



Universidad
Internacional
de Andalucía

TÍTULO

**EQUIVALENCIA ENTRE POTENCIALES BLANDOS Y DUROS EN
CRISTALES LÍQUIDOS DISCÓTICOS**

AUTORA

Silvia Anelo Cruz

	Esta edición electrónica ha sido realizada en 2025
Director	Dr. Alejandro Cuetos Menéndez
Instituciones	Universidad Internacional de Andalucía; Universidad de Huelva
Curso	<i>Máster Universitario en Simulación Molecular (2024/25)</i>
©	Silvia Anelo Cruz
©	De esta edición: Universidad Internacional de Andalucía
Fecha documento	2024



Universidad
Internacional
de Andalucía

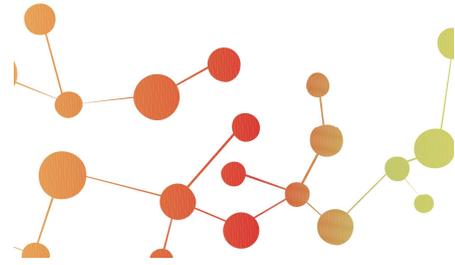


**Atribución-NoComercial-SinDerivadas
4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0)**

Para más información:

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/deed.es>

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/deed.en>



TITULO DEL TRABAJO FIN DE MÁSTER
EQUIVALENCIA ENTRE POTENCIALES BLANDOS Y
DUROS EN CRISTALES LÍQUIDOS DISCÓTICOS

Autora

Silvia Anelo Cruz

Trabajo entregado para la obtención del grado de Máster en
Simulación Molecular

Diciembre /2024

Director: Dr.D.Alejandro Cuetos Menéndez

RESUMEN

El objetivo principal de este trabajo ha sido investigar el comportamiento de fases de partículas discóticas mediante simulaciones con el método de Monte Carlo en colectivo isotérmico-isobárico.

Se pretendía comprobar si el comportamiento de un modelo blando con interacción repulsiva podía ser reescalado a partir de los resultados obtenidos de un modelo duro. Es decir, se han ajustado algunos parámetros y variables como pueden ser el tamaño de las partículas, para comprobar si es posible una comparación directa de ambos modelos.

Para ello, se realizó simulaciones utilizando dos tipos de modelos esferocilíndricos: uno duro, el modelo de esferocilindros discóticos repulsivos duros (OHSC), que ha sido previamente estudiado por otros autores y cuyo diagrama de fases es conocido; y otro blando, el modelo esferocilíndrico blando repulsivo (OSRS).

En ambos modelos, se encontró que la secuencia de fases observadas depende de la anisotropía de las partículas, es decir, de la diferencia en las propiedades geométricas o físicas de las partículas según la dirección, replicando en este caso los resultados de estudios anteriores. Para anisotropías grandes, ambos modelos muestran la presencia de una fase nemática, mientras que para anisotropías menores se observan únicamente fases columnares o isotrópicas.

Se comparó ambos modelos y por tanto se intentó reescalar los resultados del modelo blando al duro proponiendo que el primero podría ser equivalente al segundo si se consideraba una anisotropía efectiva. Aunque las interacciones entre partículas duras y blandas sean diferentes, ya que en estas últimas las partículas pueden solaparse o tienen interacciones más complejas que las duras, se podría conseguir una anisotropía más ajustada o efectiva para el modelo blando que haga que su comportamiento sea similar o equivalente al duro. De esta manera el comportamiento de fase de uno se podría asemejar al otro, facilitando el estudio de sus propiedades y su relación con los parámetros geométricos y físicos de las partículas.

Esta metodología de reescalado, que ha demostrado ser efectiva en estudios previos de fluidos de partículas alargadas, mostró resultados diferentes en nuestro caso: en algunas condiciones, el reescalado fue exitoso y los resultados coincidieron con los del modelo duro, pero en otras no se consiguió una correspondencia adecuada.

En conclusión, aunque el enfoque del reescalado puede ser útil para ciertas variables o parámetros, se ha comprobado que en el caso de partículas discóticas repulsivas no es concluyente. Pueden existir otros factores, como las interacciones repulsivas o la geometría de las partículas que juegan un papel importante y sugieren la necesidad de profundizar en el estudio de estos modelos. Esto permitiría conocer mejor sus limitaciones y diferencias, y lograr así una mayor concordancia en sus diagramas de fases.

ABSTRACT

The main objective of this work has been to investigate the phase behavior of discotic particles through simulations with the Monte Carlo method in isothermal-isobaric collective.

The aim was to check if the behavior of a soft model with repulsive interaction could be rescaled from the results obtained from a hard model. That is, some parameters and variables have been adjusted, such as particle size, to check if a direct comparison of both models is possible.

For this purpose, simulations were carried out using two types of spherocylindrical models: a hard one, the hard repulsive discotic spherocylinder model (OHSC), which has been previously studied by other authors and whose phase diagram is known; and another soft one, the soft repulsive spherocylindrical model (OSRS).

In both models, it was found that the sequence of observed phases depends on the anisotropy of the particles, that is, on the difference in the geometric or physical properties of the particles depending on the direction, replicating in this case the results of previous studies. For large anisotropies, both models show the presence of a nematic phase, while for smaller anisotropies only columnar or isotropic phases are observed.

Both models were compared and therefore an attempt was made to rescale the results of the soft model to the hard one, proposing that the first could be equivalent to the second if an effective anisotropy was considered. That is, although the interactions between hard and soft particles are different, since in the latter the particles can deform or have more complex interactions than hard ones, one could achieve a tighter or more effective anisotropy for the soft model that makes that its behavior is similar or equivalent to the hard one, in this way the phase behavior of one could resemble the other, facilitating the study of its properties and its relationship with the geometric and physical parameters of the particles.

This rescaling methodology, which has been shown to be effective in previous studies of fluids with elongated particles, showed different results in our case: in some conditions, the rescaling was successful and the results coincided with those of the hard model, but in others it was not achieved a suitable correspondence.

In conclusión, although the rescaling approach can be useful for certain variables or parameters, it has been proven that in the case of repulsive discotic particles it is not conclusive. There may be other factors, such as repulsive interactions or the

geometry of the particles, that play an important role and suggest the need to further study these models. This would allow us to better understand their limitations and differences, and thus achieve greater agreement in their phase diagrams.

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar agradecer a mi tutor de TFM, Dr.D.Alejandro Cuetos, por enseñarme en cada sesión, guiarme y ayudarme. Gran profesional y un excelente docente.

Y en segundo lugar, a mis padres, quienes siempre han estado ahí para todo, apoyándome y motivándome. Si tengo o soy algo en esta vida, es gracias a ellos. Se lo debo todo. Son mi guía, mi luz y mi vida entera.

ÍNDICE

Resumen	3
Abstract	5
Agradecimiento	7
Capítulo 1. Introducción	9
1.1. Que son los cristales líquidos. Porqué son importantes. Aplicaciones tecnológicas	
1.2. Tipos de partículas que forman los cristales líquidos; prolatos, oblatos	
1.3. Fases del cristal líquido	
1.4. Simulación por ordenador. Importancia, relevancia. Usos en cristales líquidos	
1.5. Modelos para simular cristales líquidos discóticos	
1.6. Objetivo del TFM. Ley de escala, estudios previos. Que se ha pretendido hacer y como	
Capítulo 2. Metodología.....	16
2.1. Definición de la geometría de las partículas. Esferocilindros oblatos. Algoritmo de simulación	
2.2. Descripción de los modelos de interacción	
2.2.1. El modelo OHSC	
2.2.2. El modelo OSRS	
2.3. Metodología de la simulación	
Capítulo 3. Resultados y Discusiones.....	22
Capítulo 4. Conclusiones.....	29
Referencias.....	30

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

1.1. Que son los cristales líquidos. Porqué son importantes. Aplicaciones tecnológicas

El esquema tradicional de clasificación de los sistemas físicos según su estado de agregación ha experimentado varias modificaciones a lo largo del siglo XX, debido a la aparición de una fenomenología diversa y compleja en materiales y sistemas con formas de organización estructural que no encajan exactamente en las fases clásicas de sólido, líquido o gaseoso. Algunos ejemplos de estas nuevas fenomenologías incluyen sistemas como disoluciones coloidales, sistemas poliméricos, sistemas anfílicos o cristales líquidos. Estos sistemas están siendo actualmente investigados de manera conjunta, bajo el término común de Materia Blanda [1, 2], y han captado un creciente interés por parte de diversas disciplinas fundamentales como la física, la química y la biología. Sus aplicaciones tecnológicas están presentes en nuestra vida diaria en áreas tan diversas como los tejidos, los alimentos procesados o los dispositivos electrónicos y ópticos. Además, para entender mejor las propiedades de la materia viva, los conceptos y técnicas desarrollados en el estudio de la materia blanda resultan cada vez más esenciales.

