



**Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa**  
División de Ciencias Básicas e Ingenierías  
Posgrado en Física

## **Simulaciones computacionales de gotas esféricas de cristales líquidos nemáticos**

Tesis que presenta  
**Jorge Amauri Munguía Valadez**  
**Matrícula: 2203802333**  
**correo: jorge\_phys@outlook.com**  
para obtener el grado de **Maestro en Ciencias (Física)**

**Director de Tesis:** Dr. José Antonio Moreno Razo

Jurado  
**Presidente:** Dr. Víctor Manuel Romero Rochín  
**Secretario:** Dr. Orlando Guzmán López  
**Vocal:** Dr. José Antonio Moreno Razo

Iztapalapa, CDMX a 23 de Julio del 2024

# Agradecimientos

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento a mi asesor, el Dr. José Antonio Moreno Razo, por todo el apoyo y la atención incondicional que me ha brindado durante este tiempo. Su dedicación y orientación han sido pieza fundamental en mi formación y desarrollo como científico.

Agradezco a mi familia, en especial a mi madre y hermanas, por su apoyo y la confianza que depositaron en mí. A mis compañeros y amigos quienes forman, o formaron parte, del grupo de investigación del Dr. Moreno Razo, en especial a mi gran amigo Yonatan Aldana Saldañas de quien siempre recibí ayuda.

Le agradezco a Alexa Aguilar, por su infinita paciencia y apoyo en todos estos años, por su amor incondicional y sincero.

Agradezco a todos mis profesores y colegas de quienes he aprendido a lo largo de los años. A los doctores: José Antonio Moreno Razo, Iván Santamaría Holek, Edward John Sambriski, Benjamín Ibarra Tandi, Luis Octavio Pimentel, Enrique Díaz Herrera, Gustavo Chapela Castañares y Fernando del Río Haza, con cariño y nostalgia al Dr. Saúl Iván Hernández, gracias.

Expreso mi agradecimiento a la Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa, en especial al departamento de Física. Al proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-247 y a la beca otorgada por el CONACyT (No 947695) por la cual fueron posibles mis estudios de posgrado.

*"El presente es de ustedes,  
pero el futuro, por el que tanto he trabajado,  
me pertenece"  
Nikola Tesla*

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>1</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>3</b>
1.1. Cristales Líquidos . . . . .	3
1.2. Técnicas de simulación molecular . . . . .	6
1.3. Dinámica molecular orientacional . . . . .	7
1.4. Potenciales de interacción no-esféricos . . . . .	8
<b>2. Objetivos</b>	<b>10</b>
2.1. General . . . . .	10
2.2. Específicos . . . . .	10
<b>3. Modelo</b>	<b>12</b>
3.1. Parámetro de orden nemático . . . . .	12
3.2. Anclaje molecular . . . . .	14
3.3. Potencial de Gay-Berne . . . . .	14
3.4. Matrices de Jones . . . . .	18
<b>4. Metodología</b>	<b>22</b>
4.1. Construcción de la superficie esferoïdal . . . . .	24
4.2. Código de dinámica molecular y su verificación . . . . .	26
4.3. Detalles de simulación: Gotas esferoïdales . . . . .	29
<b>5. Resultados</b>	<b>31</b>
5.1. Anclaje planar . . . . .	31
5.1.1. Gota esferoïdal prolata . . . . .	31
5.1.2. Gota esferoïdal oblata . . . . .	35
5.2. Anclaje homeotrópico . . . . .	38
5.2.1. Gota esferoïdal prolata . . . . .	38
5.2.2. Gota esferoïdal oblata . . . . .	41
5.3. Configuración bipolar . . . . .	43
5.4. Configuración radial . . . . .	45
<b>6. Conclusiones</b>	<b>53</b>
<b>7. Perspectivas</b>	<b>56</b>

<b>8. Apéndices</b>	<b>57</b>
8.1. Apéndice A: Artículos publicados . . . . .	57
8.2. Apéndice B: Congresos y seminarios . . . . .	58
8.3. Apéndice C: Unidades reducidas . . . . .	59
8.4. Apéndice D: Información complementaria . . . . .	59
<b>Bibliografía</b>	<b>63</b>

