

"ESTRUCTURA DE UNA MICROEMULSIÓN CERCA DEL PUNTO CRÍTICO"

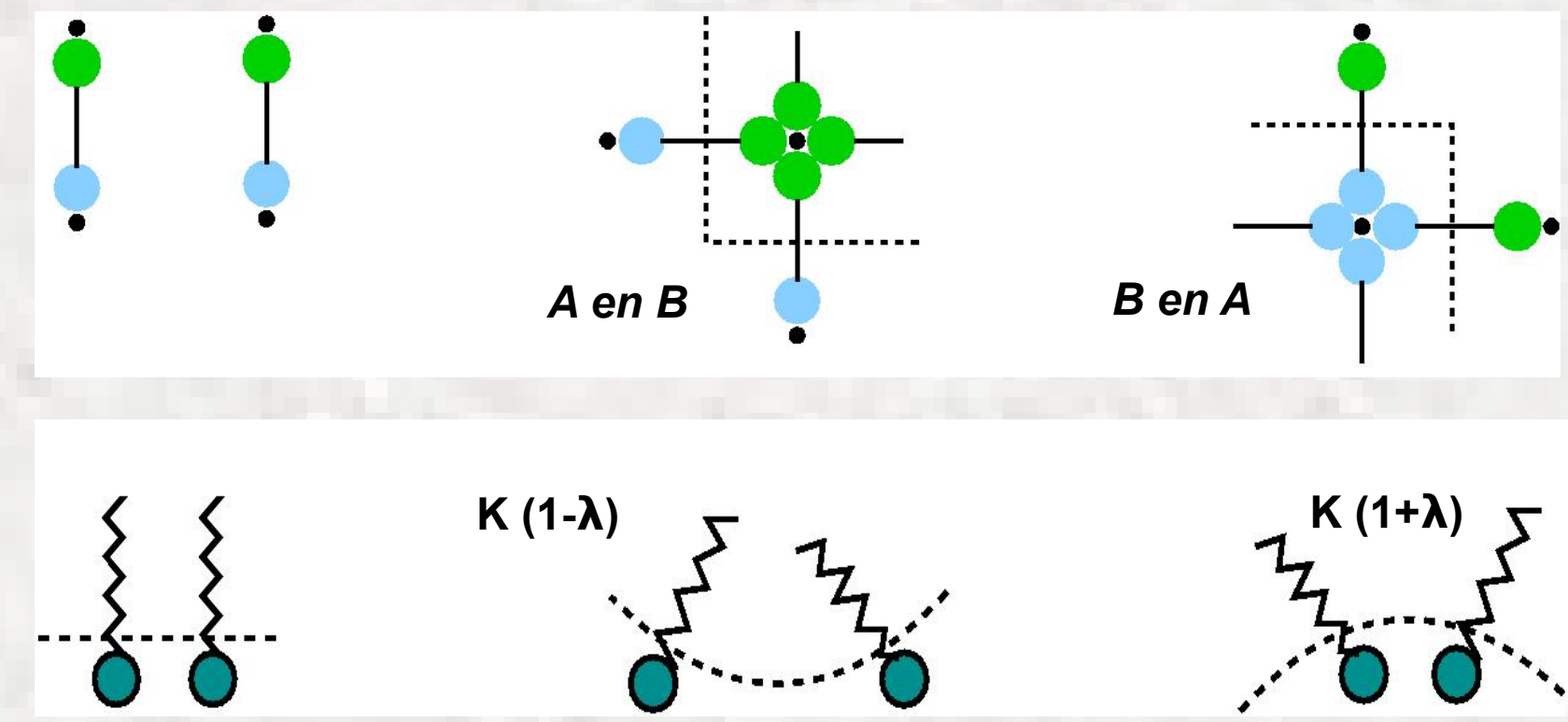


A. De Virgiliis

Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (CONICET / UNLP)
Calle 59 nro. 789 (B1900BTE) La Plata - Argentina

1. Modelo de Widom [1]

- Tres tipos de moléculas: AA (aceite), BB (agua), AB (surfactante), colocadas en una red cúbica. Sólo los extremos del mismo tipo pueden ocupar un dado sitio.
- Film de surfactante: centros de las moléculas AB; separa las regiones de tipo aceite (dominios AA) de las de tipo agua (dominios BB).
- En general el film de surfactante tiene energía de curvatura asimétrica, $K > 0$ y $\lambda \neq 0$.