Dentro de este campo, los Cristales Líquidos son una clase particular de materiales que exhiben propiedades intermedias entre los sólidos cristalinos y los líquidos. Los cristales líquidos se distinguen por mostrar algún grado de orden parcial. Este orden es menor que el de los sólidos cristalinos, en los cuales las posiciones y orientaciones de las moléculas se repiten de manera periódica en todas las direcciones del espacio. En cambio, los cristales líquidos presentan un grado de orden superior al de los líquidos, donde la correlación entre las posiciones y/o orientaciones de las partículas disminuye rápidamente con la distancia intermolecular [3]. El botánico Friedrich Reinitzer en 1888 fue el primero que avanzó la idea de la existencia de estados de agregación intermedios entre las fases líquida y sólida en el colesterol [1].

Los cristales líquidos tienen muchas aplicaciones tecnológicas en nuestra vida cotidiana. Una de las más destacadas es su uso en las pantallas LCD de dispositivos como tablets, ebook, ordenadores portátiles o relojes digitales. Estas pantallas de cristal líquido han tenido un papel fundamental en el desarrollo de la tecnología y más aún, se augura un futuro más prometedor empleándose para diferentes tecnologías como las pantallas OLED [4].

Además de su relevancia en la electrónica, los avances en nanotecnología y en nanociencia han demostrado que los cristales líquidos son de gran utilidad en el

campo de la biomedicina. Gracias a sus propiedades físicas y químicas, estos materiales encuentran aplicaciones en diversas áreas, como la termometría oral y cutánea, la ginecología, la neurología, la oncología y la pediatría, entre otras. Son especialmente eficaces en la detección de tumores; por ejemplo, ciertos cristales líquidos basados en lantánidos pueden formar disoluciones coloidales y emitir luz, lo que ha abierto nuevas posibilidades en la oncología como agentes de contraste e imagen para la identificación temprana de tumores. Además, en ginecología, se utilizan para localizar la placenta. Asimismo, el uso de cristales líquidos para evaluar la extensión de una quemadura puede agilizar tanto su tratamiento como su curación [5].

1.2. Tipos de partículas que forman los cristales líquidos; prolatos y oblatos

Esta capacidad de exhibir propiedades tanto de líquidos como de sólidos cristalinos está relacionada con su estructura intermedia, lo que ha llevado a que las fases de cristal líquido sean conocidas como **mesofases** y que las moléculas que pueden formarlas se denominen **mesógenos** [3].

Es por eso que en la formación de fases de cristal líquido, un aspecto crucial es la forma de las partículas involucradas. Los estudios iniciales de Lars Onsager en la década de 1940, estableció que, para que un fluido compuesto por moléculas o partículas pueda transformarse en una fase de cristal líquido, es necesario que exista una anisotropía en la forma de estas moléculas. Onsager demostró, a través de un modelo teórico, que cuando las partículas son alargadas —similares a agujas o barras—, la organización y orientación de dichas partículas en el espacio puede inducir a una fase más ordenada, incluso si las interacciones entre las partículas son de tipo repulsivo [7].

Los trabajos de Onsager se centraron en partículas con geometrías alargadas o prolatas, lo que ha sido uno de los casos más estudiados históricamente, generando lo que se llaman fases líquidas calamíticas. Estas fases han sido objeto de extensos estudios experimentales y teóricos [8]. A lo largo del tiempo, las simulaciones que emplean modelos de partículas elipsoidales [9] o esferocilíndricas [10] han complementado y expandido los estudios previos sobre este tipo de cristal líquido.

Sin embargo, también existe otra categoría de mesógenos, aquellos con forma de disco, denominados oblatos que aunque este tipo de estructuras ha recibido menos atención en los estudios teóricos y de simulación en comparación con los cristales líquidos calamíticos, el interés por las moléculas discóticas ha crecido recientemente, debido a sus prometedoras aplicaciones nanotecnológicas. En particular, la autoorganización de estas moléculas discóticas ha mostrado un gran potencial en aplicaciones tecnológicas que dependen de las propiedades específicas de sus fases columnares [11]. Este creciente interés en los mesógenos oblatos destaca la importancia de continuar investigando las distintas formas de organización en los cristales líquidos y sus aplicaciones tecnológicas, especialmente en el ámbito de la nanotecnología [6].

1.3. Fases de los cristales líquidos discóticos

Además de las diferencias en la forma de las partículas, otro aspecto fundamental en el comportamiento de los cristales líquidos es su respuesta a factores externos, como la temperatura y la concentración. En este sentido se distingue dos tipos de cristales líquidos: los termotrópicos cuyo diagrama de fases depende solo de la temperatura y los liótropos donde el diagrama de fases no solo depende de la temperatura sino también de la concentración de disolvente [12].

A su vez los termotrópicos se distinguen en: cristales líquidos calamíticos (con geometría molecular alargada) y cristales líquidos discóticos (con geometría en forma de disco) [12].

Este trabajo se centra específicamente en los cristales líquidos discóticos. Un hito importante en este campo ocurrió en 1977, cuando S. Chandrasekhar descubrió fases del cristal líquido en derivados del benceno hexasustituídos. Estas moléculas, planas y con forma de disco es capaz de apilarse, formando estructuras ordenadas y diversas [13,14]. Entre las distintas fases a las que pueden dar lugar se puede destacar la fase nemática caracterizada por un orden orientacional de largo alcance, pero con orden posicional de corto alcance. En esta fase, la orientación de las moléculas se describe mediante un vector conocido como Vector Director del fluido, el cual indica la dirección preferida de alineación de las moléculas dentro de la fase nemática [15].

Otras fases en las que se encuentran las moléculas con forma de disco es cuando están ubicadas formando columnas. Estas pueden dar lugar a cristales líquidos columnares. Las columnas se concentran para formar juntas un ordenamiento tridimensional de corto alcance. Pero según la disposición que tomen las moléculas dentro de las columnas se pueden clasificar como columnar hexagonal ordenada y desordenada [15].

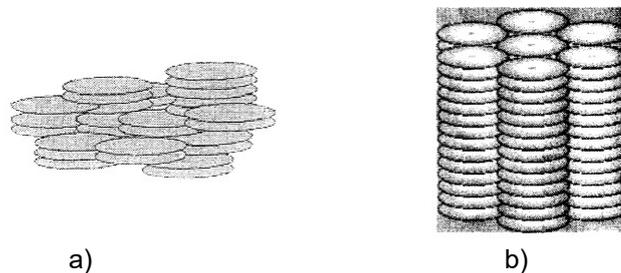


Figura n°1: a) fase discótica nemática b) columnar hexagonal ordenada [15]

Sin embargo, también es posible encontrar estas sustancias en una fase isotrópica, en la cual no existe ningún tipo de orden, ni en las posiciones ni en las orientaciones de las moléculas del sistema.

1.4. Simulación por ordenador. Importancia, relevancia. Usos en cristales líquidos

La trayectoria del uso de simulaciones por ordenador para investigar cristales líquidos ha sido amplia y fructífera [16,17]. Como se mencionó anteriormente, la mayoría de los estudios se han centrado en fluidos formados por partículas alargadas, en lugar de aquellas con forma discoidal. Esta tendencia puede explicarse por la falta de modelos efectivos de grano grueso para partículas discoidales, que solo recientemente han comenzado a desarrollarse. En contraste, para las moléculas calamíticas, los modelos basados en formas elipsoidales o esferocilíndricas han sido ampliamente utilizados [18].