# Índice de figuras

1.1.	a) Estructura molecular de un mesógeno heterocíclico, b) Estructura molecular del <i>pentyl cyanobiphenyl</i> (5CB) y c) tipo de molécula discótica. . . . .	3
1.2.	Arreglo molecular en las mesofases de CL. . . . .	4
1.3.	Forma esquemática de algunos movimientos básicos en diferentes ensembles de Monte Carlo . . . . .	7
1.4.	Imágenes instantáneas para el modelo de CL-ANC. En a) se muestra la fase isótropa, b) la fase nemática y en c) la fase cristalina. . . . .	9
3.1.	a) Representación de la orientación de los mesógenos en una mesofase y b) ordenamiento de las partículas de acuerdo al valor del parámetro de orden escalar, $S$ . . . . .	13
3.2.	Representación esquemática del anclaje planar y homeotrópico en superficies con diferente curvatura. . . . .	14
3.3.	Representación esquemática de dos mesógenos de GB. . . . .	15
3.4.	Representación gráfica del potencial GB para dos diferentes parametrizaciones, GB(3,5,2,1) y GB(4.4,20,1,1). . . . .	16
3.5.	Curvas equipotenciales para la parametrización GB(3,5,2,1). . . . .	17
3.6.	Representación gráfica del potencial GB para la parametrización (4.4, 20, 1, 1) que incluye la interacción mesógeno-esfera, especificando el tipo de anclaje. . . . .	18
3.7.	Curvas equipotenciales para la parametrización GB(4.4,20,1,1) cuando la interacción es mesógeno-esfera para diferentes valores del parámetro $\xi$ . . . . .	19
3.8.	Configuraciones de una gota de cristal líquido nemático. . . . .	20
3.9.	Coordenadas del sistema de referencia donde se indica la posición y dirección del director nemático local en un marco de referencia dentro de la gota. Figura tomada de [19]. . . . .	21
4.1.	De izquierda a derecha, se muestran representaciones esquemáticas de un esferoide prolato y un esferoide oblato, respectivamente ( $b = a$ ). Se indica la convención de orientar el eje de simetría rotacional a lo largo del eje $z$ . . . . .	23
4.2.	Representación de una serie de esferoides (incluida la esfera) como función del valor $\gamma$ . . . . .	23
4.3.	Representación de los pasos y consideraciones para la formación de la superficie esferoidal. . . . .	25
4.4.	Comparación de resultados de simulación para un sistema de GB(4.4, 20, 1, 1) reportados por de Miguel <i>et al.</i> [15] y calculados en este trabajo con motivos de comparación y verificación del código de dinámica molecular. . . . .	27

4.5.	En esta figura se muestran imágenes instantáneas de la simulación del sistema $GB(4.4, 20, 1, 1)$ correspondientes con los puntos señalados con símbolos llenos en la figura 4.4. . . . . .	27
4.6.	En esta figura se hace una comparación de los resultados calculados por de Miguel <i>et al</i> [16] y cálculos realizados en este trabajo para verificar nuestro código de dinámica molecular. . . . .	28
5.1.	Diagramas morfológicos de las configuraciones encontradas para los dos tipos de anclaje estudiados: a) anclaje planar y b) anclaje homeotrópico. . . . .	32
5.2.	Representación de la gota esferoidal prolata con $\gamma = 1.25$ para un anclaje planar en su superficie. . . . .	33
5.3.	Representación de la gota esferoidal prolata con $\gamma = 2.0$ para un anclaje planar en su superficie. . . . .	34
5.4.	Representación de la gota esferoidal prolata con $\gamma = 4.0$ para un anclaje planar en su superficie. . . . .	35
5.5.	Representación de la gota esferoidal oblata con $\gamma = 0.8$ para un anclaje planar en su superficie. . . . .	36
5.6.	Representación de la gota esferoidal oblata con $\gamma = 0.5$ para un anclaje planar en su superficie. . . . .	37
5.7.	Representación de la gota esferoidal oblata con $\gamma = 0.25$ para un anclaje planar en su superficie. . . . .	38
5.8.	Representación de la gota esferoidal prolata con $\gamma = 1.25$ para un anclaje homeotrópico en su superficie. . . . .	40
5.9.	Representación de la gota esferoidal prolata con $\gamma = 2.0$ para un anclaje homeotrópico en su superficie. . . . .	41
5.10.	Representación de la gota esferoidal prolata con $\gamma = 4.0$ para un anclaje homeotrópico en su superficie. . . . .	42
5.11.	Representación de la gota esferoidal oblata con $\gamma = 0.8$ para un anclaje homeotrópico en su superficie. . . . .	43
5.12.	Representación de la gota esferoidal oblata con $\gamma = 0.5$ para un anclaje homeotrópico en su superficie. . . . .	44
5.13.	Representación de la gota esferoidal oblata con $\gamma = 0.25$ para un anclaje homeotrópico en su superficie. . . . .	45
5.14.	Comparación de los resultados de este trabajo, para la configuración de defectos bipolar, con publicaciones. De a)-c) se muestran resultados de configuraciones representativas: a) $\gamma = 1.25$ , b) $\gamma = 2.0$ y c) $\gamma = 4.0$ , con anclaje planar en la superficie de la gota, todos a $T = 2.0$ . . . . .	46
5.15.	Comparación de los resultados de este trabajo, para la configuración de defectos bipolar, con publicaciones. De a)-c) se muestran resultados de configuraciones representativas: a) $\gamma = 0.8$ , b) $\gamma = 0.5$ y c) $\gamma = 0.25$ , con anclaje planar en la superficie de la gota, todos a $T = 2.0$ . . . . .	47
5.16.	Comparación de los resultados de este trabajo, para la configuración de defectos bipolar, con publicaciones. De a)-c) se muestran resultados de configuraciones representativas: a) $\gamma = 1.25$ con $T = 8.0$ , b) $\gamma = 2.0$ con $T = 12.0$ y c) $\gamma = 0.8$ con $T = 12.0$ , con anclaje homeotrópico en la superficie de la gota. . . . .	48

