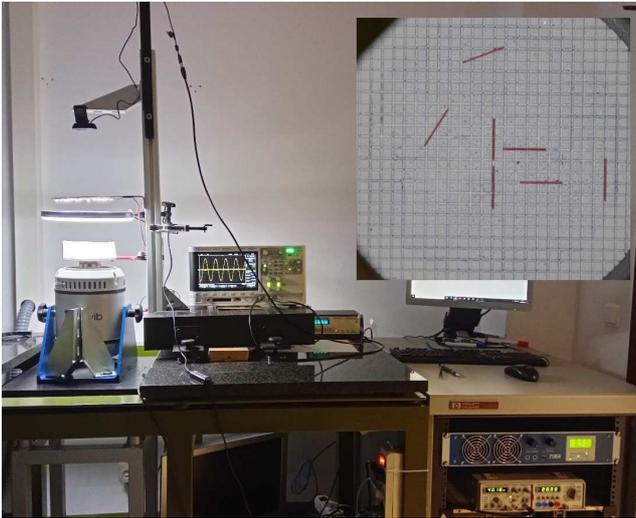


Fig. 1. Vista general del sistema experimental. Detalle: Imagen obtenida por la cámara cenital donde se ve el sistema acanalado con varillas adsorbidas y desorbidas.

En una primera etapa se exploró la dinámica de una única varilla para estudiar su dinámica sobre el sustrato así como para conocer las probabilidades tanto de adsorción como de desorción de las mismas en función de la aceleración adimensional $\Gamma = \frac{Aw^2}{g}$. Se comprobó así que para conseguir tiempos donde las varillas permanecieran en estados tanto adsorbidos como desorbidos. Se pudieron estimar estas probabilidades asumiendo un comportamiento Markoviano donde la adsorción de una varilla luego de aplicar N oscilaciones está dada por una PDF geométrica, es decir $(1 - p)^{N-1} p$.

Se estudió también la evolución espacial de las varillas en el régimen desorbido, donde se comprobó que los movimientos superficiales eran tales que una varilla podía visitar cualquier sitio de la red antes de ser adsorbida. Más importante aún, se comprobó que estos movimientos poseen una distribución de probabilidad de saltos dada por una distribución Gamma, compatible con un proceso difusivo tipo Levy.

Todos estos resultados resultan compatibles con la aproximación numérica lo que validaría el sistema para estudiar su evolución hacia estados más densos. La simulación numérica GCMC a una temperatura T y presión P , considera el estado adsorbido de un conjunto de varillas, es decir, cuando cada una de estas se encuentran atrapadas en las canaletas y sin posibilidades de solaparse entre sí. Los resultados experimentales resultan compatibles con la aproximación numérica lo que validaría el sistema para estudiar su evolución hacia estados más densos.

[1] Nematic-disordered phase transition in systems of long rigid rods on two-dimensional lattices. Joyjit Kundu, R. Rajesh, Deepak Dhar, and Jürgen F. Stilck, *Phys. Rev. E* **87**, 032103 (2013). Sequence of phase transitions in a model of interacting rods. Juliane U. Klamser, Tridib Sadhu, and Deepak Dhar, *Phys. Rev. E* **106**, L052101 (2022)

[2] Entropy-driven phases at high coverage adsorption of straight rigid rods on two-dimensional square lattices, P. M. Pasinetti, A. J. Ramirez-Pastor, E. E. Vogel, and G. Saravia, *Phys. Rev. E* **104**, 054136 (2021).