Por tanto según el tipo de información que se desee obtener, es necesario escoger el modelo y el método de simulación más adecuados. La simulación molecular permite observar a nivel atómico el desarrollo de procesos, algo que resulta extremadamente complicado de lograr mediante experimentos tradicionales. Además esta técnica ofrece la ventaja de poder estudiar escenarios que serían imposibles de explorar de otra manera [18]. En el caso de los cristales líquidos, las simulaciones permitirán analizar cómo estos materiales transitan entre diferentes fases bajo diversas condiciones de presión y temperatura. Este enfoque no solo facilita el estudio del comportamiento de las partículas, sino que también permite predecir posibles defectos estructurales, lo cual es esencial para mejorar el rendimiento de los cristales líquidos en aplicaciones prácticas.

1.5. Modelos para simular cristales líquidos discóticos

En particular, para partículas de forma oblata, algunos modelos atomísticos han revelado información valiosa sobre la estructura de la fase columnar [18]. Sin embargo, estos modelos son computacionalmente costosos y solo aplicables en casos específicos. Por esta razón, se ha buscado un enfoque de modelización más general para entender el comportamiento de las moléculas discóticas como mesógenos. Los modelos de grano grueso, basados en la idea de que la forma de las moléculas influye en sus propiedades macroscópicas, han sido útiles para este propósito [19].

En el pasado, se usaron modelos de grano grueso que asignaban una forma elipsoidal a las partículas, pero estos enfrentaron problemas porque la fase columnar solo es estable con interacciones atractivas específicas. Esto contradice el hecho de que las moléculas discóticas tienden a favorecer el orden columnar debido a su forma y las interacciones entre los orbitales π [6]. Otro modelo relevante es el de

esfera truncada, que muestra fases columnares y nemáticas dependiendo del tamaño de las partículas, aunque su simulación es menos eficiente [9].

Recientemente, se ha desarrollado un nuevo algoritmo para el modelo Oblato Esferocilíndrico, que ofrece una representación más realista de las moléculas discóticas en comparación con los modelos anteriores [20]. Este modelo ha sido utilizado para estudiar el diagrama de fase del esferocilíndrico oblato duro y otros modelos relacionados, mostrando que la direccionalidad de las interacciones entre partículas influye en la aparición de una variedad de fases, como columnares y nemáticas [21].

1.6. Objetivos del TFM. Ley de escala, estudios previos. Que se ha pretendido hacer y cómo

En este contexto, el TFM ha investigado el comportamiento de fases de partículas discóticas mediante simulaciones Monte Carlo en el colectivo isotérmico-isobárico. Específicamente, se ha buscado comprobar si el comportamiento de un modelo blando con interacción repulsiva puede ser reescalado a partir de los resultados obtenidos de un modelo duro. La finalidad de este reescalado es facilitar la comparación entre ambos modelos en términos de sus diagramas de fases, ajustando variables como la temperatura y la densidad.

Para éste propósito se ha utilizado la ley de escala, (esta ley que se definirá en detalle en la sección de metodología), ha sido utilizado en el pasado para partículas alargadas [22]. Sin embargo hasta donde se sabe es la primera vez que se intenta comprobar su validez en partículas discóticas. En estudios previos, esta ley de escala se empleó en simulaciones Monte Carlo para partículas con forma de varilla, abarcando amplios rangos de temperaturas y densidades del sistema. Dichas simulaciones han sido útiles para ilustrar el papel de estos parámetros en la determinación de la estabilidad de las fases de los fluidos [20].

El enfoque de este trabajo ha sido comparar el comportamiento de dos modelos de esferocilíndricos, el modelo de esferocilindros repulsivos duros (OHSC) cuyo diagrama de fases ya se había estudiado previamente con el modelo de esferocilindros repulsivos blandos (OSRS) que incluye interacciones repulsivas más complejas [21]. Para ello se ha reescalado los resultados del modelo blando para que fueran comparables con el modelo duro con el objetivo de que el comportamiento de fase de ambos modelos pudieran ser equivalentes.

En las simulaciones realizadas, se ajustaron parámetros como la temperatura, la densidad y la anisotropía para igualar los diagramas de fase de ambos modelos. Los resultados mostraron que para anisotropías grandes, ambos modelos mostraban una fase nemática, mientras que para anisotropías menores predominaban fases columnares o isotrópicas. Sin embargo, al evaluar el procedimiento de reescalado, se observó que, aunque en algunos casos se encontraron similitudes, no se logró una correspondencia perfecta entre los dos modelos, lo que indica que el reescalado no fue totalmente exitoso en todos los casos.

CAPÍTULO 2. METODOLOGÍA

2.1. Definición de la geometría de las partículas. Esferocilindros oblatos. Algoritmo de simulación

La geometría de las partículas esferocilindros oblatos consta de un núcleo cilíndrico plano con un borde toroidal, como se muestra en la Figura nº3 [20]. En este trabajo, utilizamos un algoritmo numérico preciso para calcular las distancias de pares más cortas y llevamos a cabo un estudio del comportamiento cristalino del líquido que muestran los fluidos en el modelo OHSC con dos radios diferentes $L^* = L/D = 0.1, 0.2$, al igual que con el modelo OSRS. En la siguiente sección se describen más detalladamente los modelos [20].

2.2. Descripción de modelos de interacción

2.2.1. El modelo OHSC

El diagrama de fases del cristal líquido del fluido esferocilindro duro discótico se ha investigado mediante simulaciones de Monte Carlo. El OHSC consta de un núcleo cilíndrico plano con un diámetro σ y una altura L referente al grosor del disco, siendo el diámetro total de la partícula $D = L + \sigma$ [21].

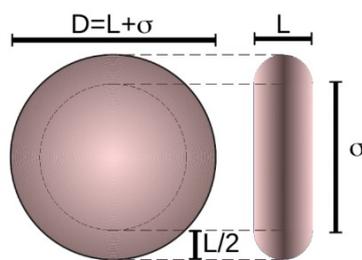


Figura nº2: vista de frente y lateral de un esferocilindro oblato duro (OHSC) [20]

Se investiga el comportamiento de fase de un modelo de partículas discóticas rígidas es decir esferocilindros oblatos duros (OHSC). Para estas partículas sus interacciones se definen a través del potencial de interacción que dependerá de la distancia mínima entre los elementos centrales de las partículas. Por tanto, el estudio como ya se dijo en el epígrafe anterior implicó el desarrollo de un algoritmo eficiente para calcular esta distancia mínima entre dos partículas de esferocilindro oblatos eliminando la restricción de que los puntos muestreados a lo largo de la iteración se encontraran en el borde de los discos.

Luego, en cada configuración se está calculando la distancia más corta desde un punto determinado de uno de los discos hasta el segundo disco [21].

Para esferocilindros duros, el potencial de interacción del par es infinito si la distancia más corta entre los discos centrales de las dos partículas (d_m) es menor que L y cero en caso contrario [21].

$$U_{\text{OHSC}} = \begin{cases} \infty & \text{si } d_m < L \\ 0 & \text{si } d_m > L \end{cases}$$

2.2.2. El modelo OSRS

El modelo OSRS se construye a partir de un truncamiento del potencial de Kihara, que es una versión modificada del potencial de Lennard-Jones diseñada para representar moléculas de formas no esféricas con una repulsión suave. Por esta razón, el modelo OSRS resulta adecuado como potencial de referencia en teorías de perturbación a fluidos de cristales líquidos [22].

$$U_{\text{SRS}} = \begin{cases} 4\varepsilon \left[\left(\frac{L}{d_m}\right)^{12} - \left(\frac{L}{d_m}\right)^6 + \frac{1}{4} \right] & d_m \leq \sqrt[6]{2} L \\ 0 & d_m > \sqrt[6]{2} L \end{cases}$$

Dónde d_m es la distancia mínima entre los discos de diámetro σ descrita por los núcleos de las moléculas que interactúan, la cual depende de las posiciones relativas y las orientaciones de las moléculas. Por lo tanto la forma esferocilíndrica de las moléculas de OSRS puede describirse mediante una anisotropía como en el caso duro de $L^*=L/D$, y el parámetro ε modula la fuerza de interacción repulsiva [22]. El modelo OSRS incorpora la temperatura como un parámetro clave que puede ajustar el diagrama de fases, permitiendo la aparición de puntos triples [22].