5.17. Comparación de los resultados de este trabajo, para la configuración de defectos radial, con publicaciones. De a)-c) se muestran resultados de configuraciones representativas: a) $\gamma = 1.25$ y $T = 2.0$ , b) $\gamma = 0.8$ y $T = 2.0$ y c) $\gamma = 0.25$ y $T = 8.0$ , con anclaje homeotrópico en la superficie de la gota. . . . .	49
5.18. Resultados para configuraciones de defectos tipo-radial debido a la perspectiva. Se muestran resultados de configuraciones representativas: a) $\gamma = 1.25$ y $T = 4.0$ , b) $\gamma = 2.0$ y $T = 4.0$ , c) $\gamma = 0.8$ y $T = 12.0$ , $\gamma = 0.25$ y $T = 10.0$ y e) $\gamma = 0.25$ y $T = 8.0$ , con anclaje en la superficie de la gota: a)-b) planar y c)-e) homeotrópico. . . . .	50
5.19. Resultados para configuraciones de defectos tipo-axial debido a la perspectiva. Se muestran resultados de configuraciones representativas: a) $\gamma = 1.25$ , b) $\gamma = 2.0$ y c) $\gamma = 4.0$ , con anclaje homeotrópico en la superficie de la gota. . .	51
5.20. Comparación de los resultados de este trabajo, para la configuración de defectos tipo-axial, con publicaciones. De a)-c) se muestran resultados de configuraciones representativas: a) $\gamma = 0.8$ , b) $\gamma = 0.5$ y c) $\gamma = 0.25$ , con anclaje homeotrópico en la superficie de la gota, todos a $T = 2.0$ . . . . .	52
8.1. Energía potencial de los mesógenos dentro de la nanogota contra algunos últimos pasos de tiempo de simulación. Los valores de la energía presentados pertenecen a los sistemas con anclaje planar. . . . .	61
8.2. Energía potencial de los mesógenos dentro de la nanogota contra algunos últimos pasos de tiempo de simulación. Los valores de la energía presentados pertenecen a los sistemas con anclaje homeotrópico. . . . .	62

# Resumen

En este trabajo se presenta un análisis sistemático de la formación de defectos topológicos en la fase nemática de cristales líquidos confinados en gotas esferoidales prolatas y oblatas implementando simulaciones de dinámica molecular. Los mesógenos se modelaron con partículas elipsoidales prolatas interactuando con el potencial de Gay-Berne. La gota se modeló con una superficie esferoidal conformada por partículas esféricas, estas no interactúan entre sí, pero si lo hacen con los mesógenos en el interior. El potencial para la interacción mesógeno-esfera, se describe al simplificar el potencial de Gay-Berne cuando una de las partículas carece de orientación.

En el primer capítulo se da una breve descripción sobre cristales líquidos y las características de algunas de las fases más conocidas. También, se incluye información sobre las técnicas de simulación molecular, algunas de sus características y diversidad de métodos en la dinámica molecular. Se presentan los resultados de las diferentes configuraciones de defectos. En el segundo capítulo se dan a conocer los objetivos, general y específicos, que se plantearon al inicio de la investigación y culminaron en el presente reporte escrito.

En el capítulo tercero se habla del modelo de potencial de Gay-Berne para las interacciones mesógeno-mesógeno y mesógeno-esfera, así como una descripción de las cantidades que se midieron en este trabajo. Tal es el caso del parámetro de orden nemático, el cual sirvió para identificar el grado de ordenamiento orientacional del sistema, de manera local, y poder identificar los defectos topológicos en la fase nemática. Además, se incluye una breve descripción de lo que se denomina como anclaje molecular y la metodología de Jones para el cálculo de las texturas de polarizadores cruzados.

En el capítulo cuatro se describe la metodología seguida para la construcción de las superficies de las gotas y los algoritmos implementados en dicha tarea. Se trata la dinámica molecular y las características en cuanto al integrador, termostatos y barostatos que se implementaron en todo el trabajo. Se reportan resultados que sirven a modo de verificación del

código de simulación desarrollado, comparando con algunas referencias de la literatura.

En los capítulos cinco y seis se presentan los resultados y conclusiones sobre la variedad de defectos topológicos que resultan de las simulaciones moleculares. La relación que existe entre las fluctuaciones térmicas, el grado de confinamiento y la condición en la fuerza de anclaje, se explican a detalle en estos apartados. La caracterización de las diferentes configuraciones de defectos que van desde bipolares, radiales hasta axiales, vienen acompañadas de cálculos entre polarizadores cruzados donde se implementó la metodología de Jones.

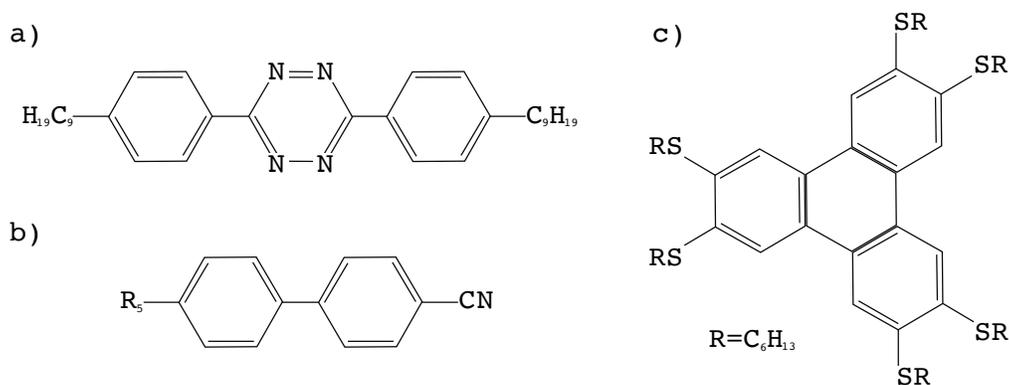
Finalmente, se presentan las perspectivas que resultan de este trabajo. Adicionalmente, se han agregado apéndices que incluyen los trabajos publicados a lo largo de mis estudios de posgrado, junto con una mención de los distintos congresos y seminarios en los cuales participé presentando mis avances y resultados, información adicional como gráficas de energía vs tiempo y tablas con parámetros para los cálculos de las texturas de la estructura interna de las nanogotas.

