

Simulación de materia condensada suave: transiciones de fase en cristales líquidos bidimensionales

Héctor Quezada-Alanis¹, Humberto Jair Híjar-Juárez²

¹ Facultad de Ingeniería, Universidad La Salle México

² Departamento de Ingeniería, Vicerrectoría de Investigación, Universidad La Salle México

Materia condensada suave es un nombre que identifica un grupo muy amplio de materiales que son más complejos que los gases, los líquidos ordinarios y los sólidos. Entre ellos destacan los cristales líquidos: fluidos que a nivel molecular preservan orden, al contrario de los líquidos simples que son completamente desordenados. Los cristales líquidos tienen una amplia gama de aplicaciones, desde pantallas hasta sensores, debido a sus propiedades ópticas y eléctricas ajustables.

Objetivo

El objetivo de este proyecto fue simular películas de cristales líquidos y comprender cómo diferentes potenciales de interacción entre sus moléculas modifican su comportamiento. Se llevaron a cabo simulaciones con la energía de Maier y Saupe (MS), $E_{MS} = -UkT(u_i Q_{ij} u_j + 1/2)$, y la propuesta de Ilg, Karlin y Öttinger, (IKÖ), $E_{IKO} = UkT(1 - u_i Q_{ij} u_j)/2\sqrt{3/2 - Q_{ij} Q_{ji}}$, siendo U la intensidad de la interacción, kT la energía térmica, u_i el vector de orientación de la molécula y Q_{ij} una matriz que caracteriza el orden de la fase. Las simulaciones representaron el comportamiento bajo cambios en U cuando u_i está restringido a un plano. Los resultados, en la Fig. 1, muestran que el potencial modifica el nivel de ordenamiento de los cristales líquidos y su transición de fase desde el estado desordenado, $S = 0$.

El modelo MS permite al cristal líquido realizar su interfase de una manera anticipada pero no converge tan rápido hacia el orden perfecto, $S = 1$, mientras que el potencial IKÖ demora un poco más en hacer la transición. Sin embargo, es capaz de converger mucho más rápidamente al valor de ordenamiento. Se concluye que los potenciales juegan un papel fundamental en la simulación y aplicación de los cristales líquidos, lo que tiene implicaciones directas para su uso en tecnologías avanzadas. Se espera extender la investigación a 3 dimensiones y aplicando otros potenciales de campo.

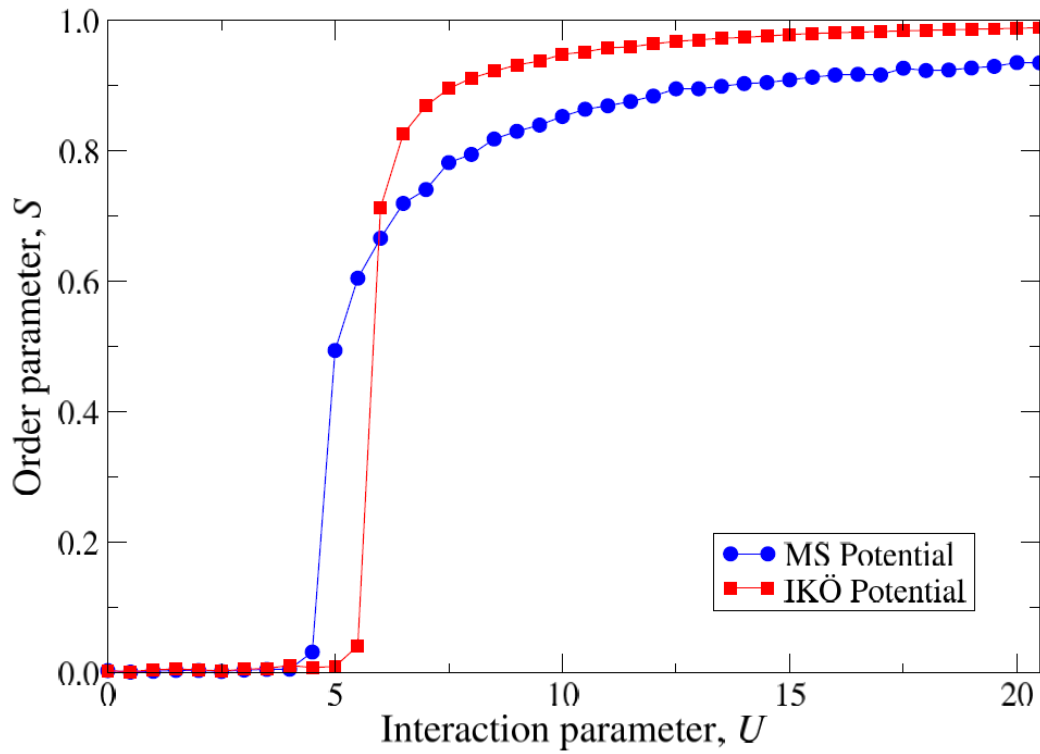


Figura 1. Transición de fase en los modelos simulados.