2.3. Metodología de la simulación

La sección 2.3 de este trabajo se centra en la metodología de simulación empleada para estudiar el comportamiento de fases en partículas discóticas. Para ello, se realizaron simulaciones Monte Carlo en el colectivo isotérmico-isobárico (NPT) comparando dos modelos diferentes: el modelo de esferocilindros repulsivos duros (OHSC) y el modelo de esferocilindros repulsivos blandos (OSRS). El objetivo principal de estas simulaciones fue comprobar si el comportamiento del modelo blando (OSRS) podía ser reescalado para coincidir con el modelo duro (OHSC), ajustando parámetros como la temperatura y el tamaño de las partículas para que sus diagramas de fase se asemejaran. Las simulaciones se llevaron a cabo utilizando isobaras con presiones reducidas, definidas como:

$$P^* = \frac{P \cdot D^3}{\varepsilon} = P^+ \cdot T^*$$

donde T^* es la temperatura reducida, definida como:

$$T^* = \frac{k_B T}{\varepsilon}$$

En esta ecuación P^+ puede referirse a una presión modificada o ajustada en el modelo de simulación, donde se introduce una forma de la presión que facilita la comparación entre distintos sistemas. Se trabajó con sistemas de hasta $N_p = 3000$ partículas, utilizando grosores de disco para el modelo OHSC de disco $L^* = 0,1$ y $0,2$, mientras que para el modelo OSRS se han utilizado anisotropías $L^* = 0.0985, 0.1, 0.1013, 0.1970, 0.2, 0.2026$. La elección de cada anisotropía se justifica más adelante. Cada estado se equilibró durante 10^5 ciclos de Monte Carlo, donde cada ciclo incluyó N intentos aleatorios de desplazamientos y orientaciones de las partículas, así como un cambio de volumen en promedio, que se realizaron cambiando la longitud de cada lado de la caja simulación de forma independiente [20]. Para cada valor de L^* se construyó una configuración inicial con las partículas dispuestas en diferentes columnas [20]. A medida que el sistema alcanzaba el equilibrio a alta presión, se observó la formación de una estructura columnar ordenada —que se detallará en la sección de resultados más adelante—, para luego, al disminuir la presión y la densidad, alcanzar finalmente una fase isotrópica. La configuración final de cada estado se utilizó como punto de partida para calcular el siguiente estado a una presión menor [20].

El equilibrio a alta presión condujo a una estructura columnar ordenada como se observa en el siguiente epígrafe de los resultados. Posteriormente, el fluido se expandió a través de las diferentes fases columnares, donde las moléculas se

organizan en columnas ordenadas o en una estructura columnar más desordenada. Finalmente el fluido paso por la fase isotrópica, en las que las moléculas están distribuidas de manera desordenada sin existir ninguna preferencia direccional en su disposición. En algunos casos el sistema mostraba una fase nemática entre la fase isotrópica y las columnares [20]. La fase nemática se caracteriza por tener moléculas que no tienen un orden posicional pero tienden a apuntar en la misma dirección [23]. Durante la expansión del fluido, las fases observadas se caracterizaron por cambios en la densidad, parámetro de orden y diversas funciones de correlación a medida que se modificaba el volumen.

A continuación, se presentan figuras que ilustran las características de las fases isotrópica, nemática, columnar desordenada y columnar ordenada, obtenidas a partir del modelo OSRS, con $T^*=1$ y presiones reducidas de $P^*=25, 50, 100$ y 200 . En estas figuras, el color de las partículas representa su orientación, lo que ayuda a visualizar las diferencias en la estructura de las fases observadas.

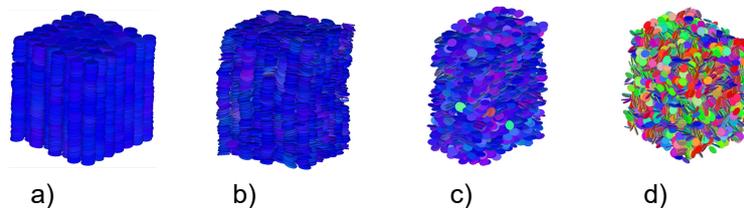


Figura nº3: Ejemplo de estructuras discóticas donde el color de las partículas representan su orientación: a) Estructura columnar ordenada OSRS $T^*=1$ $P^*=200$, b) columnar desordenada OSRS $T^*=1$ $P^*=100$, c) Fase nemática discótica OSRS $T^*=1$ $P^*=50$, d) Isotrópico OSRS $T^*=1$ $P^*=25$

Para caracterizar la correlación orientacional de las partículas, hemos calculado el parámetro de orden nemático $S_2(t)$. Este parámetro de orden nemático se obtiene con el procedimiento estándar de diagonalizar un tensor simétrico sin traza construido con los vectores de orientación de todas las partículas [24]. De esta forma, $S_2(t)$ tomará el valor de 1 si los ejes de todas las partículas están orientados perfectamente paralelos entre si, y 0 si las orientaciones son completamente aleatorias. En nuestro caso el eje de las partículas es el perpendicular al plano de los discos centrales. En el procedimiento indicado, $S_2(t)$ es el mayor autovector resultante de la diagonalización, mientras que el autovector asociado, conocido como vector director, indica la dirección preferente en torno al cual se orientan las partículas.

Para la determinación de orden estructural en el sistema se han monitorizado una serie de funciones de distribución radial. Concretamente, se ha medido la función de distribución radial perpendicular, $g_{\perp}(r)$. Esta función indica la probabilidad de que a una partícula se encuentre a otra a una distancia cuya proyección en la dirección perpendicular al director nemático es r_{\perp} . Esta función es especialmente útil para

detectar la agrupación de las partículas en columnas paralelas al vector director. Adicionalmente se ha calculado la función de distribución paralela intracolumnar, g_{\parallel}^0 . Esta función mide la correlación entre partículas que se encuentran a una distancia paralela al director nemático r_{\parallel} , cuando la distancia r_{\perp} es menor que $D/2$. Esta función informa sobre el orden interno de las columnas. Para más información sobre la metodología del cálculo de estas funciones consultar las referencias [20, 25, 26].

El procedimiento descrito nos permitió evaluar la estabilidad de las diferentes fases columnares en los fluidos OHSC y OSRS de manera similar a lo que se ha hecho en otros estudios previos [20] detallando las fases y la estructura resultante en función de la densidad y la presión.

Para ajustar el modelo OSRS, se modificaron dos parámetros principales: la temperatura y el grosor de las partículas. En cuanto a la temperatura, se estudiaron tres isotermas diferentes para cada grosor de partícula, utilizando valores de $T^*=1$, $T^*=1.465$, y $T^*=2$. En cuanto al grosor de las partículas, se empleó un factor de escala $F(T)$ para relacionar el grosor efectivo de la partícula en el modelo blando con el grosor de la partícula en el modelo duro. Este factor de escala se calculó mediante la siguiente expresión [22]:

$$L_{\text{eff}} = \int_0^{\infty} (1 - \exp[-\beta U_{\text{SR}}(d_m)]) d(d_m) = L^* \cdot \int_0^{\infty} (1 - \exp[-\beta U_{\text{SR}}(x)]) d(x) \quad x=d_m/L$$

$$L_{\text{eff}} = L^* \cdot F(T) \quad \text{donde } T \in [0, \infty] \rightarrow L_{\text{eff}} \in [2^{1/6}L^*, 0]$$

Donde:

L^* anisotropía de las partículas en el modelo blando.

L_{eff} es el grosor de la partícula en el modelo duro.

β es $1/KT$, donde K es la constante de Boltzman y T es la temperatura.

$U(d_m)$ potencial de interacción entre partículas a una distancia mínima (dm).

$F(T)$ es el factor de escala que depende de la temperatura.