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Cristales Líquidos

Fue en 1888 cuando Friedrich Reinitzer, al estudiar ciertas sustancias orgánicas que presentaban transiciones de fase inusuales, observó, de forma inesperada, dos *puntos de fusión* para cristales líquidos del colesterol extraídos de la raíz de zanahoria [62, 46]. Por otra parte, los líquidos poseen un orden de corto alcance, mientras que los sólidos cristalinos, tienen un orden de largo alcance. En estos extremos de ordenamiento de las moléculas se encuentran sistemas que tienen correlaciones de corto alcance en una dirección, mientras que en otra dirección tienen correlaciones de largo alcance. Un *cristal líquido* (CL) se caracteriza por presentar propiedades intermedias entre los sólidos cristalinos y los líquidos convencionales, los cuales poseen órdenes de orientación a nivel molecular, lo que les confiere una notable anisotropía en sus propiedades físicas. Los CL están compuestos por conjuntos de grandes moléculas orgánicas que poseen un núcleo alargado y rígido (comúnmente formado por anillos de benceno) aunado a una cadena flexible (ver ejemplos en la figura 1.1). Esta estructura molecular se ha modelado utilizando geometrías similares, como pueden ser discos, varillas



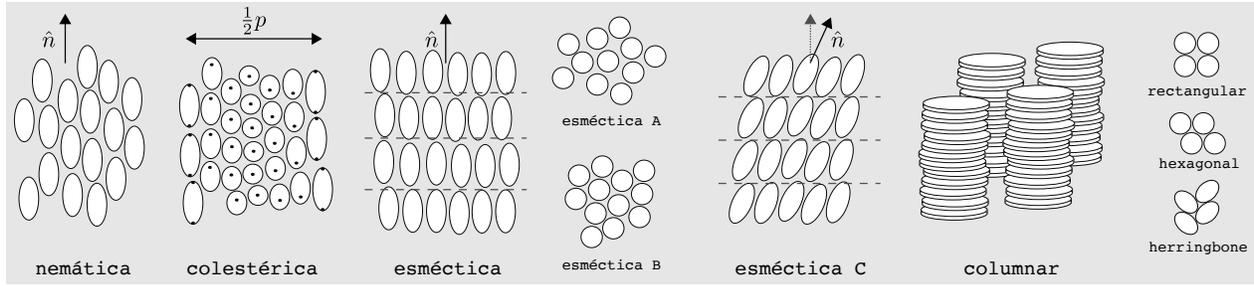


Figura 1.2: Arreglo molecular en las mesofases de CL. En la fase nemática, existe una correlación orientacional pero no posicional. La orientación promedio se denota por el vector director  $\hat{n}$ . En una colestérica, la orientación promedio se tuerce (twist) a través del medio con una cierta periodicidad, mientras que las moléculas no están correlacionadas posicionalmente. En una esméctica A, los mesógenos se encuentran en planos, la dirección de las partículas es perpendicular a dichos planos y los centros de masa de los mesógenos se encuentran desordenados. El esméctico B tiene un arreglo hexagonal de moléculas en los planos, mientras que en el esméctico C el director  $\hat{n}$  está inclinado respecto a la dirección normal a los planos. La fase columnar se presenta para mesógenos discóticos exhibiendo posibles arreglos como rectangular, hexagonal o herringbone. La imagen fue tomada de la referencia [3].

o elipsoides de revolución con longitudes mayores que sus anchos. Debido a que los CL son una fase intermedia, o *mesofase*, entre los líquidos y los sólidos cristalinos, a las moléculas responsables de la formación de dicha fase se les conoce como *mesógenos*. El comportamiento líquido-cristalino se ha encontrado presente, por ejemplo, en ciertas soluciones coloidales [7, 6] y poliméricas [64, 65]. En este caso, la concentración es el principal parámetro de control sobre la fase del CL, denominándoseles cristales líquidos *liotrópicos*. Cuando el primer parámetro importante de control es la temperatura, nos encontramos con un cristal líquido *termotrópico*. Dependiendo de la orientación y el arreglo que presenten los mesógenos, los CL pueden catalogarse en: nemáticos, colestéricos, esmécticos y mesofases columnares (ver figura 1.2). Cuando un fluido de mesógenos se encuentra a altas temperaturas, predomina sobre cualquier otra la fase isotrópica, la cual se refiere al desorden posicional y orientacional de las moléculas del sistema. A bajas temperaturas, o altas concentraciones, la entropía que favorece una posición aleatoria de los centros de masa de las partículas, junto con la orientación casi paralela entre ellas, promueven la formación de la fase nemática. En la fase nemática, las moléculas se alinean en una dirección que se conoce como *director*, representado por el vector unitario  $\hat{n}$ , esta dirección puede variar a lo largo del medio. Las moléculas ordenadas nemáticamente poseen una correlación de largo alcance en sus orientaciones, mientras que mantienen un arreglo aleatorio en el espacio respecto a la posición de sus centros de masa [69, 3, 33].