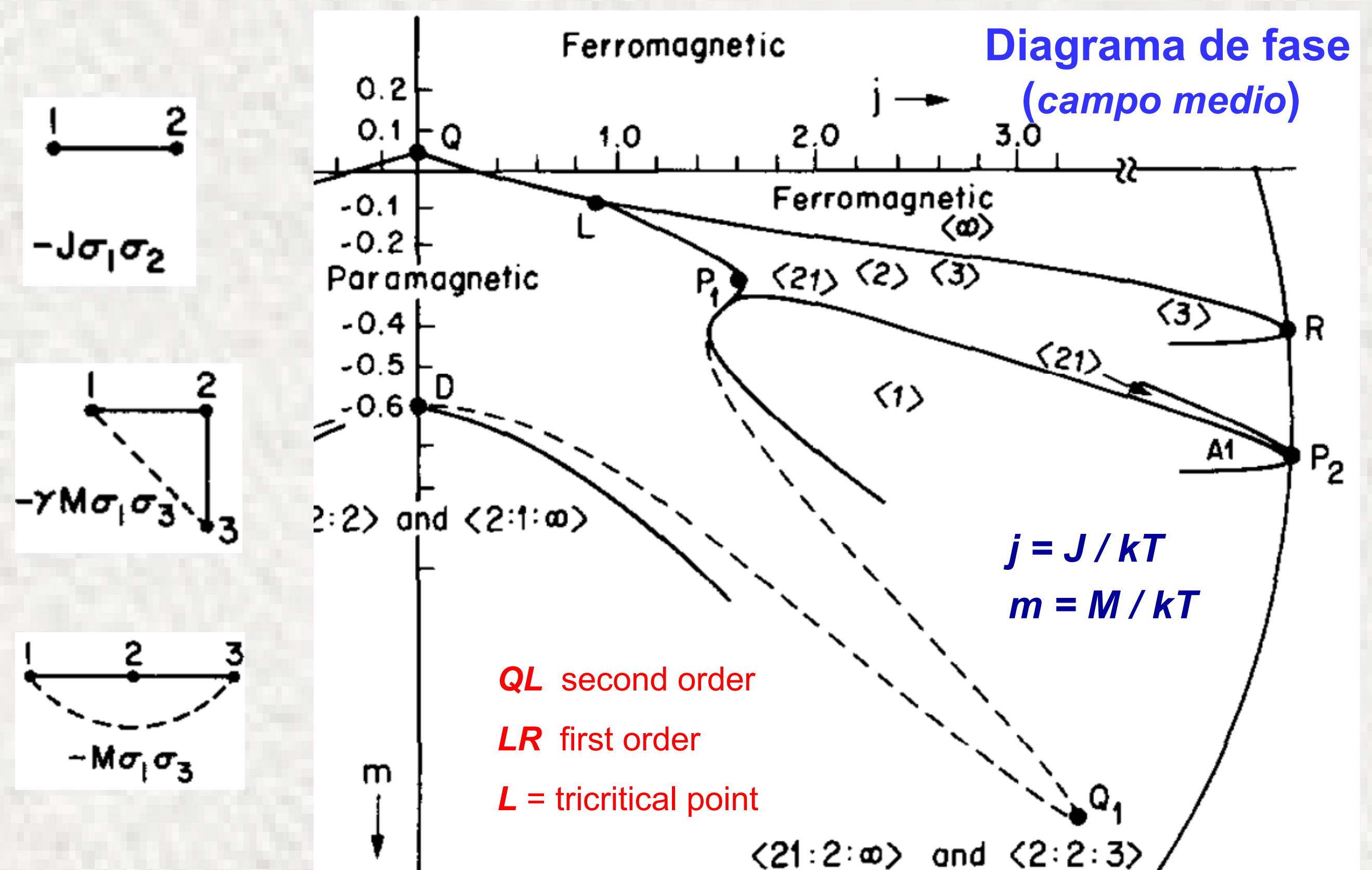


2. Modelo de Ising equivalente

- Sitios AA (aceite) representados por un par de espines $S = \{-1, -1\}$.
- Sitios BB (agua) representados por un par de espines $S = \{+1, +1\}$.
- Surfactante (AB): par $S = \{-1, +1\}$ ó par $S = \{+1, -1\}$.
- Interacciones a primeros vecinos ferromagnéticas ($J > 0$).
- Interacciones a segundos vecinos antiferromagnéticas ($2M < 0$).
- Interacción entre vecinos separados una distancia $a=2$ ($M < 0$).
- Caso de estudio: energía de curvatura simétrica ($\lambda=0$) e igual potencial químico para agua y aceite.

$$H = -J \sum_{i,j} S_i S_j - 2M \sum_{i,k} S_i S_k - M \sum_{i,l} S_i S_l$$

- Diagrama de fase (plano M - J): resuelto a nivel de campo medio [2].
- *Microemulsión*: fluido desordenado (pero con estructura mesoscópica).