Es importante destacar que a una temperatura específica de $T^*=1.465$, el factor de escala sería $F(T)=1$ esto significa que el modelo blando y el modelo duro tienen el mismo grosor de partículas a esa temperatura. En este estudio hemos optado por dejar fijo en cada caso la anisotropía de las partículas duras, fijándolas en $L_{\text{eff}}=0.1$ y 0.2 . A partir de aquí hemos calculado la anisotropía de las partículas blandas equivalentes como $L^* = 1/F(T) L_{\text{eff}}$. Con este procedimiento obtenemos $L^*=0.0985, 0.1$ y 0.1013 para las $T^*=1, 1.465, 2$ en el caso de $L_{\text{eff}}=0.1$ y $L^*=0.1970, 0.2$ y 0.2026 para las $T^*=1, 1.465, 2$ en el caso de $L_{\text{eff}}=0.2$.

Uno de los factores principales en este estudio ha sido el concepto de reescalado ya que implica ajustar parámetros del modelo blando, como la temperatura (T) y el grosor de la partícula (L) para que sus diagramas de fases se asemejen al modelo duro. La idea es que aunque las interacciones entre las partículas de los dos modelos son diferentes, en el OHSC duras y en el OSRS blandas y deformables, se pueden encontrar una correspondencia efectiva entre ambos ajustando los parámetros del modelo blando. Aunque es una herramienta útil para comparar modelos y simplificar su análisis, su éxito no está garantizado. Si el reescalado es exitoso implicaría que el modelo blando con sus interacciones más complejas podría ser estudiado utilizando el modelo duro como referencia lo que simplificaría el análisis. En el siguiente epígrafe se analizará si la metodología de reescalado ha resultado efectiva o no.

Capítulo 3. Resultados y Discusiones

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos de las simulaciones Monte Carlo realizados para investigar el comportamiento de fases de partículas discóticas bajo condiciones isotérmicas-isobáricas. Antes de proceder con el análisis de las figuras, es necesario comentar las características de las distintas fases y las herramientas utilizadas para diferenciarlas. En los sistemas de partículas discóticas, se pueden observar diversas fases dependiendo de la densidad, la temperatura y el grosor de las partículas. Las principales fases que se presentan son la columnar ordenada, columnar desordenada, nemática e isotrópica.

La fase columnar ordenada es aquella en la que las partículas se organizan en columnas o formando estructuras alineadas con un fuerte orden dentro de las columnas, tanto en la orientación como en la posición. En la fase columnar desordenada las partículas se organizan en columnas, pero sin un patrón interno perfectamente ordenado. En ambas fases se disponen en paralelo en una red hexagonal diferenciándose en su orden interno, es por eso que ésta no es tan ordenada como la fase anterior. La fase nemática se caracteriza por un orden orientacional de las partículas pero sin un orden posicional a largo alcance y la fase isotrópica que se caracteriza por la ausencia de orden en el que las partículas se distribuyen aleatoriamente sin una orientación. Configuraciones típicas de estas fases se han mostrado en la figura nº3.

El parámetro de orden es la herramienta clave utilizada para caracterizar a estas fases, ya que nos mide la alineación de las partículas en relación con una dirección preferente. En la fase isotrópica este parámetro es muy pequeño, mientras que en las fases columnar ordenada o nemática tiene valores más altos indicando por tanto una mayor alineación de las partículas.

A continuación se analizarán las figuras 4 a) y b) que muestran la relación entre el parámetro de orden y la densidad para los diferentes modelos, temperaturas y grosores de disco estudiados. En ambas gráficas a densidades bajas, el sistema se encuentra en fase isotrópica independientemente de la temperatura o el grosor del disco. A densidades altas el sistema se encuentra en una fase columnar ordenada para ambos grosores de discos y para todas las temperaturas. El parámetro S es bajo en las fases isotrópicas y va creciendo en el resto de las fases. Para la figura nº4 a) donde se presentan los resultados para el modelo OHSC a $L^*=0,1$ y los modelos OSRS equivalentes, a medida que la densidad aumenta se observa primero la aparición de una fase nemática para las tres temperaturas estudiadas. Posteriormente, al seguir incrementando la densidad el sistema pasa a una fase columnar desordenada. En esta figura se observa una excepción al comportamiento

general en el que observamos que para el modelo OHSC a $L^*=0,1$ a presión baja nos indica que tenemos una fase nemática en lugar de ser isotrópica. Para la figura nº4 b) los datos del modelo OHSC $L^*=0,2$ y sus modelos OSRS equivalentes muestran que el sistema pasa directamente de la fase isotrópica a la columnar desordenada, sin pasar por la nemática.

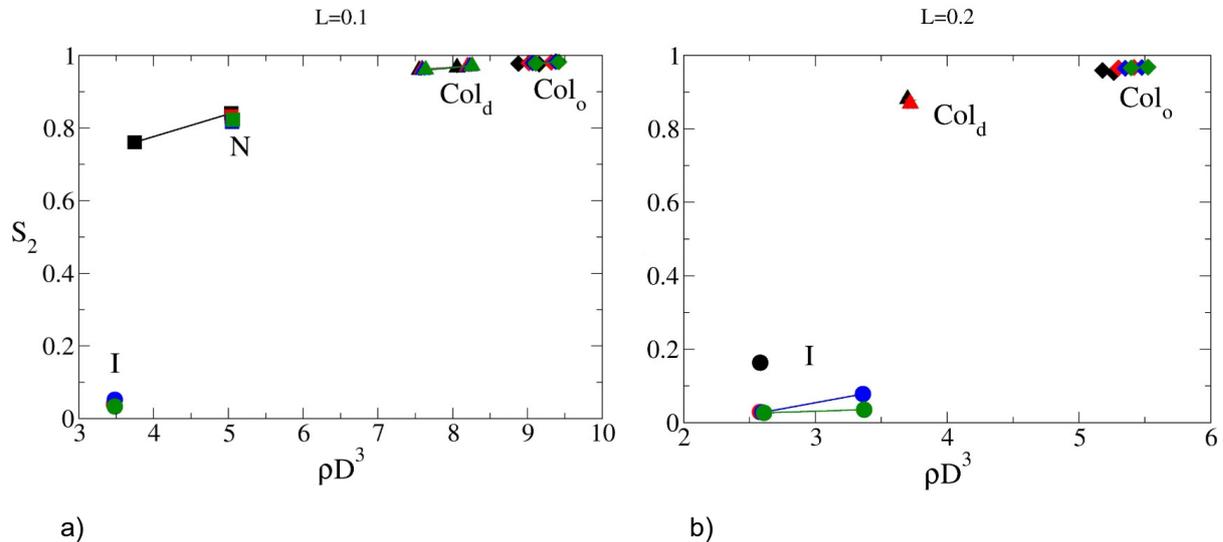


Figura nº 4 a) y b): representa el parámetro de orden frente a ρD^3 donde los círculos representa la fase isotrópica, el cuadrado indica la fase nemática, el triángulo señala la fase columnar desordenada y el rombo corresponde a la fase columnar ordenada. Además, correspondiente al modelo OSRS el color rojo se asocia a la temperatura $T^*=1$, el azul a la temperatura $T^*=1.465$ y el verde a la temperatura $T^*=2$ siendo el color negro para el modelo OHSC.

La presencia de fases columnares, y la diferencia entre ellas ha sido caracterizada por el análisis de g_{\parallel}^0 y g_{\perp}^0 . Con respecto a la figura nº5 se presentan ejemplos del comportamiento de g_{\perp}^0 y en relación con las gráficas anteriores, que muestran la transición de fases conforme varía la densidad y la temperatura, en esta nueva gráfica se observa los resultados de las simulaciones de los modelos OHSC y OSRS a las mismas presiones reducidas, pero a diferentes temperaturas. En ellas, vemos cómo varía g_{\perp} frente a r/D . Se destacan picos pronunciados, la posición de estos picos indican que las columnas se sitúan en una red hexagonal, como había sido indicado anteriormente [20]. A $P^*=200$, lo que indica una fase columnar en ambos modelos. Además, se observa en la gráfica una línea roja que muestra picos algo más débiles a $P^*=100$, lo que sugiere un comportamiento diferente, que parece indicar una fase columnar, aunque con un orden menos definido en comparación con el caso de $P^*=200$. Y a $P^*=50$, la curva se vuelve totalmente plana, lo que indica una transición a la fase nemática, donde no se observa ningún pico y no hay ordenamiento columnar. Este comportamiento se observa de manera similar en todos los sistemas estudiados.

