

# **EXATAS E DA TERRA**

# **SIMULACIONES DE MONTE CARLO PARA EL MODELO DE MAIER-SAUPE**

**VEGA, Cristhian.**

Estudiante del curso de Ingeniería Física- ILACVN – UNILA;

E-mail: cristhian.mernes@aluno.unila.edu.br;

**DO CARMO, Eduardo**

Docente del curso de Ingeniería Física –ILACVN– UNILA.

E-mail: eduardo.carmo@unila.edu.br;

## **1 Introducción**

Los cristales líquidos son sustancias que presentan tanto propiedades de la fase sólida, como propiedades de la fase líquida, por el hecho que poseen, bajo ciertas condiciones, un grado de ordenamiento molecular mayor que los líquidos, aunque no alcanzan el grado de ordenamiento de un sólido. Este estado es llamado de mesofase, ya que, meso proviene del griego “mésos” que significa medio, podemos entender mesofase como una fase intermedia. Cabe destacar que en el gran desarrollo tecnológico que vemos hoy, los cristales líquidos tienen un papel muy importante, teniendo en cuenta que la mayor parte de los dispositivos electrónicos como ordenadores personales, monitores, televisores, celulares, entre otros; poseen una pantalla de cristal líquido, conocida también, por sus siglas en inglés, como “LCD”(Liquid Crystal Display). O sea, los cristales líquidos se encuentran en lo cotidiano de prácticamente todas las personas del mundo. Esto es suficiente para justificar la importancia de adquirir conocimientos para lograr comprender el comportamiento de los cristales líquidos. Refiriéndose específicamente a las pantallas de cristal líquido, una de las principales preocupaciones es el tiempo de respuesta de las moléculas, o sea, la velocidad con que las moléculas cambian de dirección al ser aplicado un campo externo. Para entender este ordenamiento es necesario realizar un estudio microscópico de las transiciones de fase en los cristales líquidos.

El presente trabajo, se enfoca en el parámetro de orden de los cristales líquidos nemáticos a través de un análisis geométrico, para posteriormente realizar un estudio computacional del modelo de Maier-Saupe, el cual se trata de un modelo de red para cristales líquidos nemáticos. Nuestra investigación utiliza el método de Monte Carlo, el cual permite analizar el ordenamiento molecular de un conjunto de moléculas a medida que la temperatura varía.

## 2 Metodología

Para iniciar el trabajo fue necesario realizar un estudio de la teoría que se refiere a las transiciones de fase de los cristales líquidos nemáticos termotrópicos. Además nuestro estudio se enfocó en comprender los fundamentos del método de Monte Carlo. Con ese conocimiento adquirido conducimos algunos cálculos analíticos e simulaciones de Monte Carlo.

## 3 Fundamentación teórica

Es ampliamente conocido en el área de mecánica estadística que para caracterizar matemáticamente una transición de fase es necesario definir un parámetro de orden. Dicho parámetro de orden manifiesta la simetría presente en una dada fase [1].

Para obtener el parámetro de orden es de vital importancia conocer el formato de las moléculas, para identificar posibles simetrías. En el caso específico de los cristales líquidos nemáticos termotrópicos, las moléculas poseen una simetría bien definida y generalmente son representadas por una especie de bastones como puede ser observado en la Fig.1.



Fig.1: Moléculas de cristal líquido

Además se debe tener en cuenta la variación que el parámetro de orden presenta cuando un conjunto de moléculas es sometido a una variación de la temperatura. Esta variación se presenta con el siguiente comportamiento, como sabemos la temperatura es una magnitud macroscópica que representa el grado de agitación molecular, por lo tanto para temperaturas elevadas la red de moléculas no posee ningún tipo de organización y para temperaturas bajas las moléculas presenta un alineamiento con un eje preferencial.

Considerando estos hechos y utilizando elementos geométricos básicos es posible construir el parámetro de orden para los cristales líquidos [2], este parámetro es dado por:

$$S = \frac{1}{2}(3 \langle \cos^2 \theta \rangle_T - 1)$$

La media indicada es la media térmica.

Esta relación es obtenida realizando un enlace entre geometría, parámetro de orden y termodinámica, haciendo una analogía entre el estado de temperatura elevada y una simetría esférica, lo que representaría el estado isotrópico y relacionando el estado de temperatura baja con una simetría elíptica, lo que representaría el estado anisotrópico [3] [4].

Posteriormente para poder realizar un estudio computacional de una red de moléculas, fue aplicado el método de Monte Carlo para el Modelo de Maier-Saupe, que se trata de un modelo de red para los cristales líquidos nemáticos termotrópicos. Cabe destacar que el Modelo de Maier-Saupe nos proporciona la forma de calcular la energía de la red por medio de la siguiente expresión:

$$\mathcal{H} = -A \sum_{(i,j)} \sum_{\mu,\nu} S_i^{\mu\nu} S_j^{\mu\nu}$$

Donde  $\mathcal{H}$  representa la energía del sistema,  $A$  es una constante de proporcionalidad y tanto  $S_i^{\mu\nu}$  como  $S_j^{\mu\nu}$  son la generalización matricial del parámetro microscópico de las moléculas de la red líquido cristalina que fue presentado anteriormente.

En lo que se refiere al método de Monte Carlo, es de suma importancia decir que el cambio de configuración de la red utiliza el factor de Boltzmann, que nos permite conocer la probabilidad de que la red de moléculas se encuentre en cierto estado:

$$p \propto \exp\left(-\frac{E}{kT}\right)$$

Donde  $p$  es la probabilidad,  $E$  es la energía,  $k$  es la constante de Boltzmann y  $T$  es la temperatura.

#### **4 Resultados**

Uno de los resultados más relevantes del trabajo consistió en la obtención, por medio de herramientas de matemática elemental, del parámetro de orden haciendo un enlace entre geometría, aprovechando las simetrías del problema y la termodinámica. La analogía propuesta fue imaginar el estado isotrópico siendo una esfera, teniendo en cuenta que para temperaturas elevadas la molécula puede apuntar para cualquier dirección y cambiar de dirección a una velocidad elevada, una vez que la temperatura disminuye la molécula pasa a adquirir una dirección de preferencia de modo que el sistema pasa a tener una simetría elíptica, lo que representaría el estado anisotrópico.

Además, obtuvimos por métodos computacionales el comportamiento de la transición de fase entre la fase líquido isotrópico y la de cristal líquido.

#### **5 Conclusión**

Basado en los conocimientos adquiridos a lo largo del trabajo, fue posible comprender como se da la transición de fase en los cristales líquidos y evidenciar esto de forma directa por medio de métodos computacionales, específicamente el método de Monte Carlo para el modelo de Maier-Saupe.

#### **6 Principales referencias bibliográficas**

- [1] Salinas, R.A. Silvio, (2005), *Introdução à Física Estatística*, Brasil, São Paulo, Edusp.
- [2] Gennes, Pierre-Gilles de y Prost, Jacques, (1993), *The physics of liquid crystals*, Oxford, Clarendon.
- [3] Simões, M., de Campos, A. y Barbato, D., (2007), *Local affine-connection approach to the elastic constants of nematic liquid crystals*, PHYSICAL REVIEW E.
- [4] Mottram, N.J. y Newton, C.J.P., (2014), *Introduction to Q-tensor theory*, [arXiv:1409.3542](https://arxiv.org/abs/1409.3542) [cond-mat.soft]