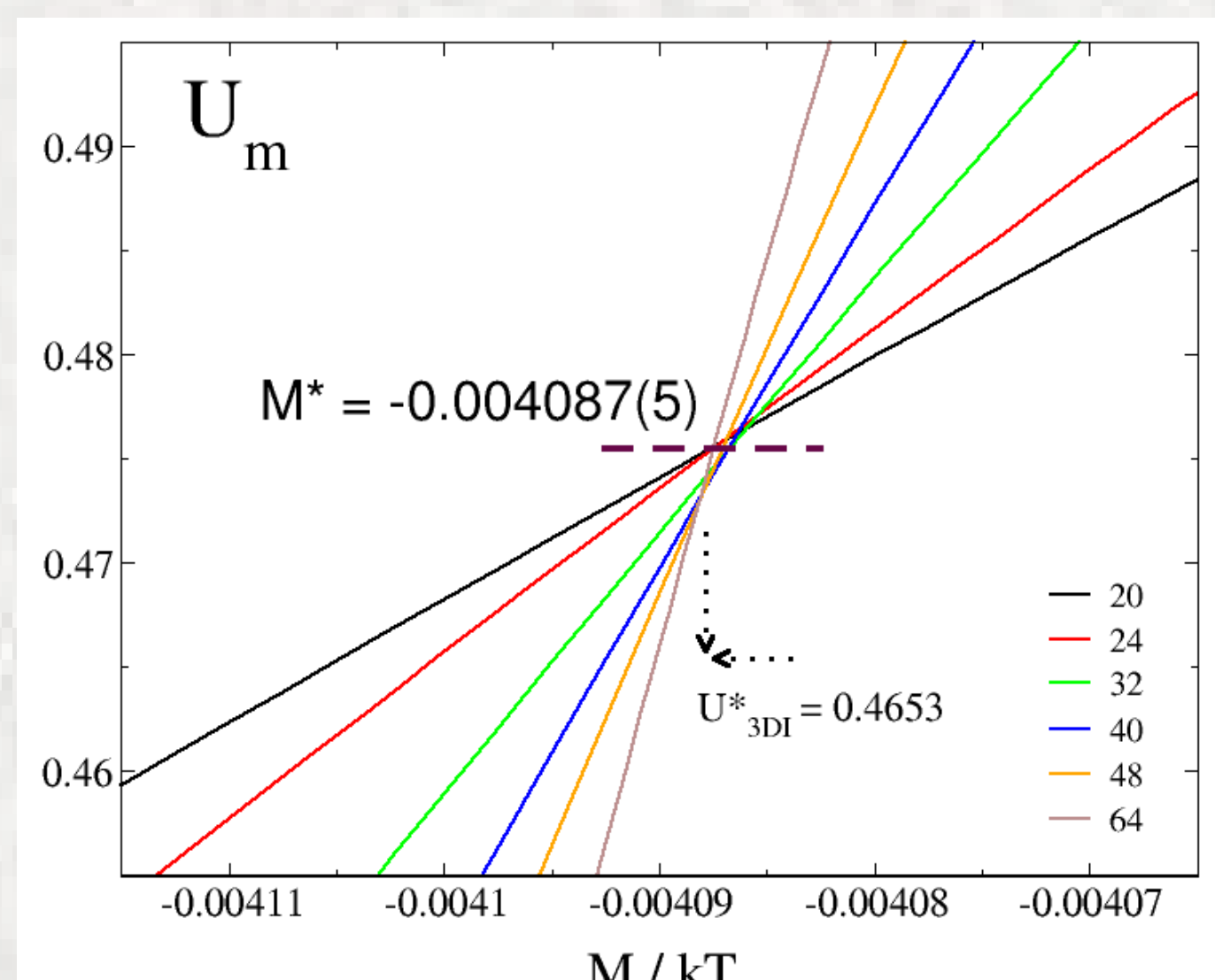
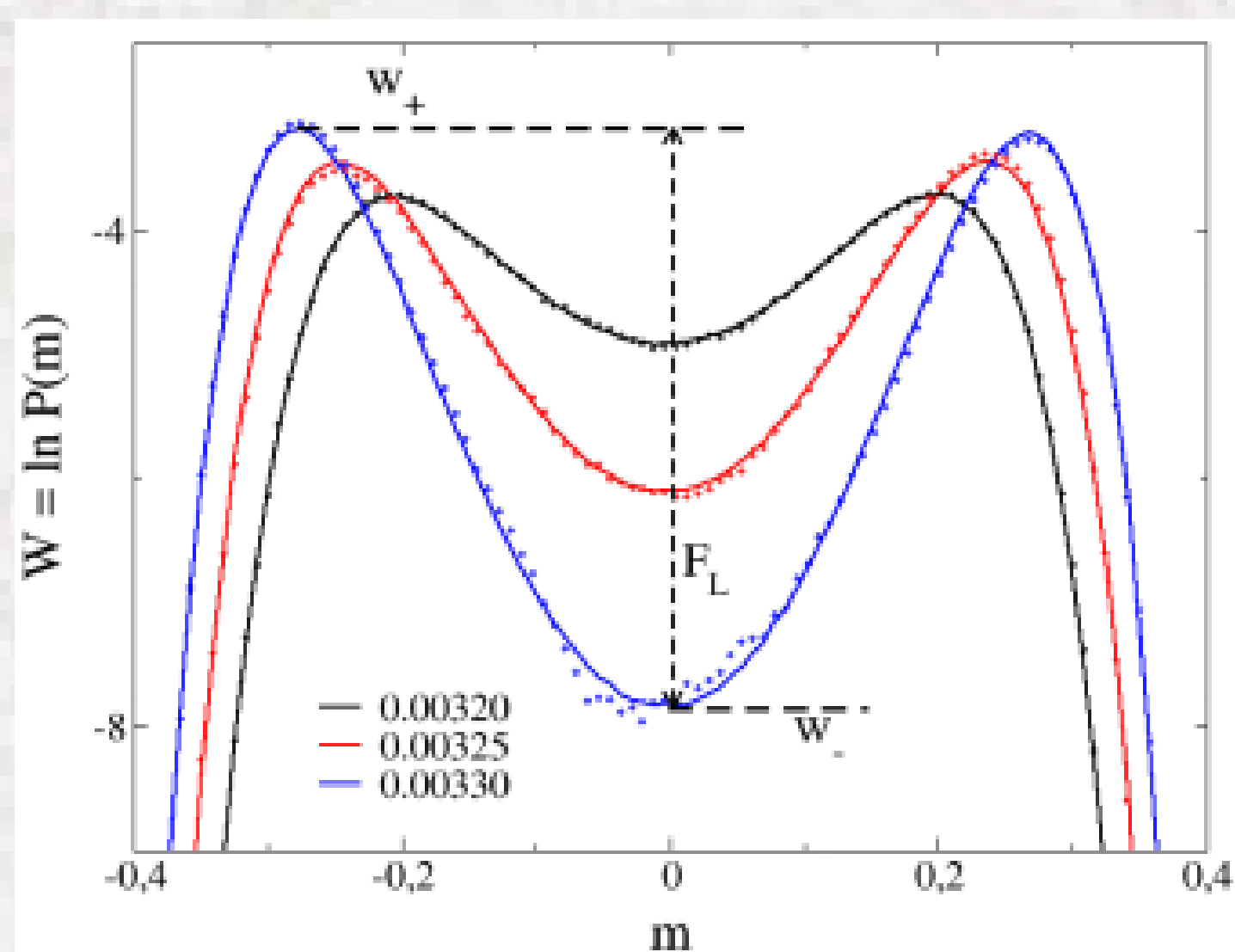
3. Metodología