A pesar de las diferencias en las interacciones de los dos modelos, la forma de las gráficas es similar en ambos casos. Para ambos modelos, los picos de la función g_{\perp} aumentan a medida que lo hace la presión, lo que sugiere un mayor ordenamiento estructural a presiones más altas. La posición de estos picos proporciona información sobre la disposición de las partículas en las diferentes fases (columnar ordenada o desordenada). Este comportamiento no se observa en la gráfica correspondiente a la fase nemática, donde no hay ningún ordenamiento de las partículas.

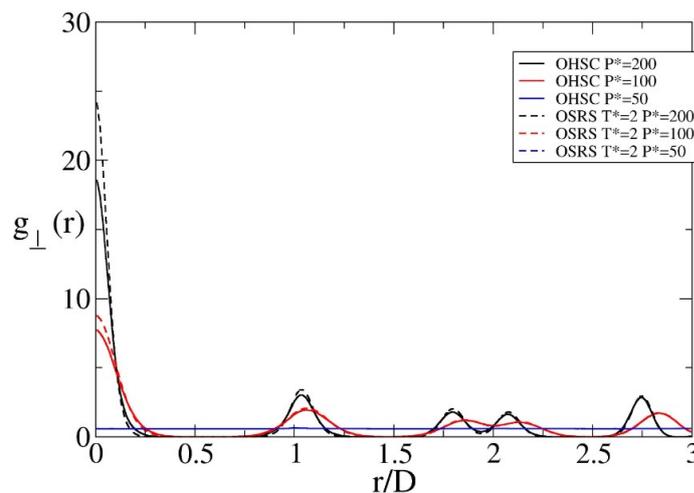


Figura nº5: representa g_{\perp} frente al r/D para el modelo duro OHSC a presiones reducidas P^* de 200 (línea continua negra), 100 (línea continua roja) y 50 (línea continua azul). También se incluyen tres curvas para el modelo blando OSRS a las mismas presiones reducidas P^* de 200 (línea discontinua negra), 100 (línea discontinua roja) y 50 (línea discontinua azul) a una temperatura reducida de T^* de 2.

Como se ha observado en las gráficas anteriores, la densidad y la presión juegan un papel crucial entre las diferentes fases del sistema. En este sentido, en la gráfica actual figura nº6 se representa la función de distribución radial g_{\parallel}^0 para los dos modelos de partículas discóticas en puntos que corresponden a fases donde las simulaciones para el modelo OHSC se muestran con líneas continuas y las del modelo OSRS con líneas discontinuas.

En esta nueva representación, se aprecian picos pronunciados en la función g_{\parallel}^0 para ambos modelos, especialmente a presiones altas, lo que sugiere la formación de estructuras ordenadas. Estos picos indican que las partículas se alinean de manera más regular, lo que caracteriza a una fase columnar ordenada, donde las partículas discóticas tienden a ordenarse en columnas bien definidas. Por otro lado, las gráficas que muestran picos menos pronunciados y con un alcance menor que corresponden a una disposición de partículas en una estructura más desordenada.

En este caso, estos picos menos pronunciados indican menos orden que en el caso anterior lo que sugiere a una fase columnar desordenada. Este comportamiento es consistente con lo observado anteriormente, donde las fases columnares ordenadas y desordenadas se asociaban con la evolución de la presión y la temperatura.

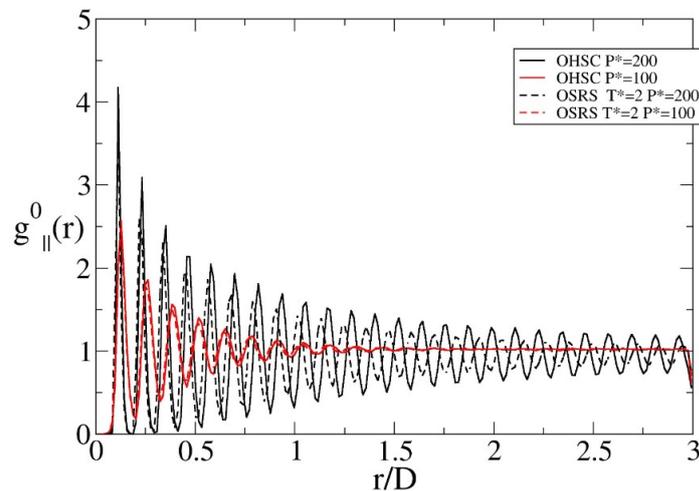


Figura n°6: representa $g_{||}$ frente al r/D para el modelo duro OHSC a P^* de 200 y 100 . Y dos curvas para el modelo blando OSRS a las mismas presiones reducidas a una T^* de 2.

A densidades bajas ambos modelos muestran una fase isotrópica, donde las partículas están repartidas aleatoriamente sin un orden preferencial. Sin embargo a densidades altas ambos presentan una fase columnar ordenada para los diferentes grosores de disco y temperaturas. Esta fase se caracteriza por la formación de columnas de partículas que se organizan en una red regular, es decir, formando una red hexagonal. Este comportamiento se debe a la forma de disco de las partículas que favorecen la estructura columnar ordenada a altas presiones y altas densidades.

En cuanto a la fase nemática, se caracteriza por un orden orientacional, en el cual las partículas se alinean en una dirección, pero no presentan un orden posicional a largo alcance. Las partículas en la fase nemática se agrupan de manera tal que mantienen su alineación, pero no forman una estructura regular en términos de su disposición espacial como le ocurre a la columnar ordenada. En la figura n° 7 a), se observa que para un fluido OHSC de grosor de disco $L^*=0.1$, a una presión de $P^*=50$, aparece esta fase nemática, mientras que para un grosor de disco $L^*=0.2$, no se observa la fase nemática en ninguna de las temperaturas estudiadas, para $T^*=1$ hay una fase columnar desordenada y para $T^*=1.465$ y $T^*=2$ fases isotrópicas. Esto sugiere que el grosor del disco influye significativamente en el tipo de fases formadas. Además, de la figura n°7 se puede deducir que la presión aumenta con la

densidad, lo que provoca la transición hacia fases ordenadas a medida que la densidad (y la presión) aumenta.

En cuanto a las coincidencias entre los modelos, es importante señalar que las graficas deben ser similares si el reescalado de parámetros se ha realizado correctamente. Cuando no coinciden, esto indica que el ajuste de la escala no ha sido completamente efectivo, y es necesario realizar más ajustes para obtener una comparación válida entre los modelos. Estas diferencias pueden estar relacionadas con la naturaleza de las interacciones en cada modelo o con las condiciones específicas de temperatura, grosor del disco y presión.

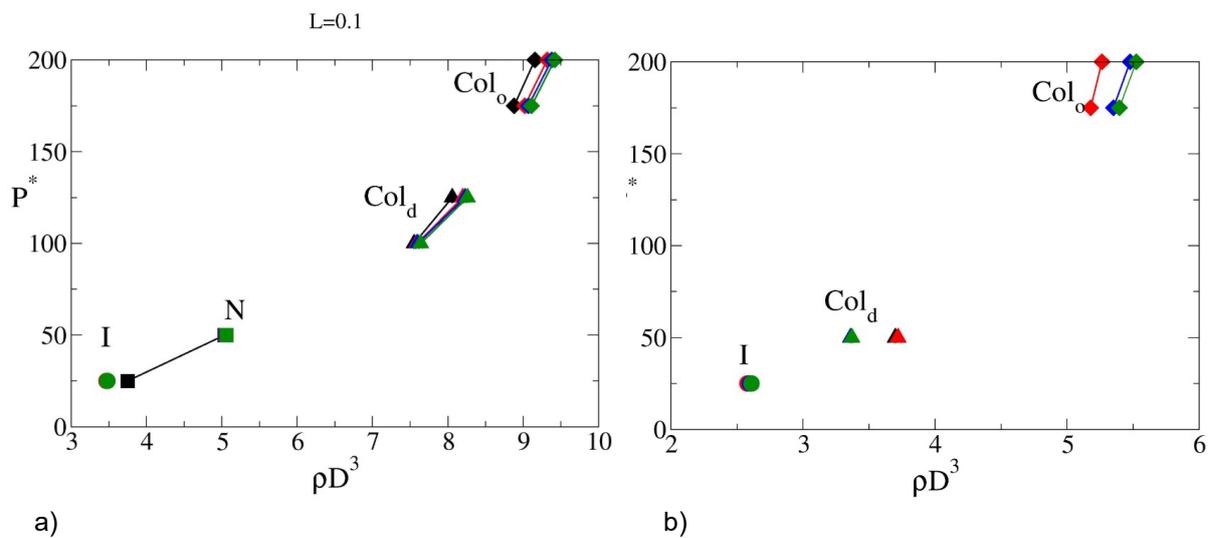


Figura 7 a) y b): representa la presión reducida (P^*) frente a ρD^3 donde los círculos representa la fase isotrópica, el cuadrado indica la fase nemática, el triángulo señala la fase columnar desordenada y el rombo corresponde a la fase columnar ordenada. Además, correspondiente al modelo OSRS el color rojo se asocia a la temperatura $T^*=1$, el azul a la temperatura $T^*=1.465$ y el verde a la temperatura $T^*=2$ siendo el color negro para el modelo OHSC