La fase colestérica es muy similar a la fase nemática, excepto que el vector director  $\hat{n}$  no

es constante y varía de forma regular a lo largo del medio. A lo que se refiere esto último es a que el CL colestérico lo podemos entender como si se hiciera girar un nemático a lo largo de un eje, tal y como se muestra en la figura 1.2. Una característica que resalta de la fase colestérica, es la distancia media, a lo largo del eje de giro, sobre el cual el director gira hasta completar un círculo completo. A esta distancia  $p$  se le conoce como *pitch* de la fase colestérica. La longitud del pitch depende de la concentración y composición química, la temperatura, la aplicación de campos electromagnéticos y el grado de *quiralidad* de las moléculas; esta es típicamente de varios miles de ángstroms, lo que significa que la dispersión de luz de esta fase cae en el rango visible. Una vez que la fase nemática se somete a temperaturas cada vez más bajas, las moléculas se segregan en planos, abriendo paso a un CL esméctico. Esto es, los mesógenos se sitúan en capas bien definidas espaciadas esencialmente por una distancia igual al largo de las partículas (ver figura 1.2).

En cada una de estas capas hay un movimiento molecular como si de un líquido se tratara y existe libertad de las capas de deslizarse unas sobre otras. La presencia de las capas en un esméctico permite la existencia de una correlación posicional de tipo sinusoidal en la densidad del sistema. Dependiendo del ordenamiento molecular en las capas de un esméctico, se han logrado identificar diferentes tipos de mesofases esmécticas. Una de ellas es la fase esméctica A; en esta, las moléculas se encuentran alineadas perpendicularmente a las capas sin un orden de largo alcance (figura 1.2). En un esméctico tipo C, la dirección preferencial de las moléculas no es perpendicular a los planos, sino que se encuentra angularmente desplazado, por lo que la fase adquiere simetría biaxial. Por último, en un esméctico B, existe un ordenamiento de los mesógenos tipo hexagonal en cada una de las capas [11, 3]. Cuando las moléculas tienen geometría discótica, pueden formar la mesofase columnar. Esta consiste en moléculas discóticas apiladas unas con otras formando columnas (ver figura 1.2). En los CL discóticos existe la fase nemática y las moléculas se encuentran *suspendidas* con sus caras orientadas, en promedio, en la dirección del director nemático. En esta mesofase, el sistema carece de correlación de largo alcance en las posiciones de los centros de masa de las partículas. En un sistema columnar podemos encontrar diversos arreglos, es decir, que las columnas de discóticos formen una *lattice* cuadrada, hexagonal o triangular, herringbone, etc.

## 1.2. Técnicas de simulación molecular

La mecánica estadística tiene, como uno de sus objetivos, conectar el mundo macroscópico descrito por la termodinámica y el mundo microscópico. Para esto, y en el contexto de

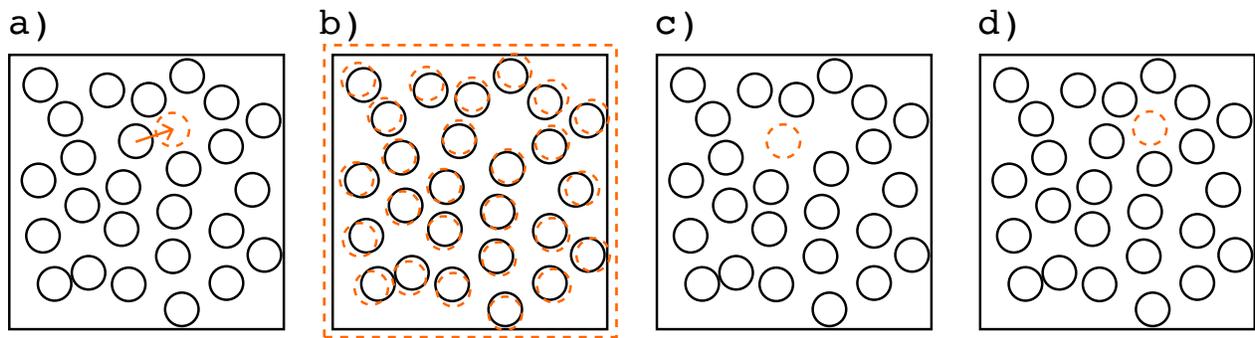


Figura 1.3: Forma esquemática de algunos movimientos básicos en diferentes ensembles de Monte Carlo [58]. a) traslación de partícula, b) cambio del volumen, c) eliminación de partícula, d) creación (inserción) de partículas.