- Monte Carlo (algoritmo Metropolis).
- Red cúbica simple $N = L^3$ ($40 < L < 96$).
- Condiciones de contorno periódicas.
- Longitud de simulación: $5 \times 10^6 < NMCS < 2 \times 10^7$.
- Teoría de escala de tamaño finito.

4. Transición FM - PM

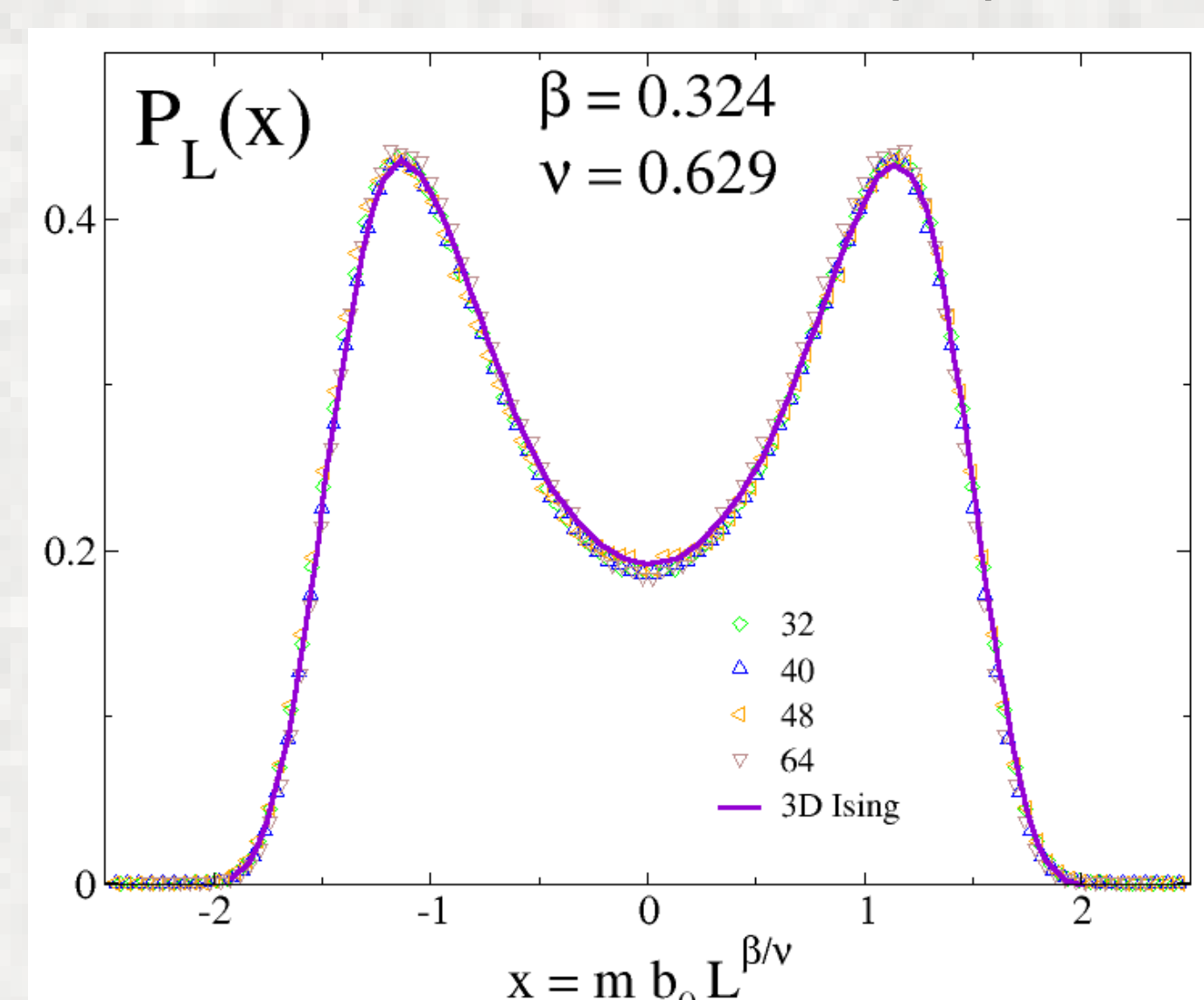
a.) Ubicación de puntos críticos:

