

Transiciones Percolativas Entre Fases Amorfas del Agua

2022/01/12



Bruno Hentschel

211196-5

8° semestre

brunohs23@gmail.com

Asesor:

Ricardo Paredes

Grado Académico: Doctor

ricardo.paredes.v@gmail.com

Sinodales:

Anwar Hasmy

Grado Académico: Doctor

anwarhasmy@hotmail.com

Felipe Cervantes Sodi

Grado Académico: Doctor

Felipe.cervantes@ibero.mx

Anteproyecto

Periodo de elaboración del proyecto: Semestre Primavera 2022.

Entrega final del proyecto: Miércoles, 27 de abril de 2022.

Antecedentes

En los últimos años se han publicado un gran número de artículos que investigan transiciones de fase en medios que son difíciles de analizar experimentalmente [1]. Una de las transiciones de mayor interés ha sido aquella entre fases amorfas de alta y baja densidad de agua súpercomprimida [2, 3]. En [1] se ha observado que la transición de baja a alta densidad de fases amorfas del vidrio es una secuencia de transiciones de fase percolativas.

Descripción del Proyecto

El objetivo del presente proyecto es explorar si las transiciones de fase entre los estados de agua anteriormente indicados son también percolativas.

Es de particular interés hacer notar que, específicamente para el agua, los resultados de las simulaciones varían enormemente dependiendo del modelo utilizado para simular las moléculas de agua. Tanto [2] como [3] utilizan más de un modelo del agua para sus simulaciones, y [3] muestra que los resultados varían cualitativamente dependiendo de dicho modelo. Para hacer nuestro análisis desarrollaremos programas para caracterizar las transiciones percolativas en este tipo de sistemas y lo aplicaremos, en primer momento, a las trayectorias de las simulaciones de dinámica molecular, utilizando el model de agua TIP4P/2005, realizadas en [3]. Estos autores argumentan que éste es el modelo más acertado.

Para la realización de estas simulaciones nos apoyaremos en algunos libros de simulaciones computacionales y la teoría percolativa [4, 5].

Bibliografía

- [1] Anwar Hasmy, Simona Ispas, and Bernard Hehlen. “Percolation transitions in compressed SiO_2 glasses”. In: *Nature* 599 (2021), pp. 62–66. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41586-021-03918-0>.
- [2] Pablo G. Debenedetti, Francesco Sciortino, and Gül H. Zerze. “Second critical point in two realistic models of water”. In: *Science* 369.6501 (2020), pp. 289–292. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.abb9796>.
- [3] Thomas E. Gartner III et al. “Manifestations of metastable criticality in the long-range structure of model water glasses”. In: *Nature Communications* 12.3398 (2021). DOI: <https://doi.org/10.1038/s41467-021-23639-2>.
- [4] Harvey Gould, Jan Tobochnik, and Wolfgang Christian. *An Introduction to Computer Simulation Methods Applications to Physical System*. CreateSpace Independent Publishing Platform, 2017. ISBN: 978-1974427475.
- [5] Anders Malthe-Sørensen. *Percolation theory using Python*. CreateSpace Independent Publishing Platform, 2017. ISBN: 978-1974427475.