la termodinámica de fluidos, se han desarrollado teorías del estado líquido (como la teoría de perturbaciones, ecuaciones integrales, etc.) y técnicas de simulación molecular (como las técnicas de Monte Carlo, la Dinámica molecular, etc.). La técnica de Dinámica Molecular (DM o bien, MD, por sus siglas en inglés, Molecular Dynamics) se ha desarrollado con mayor fuerza en los últimos años debido al avance tecnológico, tanto en poder computacional como de almacenamiento de datos. Dentro del grupo de las técnicas de simulación podemos encontrar los métodos de Monte Carlo, basados en diferentes microestados generados a partir de configuraciones aleatorias, conformados por partículas de diferentes tipos como pueden ser, átomos, moléculas pequeñas, rígidas o bien, macromoléculas. Estas configuraciones cambian de manera aleatoria bajo una serie de reglas proporcionadas por la mecánica estadística para muestrear adecuadamente el espacio fase. Existen diversos métodos que emplean el Monte Carlo y sus virtudes podrán ser aprovechadas dependiendo del sistema a tratar. En la figura. 1.3 se muestran de forma esquemática algunos *movimientos* de Monte Carlo básicos para diferentes ensembles [58]. La Dinámica Molecular, por otra parte, es una técnica computacional poderosa que permite estudiar el comportamiento y las interacciones de los átomos y/o moléculas a lo largo del tiempo. La DM es un método basado en la resolución numérica de las ecuaciones de Newton para todas las partículas del sistema y con ello generar la trayectoria del sistema en el espacio fase. Esta metodología se basa en la evaluación temporal de las posiciones y momentos de todas las partículas, permitiendo a su vez calcular las propiedades termodinámicas del sistema. El avance tecnológico y computacional desarrollado en los últimos años ha permitido realizar simulaciones de DM bastante robustas de sistemas cada vez más complejos (realistas) permitiendo así, obtener propiedades dinámicas que resultarían difíciles, o inaccesibles, de manera teórica o experimental.

Para llevar a cabo una simulación de DM, se debe iniciar con una configuración de átomos

o moléculas junto con sus velocidades iniciales, que representan el estado del sistema en un instante específico del tiempo. De aquí en adelante, se calculan las fuerzas entre las partículas usando un potencial de interacción efectivo por pares, que puede ser derivado de teorías físicas o ajustado empíricamente a partir de datos experimentales. Después, se integran las ecuaciones de movimiento para determinar las trayectorias de las partículas a lo largo del tiempo. Esto se hace en pequeños pasos de tiempo,  $\delta t$ , lo que permite seguir la evolución del sistema en incrementos temporales discretos.

Existen otros métodos de simulación molecular por computadora que permiten investigar una amplia variedad de sistemas cada vez más complejos a nivel atómico y molecular. Cada método tiene sus ventajas y desventajas, unos sobre los otros, y su implementación dependerá de la naturaleza del sistema a estudiar y de los objetivos que se pretenden alcanzar en dicho estudio. Una variante de la DM, que utiliza métodos cuánticos para calcular las fuerzas interatómicas, es la conocida DM *AB initio*. Se basa en la teoría cuántica de la función de onda y su objetivo es determinar las energías y fuerzas entre los átomos. Aunque resulta más costosa computacionalmente que la DM clásica, este método proporciona resultados más precisos, especialmente en sistemas que implican enlaces químicos fuertes o interacciones electrónicas. La dinámica Browniana (DB o BD por sus siglas en inglés Brownian Dynamics) es otro de los métodos que implementan la DM. Se trata de un método que describe el movimiento de partículas pequeñas inmersas en un fluido implícito, resulta útil para estudiar el comportamiento de nanopartículas, macromoléculas y otras estructuras a escalas nanométricas.

### 1.3. Dinámica molecular orientacional

Debido al gran avance tecnológico y computacional de los últimos años, se han desarrollado modelos computacionales cada vez más robustos en el ámbito de la simulación molecular. En cuanto a la DM se refiere, la creación y reformulación de modelos simples obliga a describir, de manera más precisa, las interacciones intra e intermoleculares añadiendo grados de libertad rotacionales a los sistemas físicos. Los sistemas más comunes de estudio han sido para partículas esféricas con interacciones esféricamente simétricas, por ejemplo, los modelos de Lennard-Jones (LJ-12-6), las esferas duras (HS, hard-sphere), el modelo de pozo-cuadrado (SW, square-well), entre muchos otros. También, se han considerado sistemas con un nivel de complejidad más elevado, tal es el caso del fluido de Stockmayer [68, 70, 76, 56], las interacciones de Gay-Berne (GB) [23], las esferas cuadrupolares, etc. Estos últimos modelos han sido de gran interés debido a que en su naturaleza se involucran interacciones no-esféricas y, en algunos casos, anisotropía en la *forma* de la partícula. En este sentido, se han propues-

to modelos moleculares de cadenas flexibles (o también rígidas) de sitios no esféricos que son de gran importancia en el estudio de cristales líquidos, polímeros, dendrímeros, entre otros [49, 41]. Para poder realizar simulaciones en este trabajo, es necesario contar con un código de simulación de DM que, además de resolver la dinámica traslacional de los centros de masa, resuelva la dinámica de las orientaciones de las partículas. Existen en la literatura y en las metodologías de simulación molecular, diferentes *integradores* de las ecuaciones de movimiento y diferentes *termostatos* y *barostatos* para los distintos ensembles en los que se desea trabajar.