Distribución de probabilidad del parámetro de orden \Rightarrow
 \Rightarrow susceptibilidad (χ) y cumulantes (U_m)

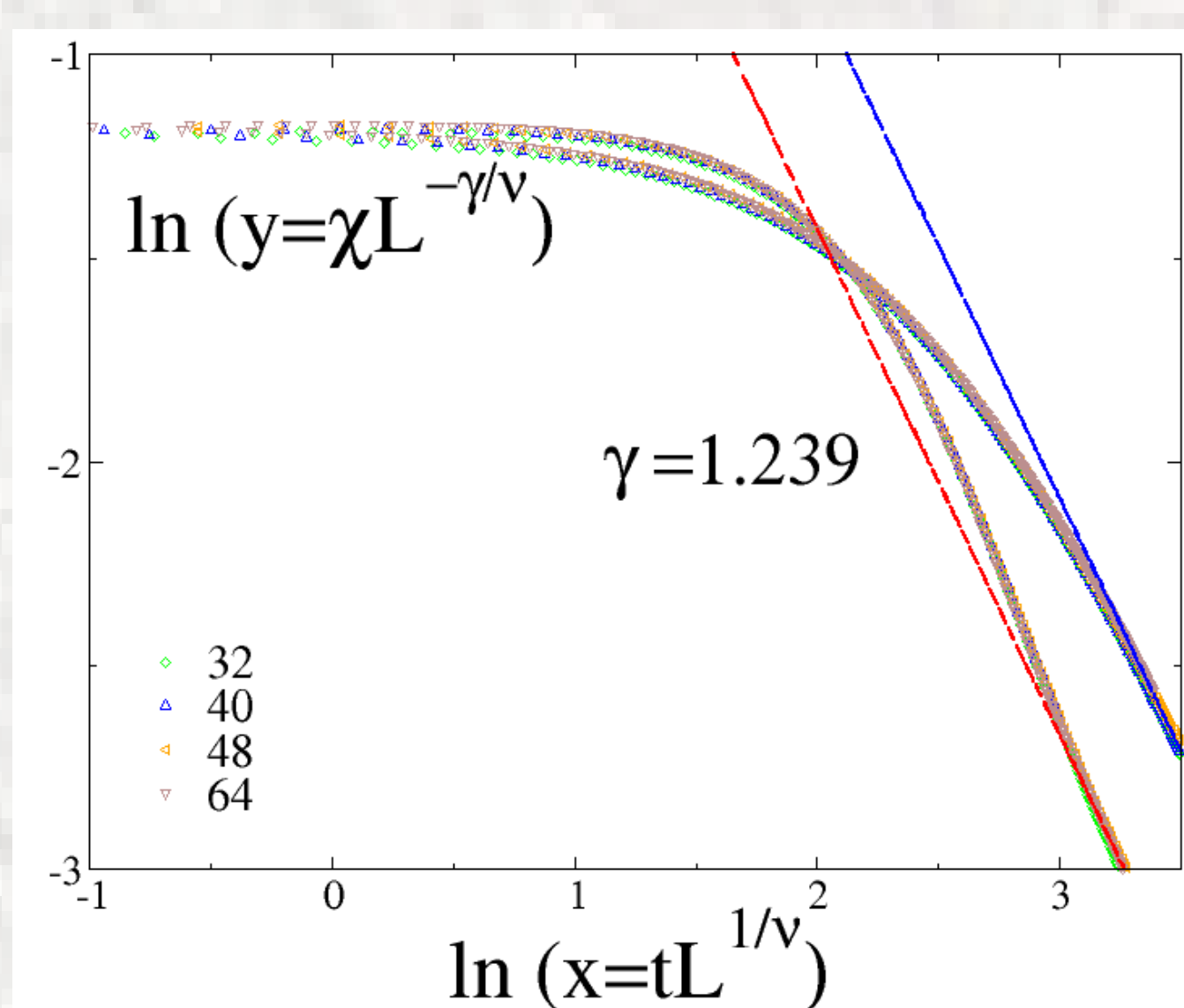


b.) Universalidad:

