



**UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES  
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES

**“Estudios con simulaciones moleculares de efectos  
quirales en mezclas de cristales líquidos”**

**PROYECTO DE DOCTORADO**

**PRESENTA**

M.C. Itzel Ileana Julio Borja

**TUTOR**

Dra. Jacqueline Quintana Hinojosa

Instituto de Química (UNAM)

**MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR**

Dr. Antonmaria Minzoni Alessio

Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y en Sistemas (UNAM)

Dr. Sergio Quiñones Cisneros

Instituto de Investigaciones en Materiales (UNAM)

MÉXICO, D.F.

MARZO 2016



# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Transiciones de fase</b>	<b>3</b>
2.1. Transiciones de Landau . . . . .	5
<b>3. Cristales Líquidos</b>	<b>7</b>

## *ÍNDICE GENERAL*

---

# Capítulo 1

## Introducción

Los cristales líquidos tienen una gran aplicación en...

Uno de los objetivos principales de este trabajo es caracterizar el orden de las transiciones de fase de segregación quiral para los modelos zigzag y Hockey Stick.

---

## Capítulo 2

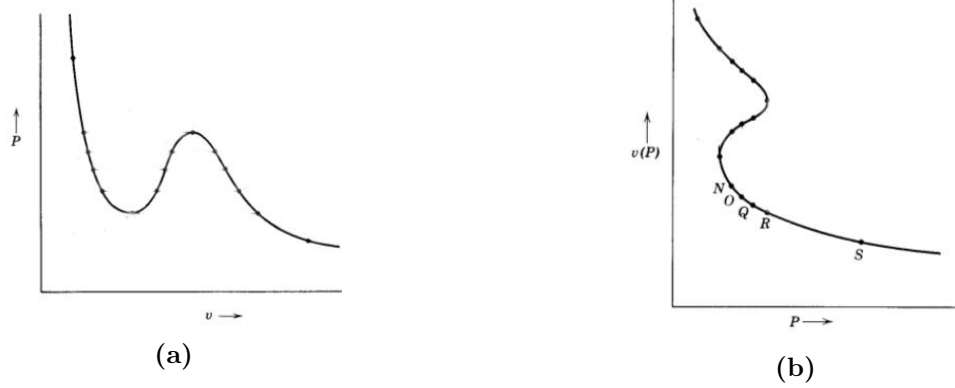
# Transiciones de fase

Las transiciones de fase están divididas en dos tipos, de primer orden y de segundo orden. Físicamente las transiciones de primer orden se caracterizan por la presencia de un calor latente ( $l = T\Delta s$ ), el cual se trata de aquel calor que al ser suministrado al sistema este último no aumenta su temperatura; por lo que esta cantidad es medible en el laboratorio. Cuando el valor de la temperatura empieza a aumentar nos encontramos en una transición de fase de segundo orden.

Matemáticamente, para describir a cada una de las clasificaciones se emplean los modelos de Ehrenfest y de Ladau o de parámetro de orden. Para Ehrenfest las transiciones de primer orden son aquellas que presentan una discontinuidad en la primera derivada de alguno de los potenciales termodinámicos

$$\begin{aligned} -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P &= S, \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T = V, \\ -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_P &= S, -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = P, \end{aligned} \tag{2.1}$$

Un cambio finito en cualquiera de las diferenciales parciales anteriores representa una transición de primer orden. En la figura 2.1 se observa cualitativamente transiciones de fase de primer orden, ya que las cantidades  $S$  y  $V$  tienen diferentes valores para cada una de las fases presentes en el diagrama de coexistencia líquido-vapor.



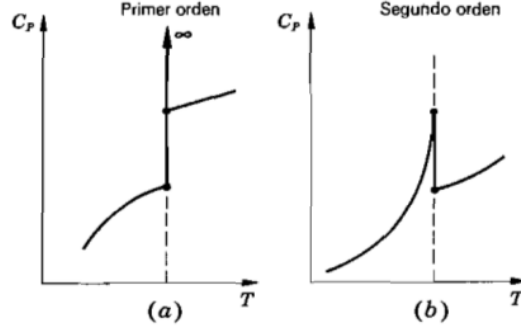
**Figura 2.1:** Una isoterma particular de van der Waals

Las transiciones de segundo orden presentan una discontinuidad en la segunda derivada de alguno de los potenciales termodinámicos y guardan una relación con las propiedades de respuesta.

$$\begin{aligned}
 -\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_P &= -\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P = -\frac{C_p}{T}, \\
 \left(\frac{\partial^2 G}{\partial P^2}\right)_T &= \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T = -\kappa_T V, \\
 -\left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\right)_V &= -\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = -\frac{C_p}{T}, \\
 \left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T &= \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T = -\frac{1}{\kappa_T V},
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

Una gráfica de  $C_p$  contra  $T$  sirve para distinguir entre las transiciones de fase. Cuando una sustancia se aproxima a la temperatura a la cual se da el cambio de fase de primer orden, su  $C_p$  permanece finito hasta la temperatura del cambio; se hace infinito sólo en presencia de la otra fase. Por otro lado el único caso físico que ha conducido a una solución analítica es el modelo de *Ising bidimensional*, el cual muestra un aumento del  $C_p$  aunque la sustancia sólo se encuentre en una de las fases mostrando una curva parecida a la letra griega  $\lambda$ .





