

Wpływ ograniczonej geometrii na porządkowanie się układów, w których występują przeciwstawne oddziaływania międzycząsteczkowe

Autor: Horacio Antonio Serna Serna

Promotor: Prof. dr hab. Wojciech Goźdź

Drugi promotor: Dr. Eva González Noya

20 Maj 2021

Streszczenie

Układy złożone z cząsteczek z konkurującymi oddziaływaniami, takie jak zawiesiny koloidalne, blokowe kopolimery czy mieszaniny zawierające lipidy, posiadają interesujące własności, które mogą być wykorzystane w zastosowaniach przemysłowych. Zostało pokazane, że pomimo różnego typu i natury oddziaływań, w układach z konkurującymi oddziaływaniami, diagram fazowy ma uniwersalną postać. W tego typu układach tworzą się uporządkowane fazy takie jak heksagonalna, lamelarna, dwuciągła kubiczna, oraz fazy złożone z kulistych klastrów.

W ograniczonej geometrii zmieniają się strukturalne, termodynamiczne i dynamiczne właściwości układów zbudowanych z cząsteczek z konkurującymi oddziaływaniami. W rozprawie doktorskiej zbadano jak zmieniają się właściwości płynów koloidalnych z konkurującymi oddziaływaniami gdy znajdują się porach o różnych kształtach i rozmiarach. Płyn koloidalny składał się ze sferycznych cząsteczek oddziałujących izotropowym potencjałem przyciągającym na krótkich odległościach i odpychającym na dalekich odległościach. Zastosowano odpychające oddziaływania między cząsteczkami koloidalnymi i ścianami porów.

W pierwszej kolejności zbadano zachowanie się płynu koloidalnego w kanałach o różnych przekrojach. Na podstawie przeprowadzonych symulacji Monte Carlo w wielkim zespole kanonicznym, odkryto, że struktura faz ciekłokrystalicznych może zostać znacząco zmodyfikowana przez geometrię materiału porowatego, w którym umieszczona była badana faza. Zaobserwowano tworzenie się helikalnych struktur w cylindrycznych i eliptycznych porach. Pokazano, że w porach o przekroju trójkąta, sześciokąta, czy cylindrze z wstawionym ograniczeniem w postaci klina ułatwione jest tworzenie się uporządkowanych struktur o właściwościach podobnych do objętościowej fazy heksagonalnej.

Następnie zbadano zachowanie się układu koloidalnego w kwazi-dwuwymiarowych zakrzywionych powłokach. Metodą symulacji Monte Carlo w wielkim zespole kanonicznym zbadano zachowanie się płynu zamkniętego w cienkich warstwach o sferycznych i eliptycznych kształtach. Zaobserwowano, że w warunkach stabilności fazy heksagonalnej te cienkie warstwy wypełnione są cylindrycznymi micelami. Micele są ułożone w taki sposób jaki wynika z ułożenia liny o największej długości na powierzchni kuli. W przypadku wydłużonych i spłaszczonych cienkich eliptycznych warstw cylindryczne micle układają się w helikalne i toroidalne struktury.

Ponadto zbadano porządkowanie się płynu koloidalnego w materiałach porowatych o topologii kanałów analogicznej do struktury kubicznej fazy dwuciągłej. Z badań metodą

symulacji Monte Carlo w wielkim zespole kanonicznym otrzymano różne krystaliczne struktury w zależności od kształtu i rozmiaru porów, zbudowane z cylindrycznych i kulistych klastrów cząsteczek koloidalnych, odmienne od tych obserwowanych w płynach objętościowych. Dla niektórych kształtów i rozmiarów porów otrzymano uporządkowane krystaliczne struktury o takich samych symetriach jak w płynach objętościowych.

W następnej kolejności zbadano metodą dynamiki molekularnej, w objętości i w szczelinie strukturę płynu koloidalnego modelowanego przez potencjał przyciągający na krótkich odległościach i odpychający na dużych odległościach. W płynie objętościowym poza tworzeniem się uporządkowanych faz ciekłokrystalicznych zaobserwowano porządkowanie się cząsteczek wewnątrz klastrów w niskiej temperaturze. Takie porządkowanie się cząsteczek koloidalnych zostało scharakteryzowane strukturalnie, termodynamicznie oraz zbadana była dynamika tego procesu. Diagram fazowy płynu koloidalnego w szczelinie ulega zmianie. Zaobserwowano, że dyfuzja cząsteczek koloidalnych w szczelinach o pewnych rozmiarach może się zwiększać.

W rozprawie doktorskiej przedstawione zostały wyniki potwierdzające uniwersalne zachowanie się układów z konkurującymi oddziaływaniami nie tylko dla płynów objętościowych, ale także dla płynów w ograniczonej geometrii. Ponadto pokazano, że w ograniczonej geometrii tworzą się nowe uporządkowane struktury, które mogą być wykorzystane w potencjalnych zastosowaniach przemysłowych. Zaobserwowano, że ograniczona geometria ułatwia powstawanie klastrów cząsteczek koloidalnych tworzących krystaliczne struktury. Z tego powodu ograniczona geometria może być pomocna w otrzymaniu uporządkowanych klastrów cząsteczek koloidalnych, które do chwili obecnej nie zostały jeszcze otrzymane eksperymentalnie.