Colapso de $P(m)$

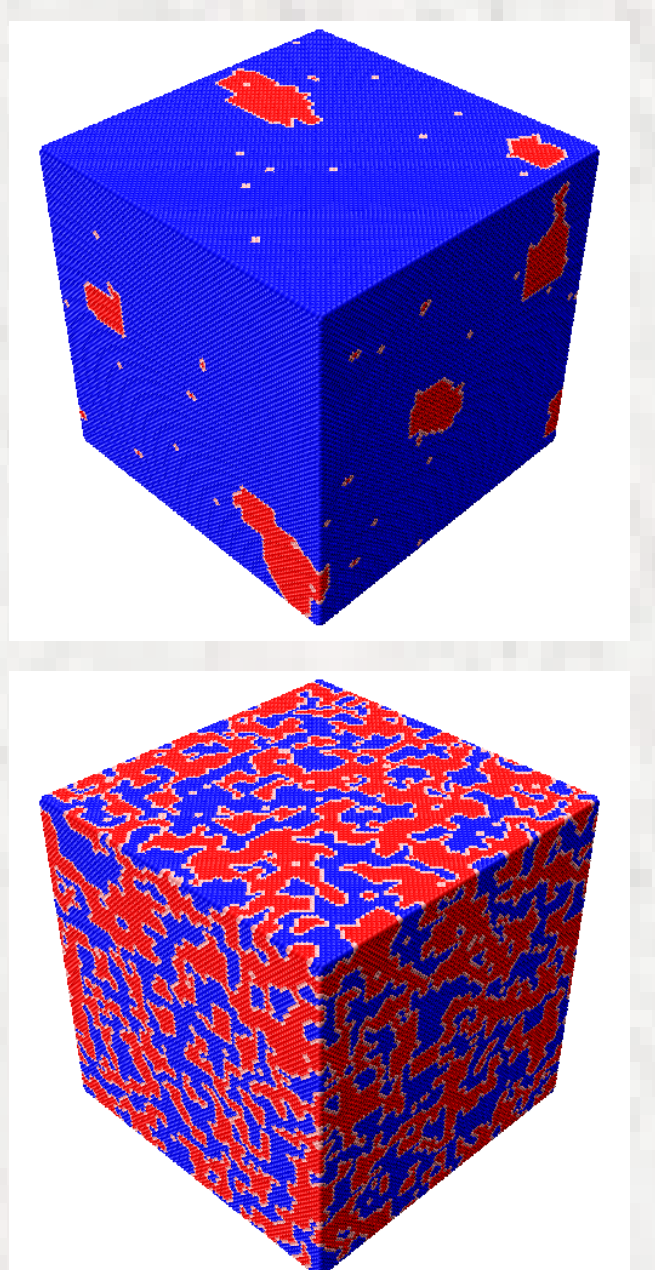
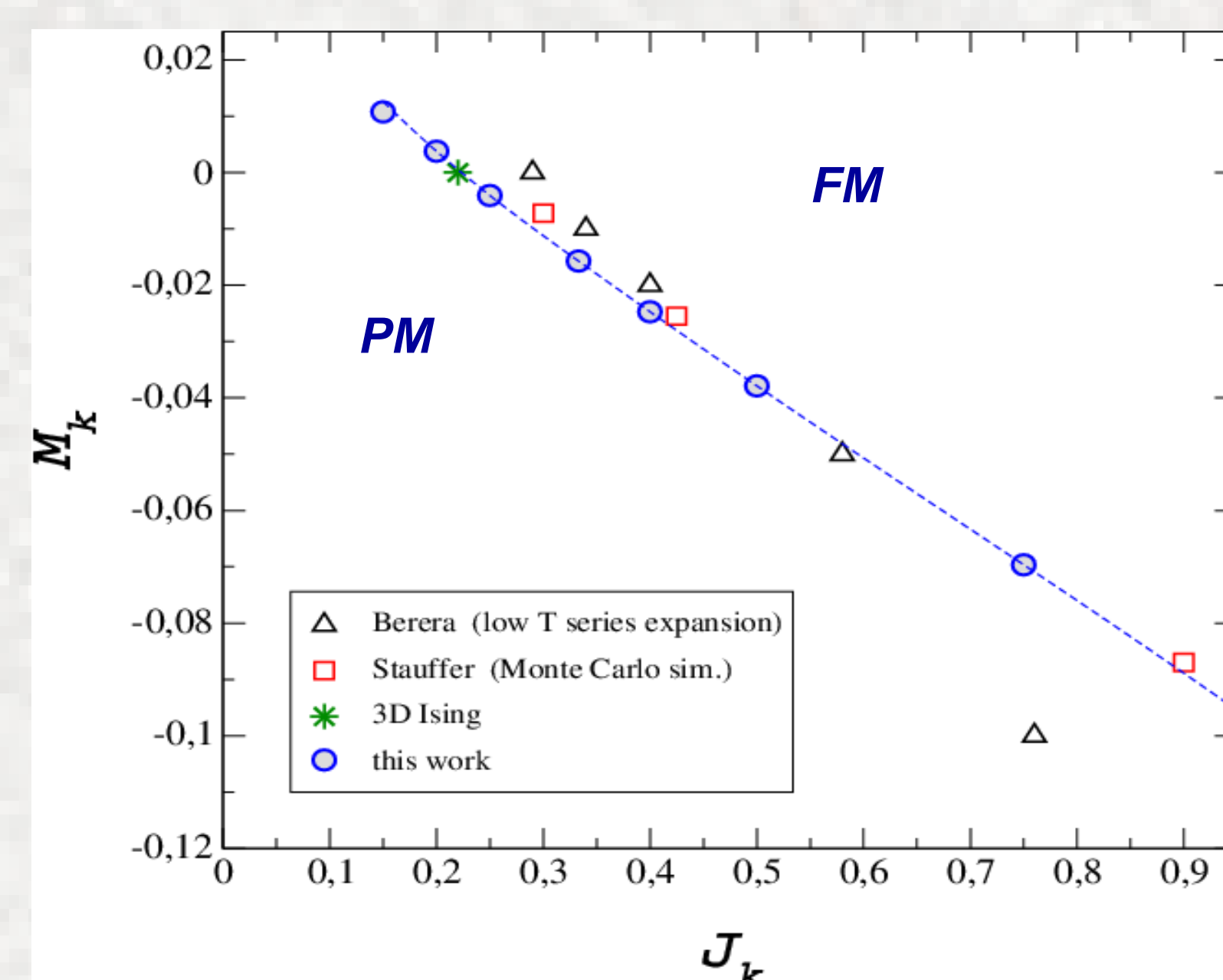