En este trabajo, nos enfocaremos en el integrador conocido como *velocity-Verlet* (VV) [71] y en el termostato de *Nose-Hoover* (NH) [51, 28] para el ensemble canónico NVT. Los detalles del integrador de VV y el termostato de NH-NVT se encuentran de manera explícita en el trabajo de J. Illytskyi y M. Wilson [31]. Cabe mencionar que el trabajo de Wilson *et al.* ha servido como guía en el desarrollo de la DM orientacional en este trabajo, de modo que en él se encuentra explícitamente el algoritmo de VV y las ecuaciones de NH-NVT.

## 1.4. Potenciales de interacción no-esféricos

Con la intención de describir las interacciones de moléculas capaces de formar fases líquido-cristalinas, se han propuesto diversos modelos de interacción anisótropa. Algunos de los primeros intentos por modelar partículas no esféricas (alargadas o discóticas) se caracterizan por generalizar el modelo de esfera-dura y extenderlo, por ejemplo, para elipsoides de revolución, varillas delgadas, esferocilindros, discos, etc. Siguiendo esta ruta, para modelos moleculares de interacción más realistas, destacan los trabajos de Kihara [34, 36, 37, 35, 38], el potencial de Berne-Pechukas [8], el potencial de Gay-Berne [23], el potencial de Gay-Berne-Luckhurst-Romano [39, 50], el potencial de Hess [26], entre muchos otros. Recientemente, se ha realizado un trabajo de simulación molecular usando el potencial de interacción de la Teoría *Approximate Non-Conformal* (ANC) [43, 18, 59, 63, 21, 60, 61] para modelar interacciones no-esféricas, simétricamente. Se modificó la contribución atractiva del potencial acondicionándola con un término que depende de las orientaciones de las partículas a la Hess-Su [27]. Esto repercute en la energía del sistema, añadiéndole contribuciones anisótropas. Las bondades del potencial ANC, de poder manipular el parámetro de *suavidad* [30, 22, 47],  $s$ , son heredadas a este nuevo modelo de interacción permitiendo investigar, de forma cualitativa, el *umbral* (relación largo-ancho aparente de la partícula) para mantener estable la fase nemática [14] (ver publicaciones en el apéndice A). Ejemplos del resultado de las simulaciones y la forma que toma

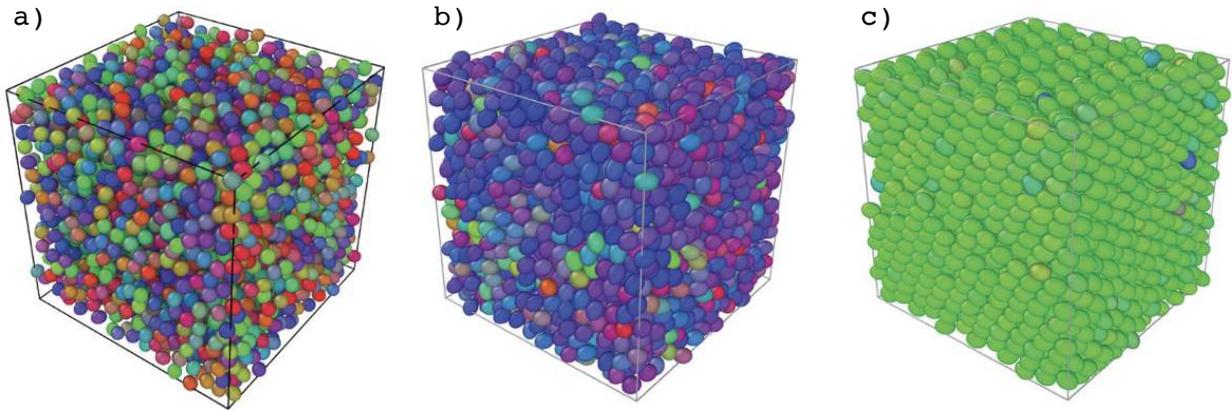


Figura 1.4: Imágenes instantáneas para el modelo de CL-ANC. En a) se muestra la fase isotrópica, b) la fase nemática y en c) la fase cristalina. El valor de la suavidad corresponde con  $s = 0.5$ ,  $1.0$  y  $1.0$ , respectivamente.

la partícula debido al potencial de interacción se muestran en la figura 1.4, donde se aprecian la fase isotrópica, nemática y cristalina para valores de la suavidad de  $s = 1.0$  y  $s = 0.5$ .

# Capítulo 2

## Objetivos

### 2.1. General

Estudiar y comprender la formación de defectos topológicos en nanogotas de cristal líquido con geometría esferoidal prolata y oblata utilizando simulación molecular por computadora.

### 2.2. Específicos

1.- Desarrollar un código de dinámica molecular para simular sistemas de partículas no-esféricas, con interacciones anisótropas, con la característica de ser sistemas cerrados y bajo la influencia de campos externos (confinamiento).

2.- Desarrollar un algoritmo para diseñar las geometrías esferoidales donde se confinarán los sistemas líquido-cristalinos.

3.- Crear nanogotas esferoidales controlando la razón de aspectos,  $\gamma$ , para estudiar la influencia de la geometría sobre los sistemas de cristales líquidos.

4.- Desarrollar un código para determinar las imágenes (texturas) de polarizadores cruzados utilizando la metodología de las matrices de Jones para comparar con resultados experimentales.