A continuación se analizará la secuencia de fases y la aplicabilidad de la ley de escala centrándonos en la información aportada por las gráficas. Hemos observado que la forma y la evolución de las curvas en las gráficas nos ha facilitado la identificación de las fases y sus cambios, lo que convierte a las gráficas en una herramienta eficaz para visualizar las distintas fases del sistema. En las figuras nº 4 a) y b) muestran el parámetro de orden frente a la densidad para diferentes modelos, temperaturas y grosores de disco. Si bien no ilustran directamente la ley de escala, si evidencian la necesidad de ajustar parámetros como la temperatura y el grosor del disco para lograr una correspondencia entre los modelos blando y duro. Esto sugiere que el reescalado de parámetros es crucial para obtener una comparación válida entre ambos modelos. Al observar las figuras 4 y 5, que muestran las funciones de distribución radial $g_{\perp}(r/D)$ y $g_{\parallel}(r/D)$ para los modelos OHSC y OSRS a diferentes

presiones, se nota que las curvas para ambos modelos tienen forma similar, a pesar de las diferencias en sus interacciones. Sin embargo, es importante recordar que el éxito del reescalado no está garantizado y que se necesitan más análisis para determinar su validez en estudio.

A continuación, se presentarán las tablas que muestran los valores numéricos correspondientes. En la tabla 1 a densidades bajas, el modelo OHSC y OSRS presenta una fase isotrópica, al ir aumentando la densidad el sistema transita a una fase columnar pero antes pasando por una fase nemática intermedia. Sin embargo, no ocurre lo mismo para grosor de disco duro OHSC $L^*=0.2$ y los casos OSRS equivalentes en la tabla 2. Al igual que en el caso anterior empezamos a bajas densidades con una fase isotrópica que pasa a una fase columnar pero sin llegar a la fase nemática que sí indicaba la tabla 1.

La ley de escala busca establecer una correspondencia entre el modelo blando (OSRS) y el duro (OHSC). La idea fundamental es que a pesar de las interacciones entre las partículas en ambos modelos, es posible encontrar una correspondencia efectiva entre ellos ajustando los parámetros del modelo blando.

En este estudio vemos la aparición de la fase nemática para un fluido de grosor $L^*=0.1$ y su ausencia para $L^*=0.2$ junto con las diferencias observadas en el caso de $P^*=50$ para $L^*=0.2$ donde el modelo OHSC muestra una fase columnar desordenada mientras que el modelo OSRS mantiene la fase columnar desordenada para $T^*=1$, pero no para $T^*=1.465$ ni $T^*=2$, donde ambos modelos muestran una fase isotrópica, esto sugiere que la ley de escala no se cumple completamente.

Es importante destacar que la ley de escala funciona en ciertos rangos, especialmente a presiones altas y densidades intermedias, donde las estructuras columnares ordenadas son prevalentes. Sin embargo, en presiones bajas o para ciertos grosores de disco, como $L^*=0.2$, las diferencias entre los modelos se hacen evidentes, especialmente al observar el comportamiento de las fases a diferentes temperaturas. Esto indica que no hay correspondencia entre los modelos ya que no se mantiene a todas las presiones o densidades, lo que sugiere que la ley de escala no es completamente aplicable en todos los casos.

P*	OHSC $L_{eff}=0.1$			OSRS $T^*=1$ $L^*=0.098522167$			OSRS $T^*=1.465$ $L^*=0.1$			OSRS $T^*=2$ $L^*=0.101317122$		
	Densidad	S_2	Fase	Densidad	S_2	Fase	Densidad	S_2	Fase	Densidad	S_2	Fase
200	9.155(5)	0.976(1)	Columnar ordenada	9.32(1)	0.981(1)	Columnar ordenada	9.38(2)	0.983(1)	Columnar ordenada	9.42(2)	0.982(1)	Columnar ordenada
175	8.880(4)	0.9776(9)	Columnar ordenada	9.02(2)	0.9793(8)	Columnar ordenada	9.07(2)	0.979(1)	Columnar ordenada	9.11(2)	0.978(2)	Columnar ordenada
150	8.53(1)	0.9737(6)	Columnar ordenada	8.66(2)	0.976(2)	Columnar ordenada	8.69(2)	0.975(2)	Columnar ordenada	8.74(2)	0.976(2)	Columnar ordenada
125	8.059(6)	0.967(2)	Columnar desordenada	8.20(2)	0.970(2)	Columnar desordenada	8.23(2)	0.970(2)	Columnar desordenada	8.26(2)	0.971(2)	Columnar desordenada
100	7.552(8)	0.960(1)	Columnar desordenada	7.59(2)	0.962(2)	Columnar desordenada	7.60(2)	0.959(3)	Columnar desordenada	7.64(2)	0.961(2)	Columnar desordenada
75	6.66(1)	0.941(2)	Columnar desordenada	6.67(3)	0.944(3)	Columnar desordenada	6.69(3)	0.946(3)	Columnar desordenada	6.72(2)	0.943(4)	Columnar desordenada
50	5.039(9)	0.841(6)	Nemática	5.04(2)	0.832(5)	Nemática	5.05(2)	0.817(7)	Nemática	5.06(2)	0.823(8)	Nemática
25	3.747(9)	0.761(6)	Nemática	3.47(1)	$3.91(1)10^{-2}$	Isótropa	3.48(2)	$5.16(2)10^{-2}$	Isótropa	3.48(2)	$3.29(1)10^{-2}$	Isótropa

Tabla 1: Datos de la simulación para el modelo OHSC $L_{eff}=0.1$ y para el OSRS a distintas temperaturas.

P*	OHSC $L_{eff}=0.2$			OSRS $T^*=1$ $L^*=0.197044335$			OSRS $T^*=1.465$ $L^*=0.2$			OSRS $T^*=2$ $L^*=0.202634245$		
	Densidad	S_2	Fase	Densidad	S_2	Fase	Densidad	S_2	Fase	Densidad	S_2	Fase
200	5.265(4)	0.9531(9)	Columnar ordenada	5.417(8)	0.967(1)	Columnar ordenada	5.478(7)	0.967(1)	Columnar ordenada	5.524(7)	0.968(1)	Columnar ordenada
175	5.179(5)	0.959(1)	Columnar ordenada	5.300(9)	0.966(1)	Columnar ordenada	5.352(9)	0.965(1)	Columnar ordenada	5.397(8)	0.966(1)	Columnar ordenada
150	5.061(4)	0.963(9)	Columnar ordenada	5.154(9)	0.964(2)	Columnar ordenada	5.199(9)	0.966(2)	Columnar ordenada	5.241(9)	0.966(1)	Columnar ordenada
125	4.895(9)	0.957(1)	Columnar ordenada	4.96(1)	0.964(2)	Columnar ordenada	4.944(9)	0.967(2)	Columnar ordenada	5.03(1)	0.967(2)	Columnar ordenada
100	4.647(7)	0.957(2)	Columnar ordenada	4.69(1)	0.963(2)	Columnar ordenada	4.73(1)	0.962(2)	Columnar ordenada	4.76(1)	0.962(2)	Columnar ordenada
75	4.311(3)	0.949(2)	Columnar ordenada	4.34(1)	0.945(2)	Columnar ordenada	4.37(1)	0.947(3)	Columnar ordenada	4.39(1)	0.944(3)	Columnar ordenada
50	3.700(7)	0.881(4)	Columnar desordenada	3.72(2)	0.869(9)	Columnar desordenada	3.36(1)	$7.79(3)10^{-2}$	Isótropa	3.37(1)	$3.54(1)10^{-2}$	Isótropa
25	2.581(6)	0.163 (8)	Isótropa	2.58(1)	$2.873(9)10^{-2}$	Isótropa	2.597(9)	$2.774(9)10^{-2}$	Isótropa	2.61(1)	$2.664(7)10^{-2}$	Isótropa

Tabla 2: Datos de la simulación para el modelo OHSC $L_{eff}=0.2$ y para el OSRS a distintas temperaturas.