Susceptibilidad



5. Borde de fase FM - PM

- Completa y mejora la precisión de cálculos previos [3].
- Buen acuerdo con teoría MF a altas temperaturas.



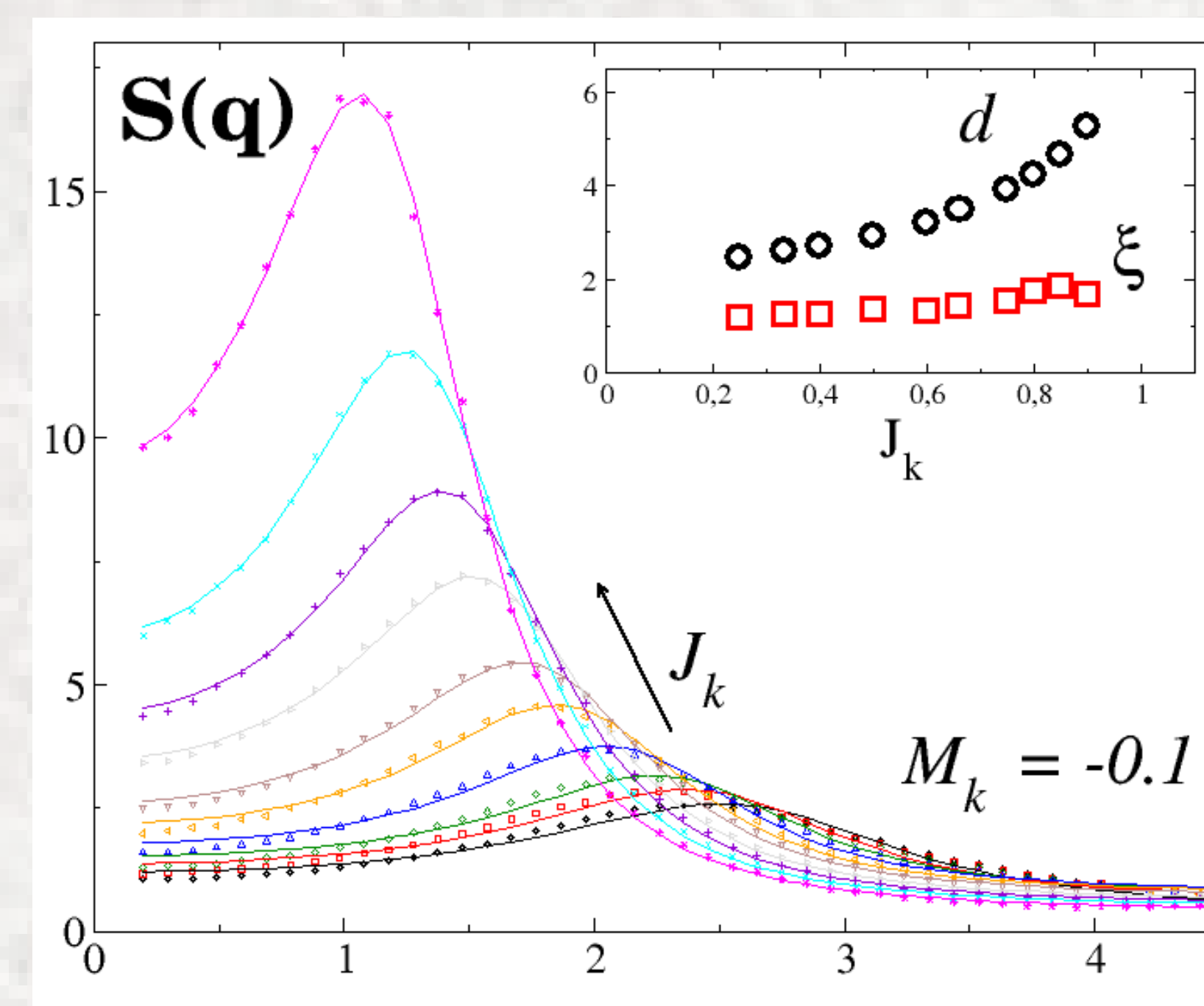
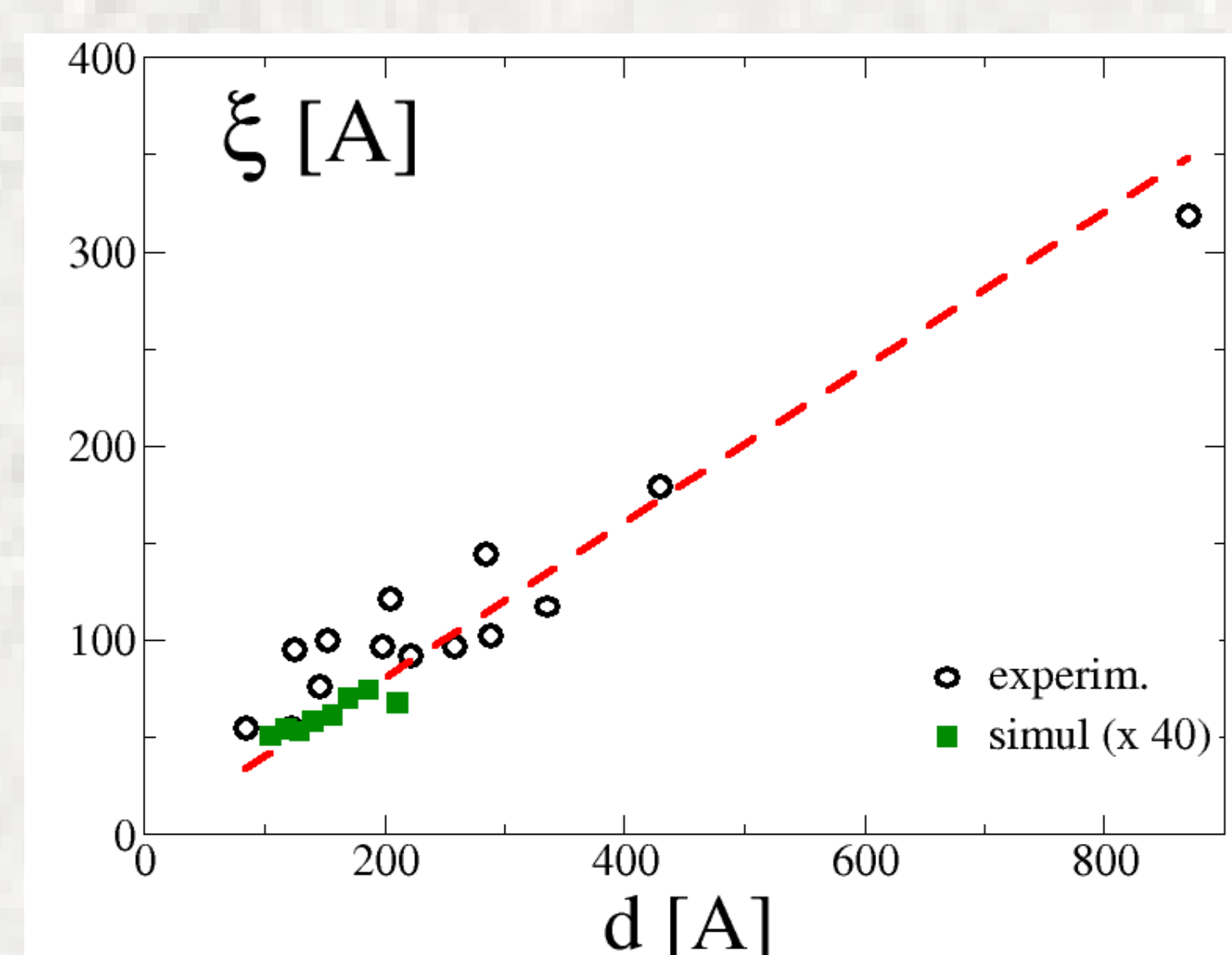
6. Factor de estructura

- Ajuste con la forma de Teubner y Strey [4]:

$$I(q) = I(0) / (1 - bq^2 + cq^4)$$

- Calculado a lo largo de los ejes $[1\ 0\ 0]$ y equivalentes (isótropo)

- *Microemulsión*: tiene un $S(q)$ con pico en $q \neq 0$.



$$d/2\pi = (1/2c^{1/2} + b/4c)^{-1/2}$$

$$\xi = (1/2c^{1/2} - b/4c)^{-1/2}$$

Referencias

1. B. Widom, *J. Chem. Phys.* 84, 6943 (1984). 2. K.A. Dawson, B. Walker, A. Berera, *Physica A* 165, 320 (1990). 3. E.A. Bea, M.L. Trobo, A. De Virgiliis, *Physica B* 553, 113 (2019). 4. M. Teubner, R. Strey, *J. Chem. Phys.* 87, 3195 (1987).