**Figura 2.2:** Forma estructural de la molécula de metotrexato

## 2.1. Transiciones de Landau

Landau utiliza una cantidad física llamada *parámetro de orden* ( $\phi$ ), el cual caracteriza a ambas transiciones de fase. Para las transiciones de fase de primer orden  $\phi \neq 0$  y tiende a cero continuamente cuando la temperatura aumenta hacia la temperatura crítica ( $T_c$ ).

Muchas de las características de la transición de fase pueden conocerse si  $f(\phi, T)$  es conocida en una vecindad de  $\phi = 0$  y  $T = T_c$ . Landau desarrollo una serie de potencias alrededor de  $\phi = 0$

$$f(\phi, T) = f_0(T) + \lambda(T)\phi + \frac{1}{2}A(T)\phi^2 + \frac{1}{3}B(T)\phi^3 + \frac{1}{4}C(T)\phi^4, \quad (2.3)$$

En el caso de una sustancia ferromagnética, el parámetro de orden es  $\vec{m}$

$$\vec{m} = \frac{\vec{M}}{M_0}, \quad (2.4)$$

donde  $\vec{M}$  es el vector de magnetización y  $M_0$  es la magnitud de la magnetización de saturación en 0 K. Como se trata de una analogía exacta con el caso de un parámetro de orden escalar, la expansión de Landau sólo puede contener combinaciones escalares de  $\vec{m}$ . por lo que  $\lambda(T) = 0$  y  $B(T) = 0$

$$f(\phi, T) = f_0(T) + \frac{1}{2}A(T)\phi^2 + \frac{1}{4}C(T)\phi^4, \quad (2.5)$$

En este punto Landau asume que cerca de  $T_c$  el coeficiente  $C(T)$  varía lentamente comparado con  $A(T)$  por lo que puede ser reemplazado por una constante positiva.



## Capítulo 3

# Cristales Líquidos

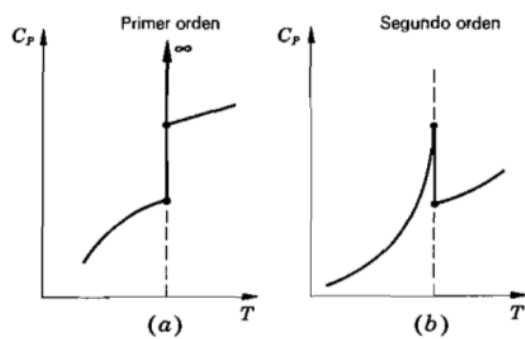
Los cristales líquidos son sustancias capaces de formar fases con propiedades líquidas y cristalinas a partir de que presentan correlaciones de corto alcance como un líquido y correlaciones de largo alcance como lo hace un sólido.

Ya que estas fases se encuentran entre la isotrópica y la cristalina reciben el nombre de mesofases y se caracterizan por la manera en que se agrupan las moléculas anisótropas que las conforman. Estas moléculas pueden presentar un orden orientacional u orientacional y posicional; de acuerdo al orden que presenten las moléculas se forman distintos tipos de mesofases.

**Mesofase nemática:** Existe un orden orientacional de largo alcance (las moléculas tienden a orientarse paralelamente unas a otras) y no existen correlaciones posicionales de largo alcance en los centros de masa de las moléculas. En equilibrio térmico, es posible establecer una dirección preferencial promedio, que se puede caracterizar por un vector llamado vector director, llamado director nemático  $\hat{n}$ .

**Mesofase colestérica:** Esta mesofase está formada por moléculas quirales, las cuales no muestran un orden posicional de largo alcance y en la escala local es posible definir un director nemático del sistema. Sin embargo, a gran escala el director nemático describe una hélice. Esta fase también recibe el nombre de fase quiral nemática.

**Mesofase esméctica:** En esta fase las moléculas presentan orden orientacional y posicional en una dirección, esto puede darse de modos distintos lo que genera diversos tipos de esta fase. Por ejemplo la esméctica A y esméctica C.



**Figura 3.1:** Forma estructural de la molécula de metotrexato

# Bibliografía

- [1] Zemansky Mark W, *Calor y termodinámica*. McGraw-Hill (1968) pp. 668.
- [2] E. B. Priestley, Peter J. Wojtowicz, and Ping Sheng, editors. *Introduction to liquid crystals*. Plenum Press, 2 edition, 1979.