Capítulo 4. Conclusiones

El objetivo principal de este Trabajo Fin de Máster ha sido investigar el comportamiento de fase de partículas discóticas utilizando simulaciones Monte Carlo en condiciones isotérmica-isobáricas. En particular, se ha estudiado la posibilidad de reescalar el comportamiento en un modelo blando con interacción repulsiva (OSRS) a partir de los resultados obtenidos con un modelo duro (OHSC).

Los principales hallazgos de este estudio incluyen la observación de las transiciones de fases en los modelos OHSC y OSRS, y la comprobación de las limitaciones en el reescalado. A densidades bajas, ambos modelos muestran una fase isotrópica, pero al aumentar la densidad, el sistema transita hacia una fase columnar ordenada, a veces pasando por una fase nemática intermedia, especialmente en el modelo OSRS con ciertos grosores de disco. Por tanto, se concluyó que el reescalado no siempre funciona de manera consistente entre los dos modelos. La aparición de la fase nemática en $L^*=0.1$ pero no en $L^*=0.2$, junto con las diferencias observadas en la fase columnar desordenada a presiones más bajas para $L^*=0.2$, sugieren que la correspondencia entre los modelos blando (OSRS) y duro (OHSC) no se puede aplicar de manera universal, los principales factores a considerar la geometría de las moléculas y las interacciones repulsivas específicas para cada modelo.

Por otro lado, la ley de escala propuesta parece ser más efectiva a altas presiones y temperaturas, cuando ambos modelos muestran una fase columnar ordenada. Sin embargo, esta ley no resulta aplicable en todas las condiciones, especialmente a presiones más bajas y con diferentes grosores de disco, lo que limita su uso de forma general. En este sentido, se hace evidente que el análisis de las diferentes fases en sistemas con partículas discóticas requiere una consideración detallada de las condiciones de simulación. En conclusión, este estudio subraya la complejidad de las distintas fases en sistemas de partículas discóticas y destaca la importancia de estudiar en detalle las interacciones y geometrías de las partículas al considerar los métodos de reescalado. Los resultados obtenidos abren la puerta a futuras investigaciones que podrían profundizar en el desarrollo de este tipo de métodos por otros más sofisticados que tomen en cuenta de manera más precisa las interacciones de cada modelo. Además, realizar simulaciones con un mayor número de partículas podría proporcionar resultados más precisos y representativos, permitiendo una mejor comprensión de las fases observadas.

También sería interesante investigar cómo otros parámetros, como la forma y el tamaño de las partículas, podrían influir en las distintas fases, lo que podría mejorar la obtención de aplicaciones de estos sistemas en diversas áreas, como la fabricación de materiales. Este trabajo sienta las bases para continuar explorando el comportamiento de sistemas de partículas discóticas bajo condiciones diversas, con la esperanza de contribuir al avance no solo de la teoría sino también de la práctica en este campo tan relevante para las ciencias de los materiales.

Referencias

- [1] Soft Matter Physics. M. Daoud y C.E. Willians (Ed.). Ed.Springer (1999)
- [2] Introduction to Soft Matter. I.W. Hamley. Ed. John Wiley and Sons (2000)
- [3] The Physics of Liquid Crystals. P.G. de Gennes y J. Prost. Ed. Oxford Science Publications (1998)
- [4] Cristián Cuerva de Alaíz. Metalomesógenos: cristales líquido en las nuevas tecnolog. MoleQla: Revista de Ciencias de la Universidad Pablo de Olavide nº12 ,3 (2013)
- [5] Zhuohao Z., Xinyuan Y., Yuanjin Z., Fangfu Y., Luoran S. Liquid Crystals materials for biom. appl. (2023)
- [6] S. Laschat, A. Baro, N. Steinke, F. Giesselmann, C. Hagele, G. Scalia, R. Judele, E. Kapatsina, S. Sauer, A. Schreivogel, and M. Tosoni, M., Angew. Chem.Int. Ed.46, 4832-4887 (2007)
- [7] L. Onsager, Ann. N.Y. Acad. Sci.51, 627 (1949)
- [8] L. Mederos, E. Velasco and Y. Martínez-Ratón, J. Phys.: Condens. Matter26, 463101 (2014)
- [9] D. Frenkel y B.M.Mulder, Mol.Phys 55, 1171 (1985)
- [10] P. Bolhuis and D. Frenkel, J. Chem. Phys.106, 666 (1997)
- [11] P. G. de Gennes and J. Prost, The Physics of Liquid Crystals, Clarendon Press,Oxford, 1994.
- [12] S. Fraden en Simulation of Phase Transitions in Complex Fluids, M. Baus, L.F.Rull y J. Ryckaert (Ed.). Ed. Kluwer Academic Publisher (1995)
- [13] S. Chandrasekhar, B. K. Sadashiva, K. A. Suresh. (1977). Pramana. 9, 471.
- [14] Chandrasekhar, S. (1992). Liquid Crystals, 2ª ed. Cambridge University Press, Londres.

- [15] R.Chávez et J.Santiago. Cristales líquidos. Parte I: “Cristales líquidos termotrópicos ,61. Revista de Química Vol. XIII, N° 2 Diciembre de 1999.
- [16] M. Wilson, Rev. Phys. Chem.24, 421 (2005)
- [17] C. M. Care, C. J. Cleaver, Rep. Prog. Phys.68, 2665 (2005)
- [18] G. Cinacchi, R. Colle and A. Tani, J. Phys. Chem. B,108, 7969 (2004); D.Andrienko, V. Marcon and K. Kremer, J. Chem. Phys.125, 124902 (2006); P.L.Cristinziano and F. Lelj, J. Chem. Phys.127, 134506 (2007)
- [19] J.L. Lebowitz and J.W. Perram, Mol. Phys.501207 (1983); D. Frenkel, B.M.Mulder and J.P. McTague, Phys. Rev. Lett.52, 287 (1984); M.P. Allen, Phys. Rev.Lett.65, 2881 (1990); D. Chakrabarti and D.J. Wales, Phys. Rev. Lett.100,127801 (2008); M.A. Bates, G. R. Luckhurst, J. Chem. Phys.104, 6696 (1996)
- [20] A. Cuetos and B. Martínez-Haya, J. Chem. Phys.,129, 214706 (2008)
- [21] A. Cuetos, B.Martínez-Haya and M.Dijkstra, J.Chem.Phys., 134, 094501 (2011)
- [22] A. Cuetos and B. Martínez-Haya.Molecular Phys., 113,9-10,1137-1144, (2015).
- [23] D. Frenkel, B.M.Mulder and J.P. McTague, Phys. Rev. Lett.52, 287 (1984); M.P. Allen, Phys. Rev.Lett.65, 2881 (1990)
- [24] M. P. Allen, G. T. Evans, D. Frenkel, and B. M. Mulder, in Advances in Chemical Physics (WileyOnline Library, 2007), vol. 86, pp. 1–16
- [25] Neftalí Morillo, Bruno Martínez-Haya and Alejandro Cuetos Soft Matter, 2021,17, 8693-8704 (2021)
- [26] H. Zewdie,Phys. Rev. E: Stat. Phys., 1998,57, 1793–1805

