

RONALD DICKMAN
Instituto de Física, UFMG

Título: Transições de fase em gases de rede binárias com interações repulsivas, no equilíbrio e fora de equilíbrio

Resumo:

Estudos de fluidos binários com interações repulsivas de caroço duro entre espécies distintas têm contribuído muito à teoria da separação de fase dirigidas entropicamente. O Widom and Rowlinson mostraram que em equilíbrio, uma mistura binária com interações de volume excluído entre espécies opostas, e sem interação alguma entre moléculas da mesma espécie, exibe uma separação de fase para densidades de um determinado valor crítico [1]. No gás em rede tipo Widom-Rowlinson (WRLG), duas espécies de partículas (A, B) difundem livremente através de trocas partícula-buraco, sujeito a ambas, exclusão de ocupância dupla e a proibição de pares A-B ocupando sítios primeiros vizinhos [2]. Sendo um sistema atômico, as densidades de A e B são os únicos parâmetros de controle. À medida que aumentamos a densidade, surge uma transição de fase tipo Ising, levando para estados ordenados com domínios ricos em A ou B separados por interfaces ricas em sítios vazios. Uma variante do WRLG mantida fora de equilíbrio por um "drive" que favoreça saltos de partículas ao longo de uma direção (o DRWLG [3]) apresenta comportamentos atípicos como singularidades no fator estrutura e separação de fases em listras perpendiculares ao drive com um comprimento de onda que varia com a densidade e a intensidade do drive. Atualmente estamos tentando entender estes comportamentos utilizando uma descrição contínua [4]. Finalmente, o estudo da deposição aleatória, irreversível de partículas tipo WRLG em um substrato fornece desafios de análise combinatória e transições percolativas [5].

1. B. Widom and J. S. Rowlinson, J. Chem. Phys. 52, 1670 (1970).
2. R. Dickman and G. Stell, J. Chem. Phys. 102, 8674 (1995).
3. R. Dickman and R. K. P. Zia, Phys. Rev. E 97, 062126 (2018).
4. M. O. Lavrentovich, R. Dickman, and R. K. P. Zia, Phys. Rev. E 104, 064135 (2021).
5. P. H. L. Martins, R. Dickman, and R. M. Ziff, in progress.