5.- Entender la influencia que tiene el anclaje planar y homeotrópico sobre las nanogotas esferoidales prolatas de cristal líquido.

6.- Entender la influencia que tiene el anclaje planar y homeotrópico sobre las nanogotas

esferoidales oblatas de cristal líquido.

# Capítulo 3

## Modelo

### 3.1. Parámetro de orden nemático

Para un CL, la fase isótropa se caracteriza por la aleatoriedad en las posiciones de los centros de masa de las partículas y sus orientaciones. En los CL termotrópicos la temperatura es un parámetro que juega un papel importante en la formación de mesofases. En la investigación de estos sistemas anisótropos, es necesario contar con un parámetro que caracterice la fase ordenada. A dicho parámetro se le ha denominado como *parámetro de orden*. A esta cantidad se le pide que cambie conforme las observables termodinámicas cambian. Por ejemplo, en la fase isótropa de un CL, el grado de ordenamiento del sistema es prácticamente nulo, por tanto, el parámetro de orden debería ser cero en este estado. En 1939, Tsvetkov [74] propuso el siguiente parámetro de orden,

$$S = \left\langle \frac{3}{2} \cos^2 \beta - \frac{1}{2} \right\rangle \quad (3.1)$$

donde  $\beta$  es el ángulo que se forma entre la dirección de las partículas y el vector director de la fase. En la ecuación 3.1 se puede apreciar que el parámetro  $S$  varía entre 0 y 1, de acuerdo con el ordenamiento del sistema, esto es, en la fase isótropa y la esméctica, respectivamente. Otro parámetro de orden que se puede utilizar para medir el ordenamiento orientacional de un sistema de partículas con orientación  $\hat{\mathbf{u}}_i$  (ver figura 3.1a), es el siguiente tensor de segundo rango,

$$Q_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_i \left( u_{\alpha}^{(i)} u_{\beta}^{(i)} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \right) \quad (3.2)$$

donde la suma se realiza sobre las  $N$  partículas de un volumen pequeño, pero macroscópico, situado en la posición  $\mathbf{r}$ . Los índices  $\alpha$  y  $\beta$  denotan las coordenadas cartesianas  $x$ ,  $y$  y  $z$ . Este parámetro de orden debe ser de traza nula y simétrico ( $Q_{\alpha\beta} = Q_{\beta\alpha}$ ) de tal manera que reduce las 9 componentes independientes en solo 5. También, debemos de pedirle que en la

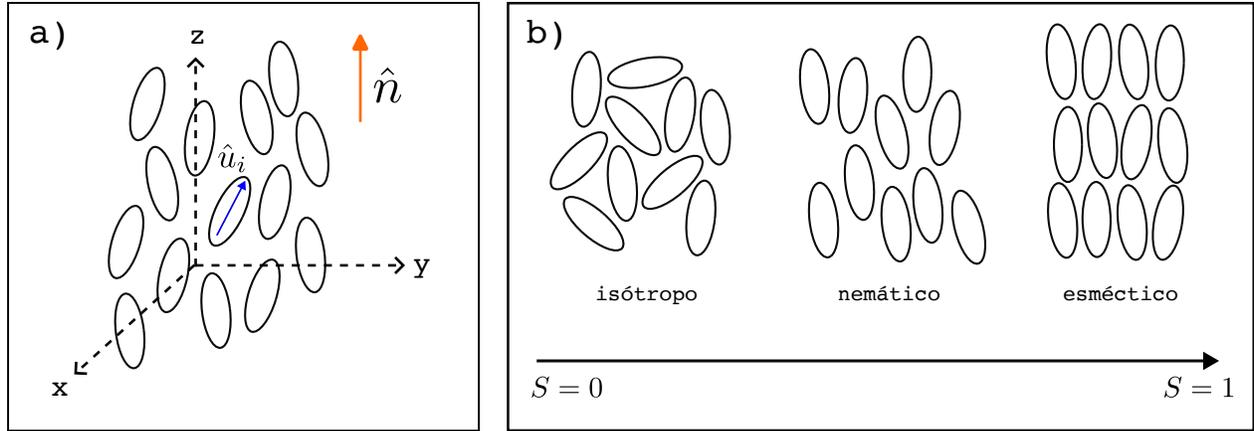


Figura 3.1: a) Representación de la orientación de los mesógenos en una mesofase y b) ordenamiento de las partículas de acuerdo al valor del parámetro de orden escalar,  $S$ .

fase isótropa sea cero,  $Q_{\alpha\beta}^{iso} = 0$ . Si las partículas se encuentran perfectamente alineadas con el eje  $z$ , el tensor de orden toma la siguiente forma,

$$Q = \begin{pmatrix} -1/3 & 0 & 0 \\ 0 & -1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 2/3 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

Este tensor posee tres valores propios reales y tres vectores propios ortogonales. Es posible encontrar sistemas de coordenadas cartesianas donde este tensor es diagonal; el vector propio con el valor propio cuyo valor absoluto sea el mayor, recibirá el nombre de *director* ( $\hat{n}$ ), donde el valor propio correspondiente será el *parámetro de orden escalar*,  $S$ . Para un sistema uniaxial, el tensor se puede escribir como sigue,

$$Q_{\alpha\beta} = S \left( n_{\alpha}n_{\beta} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} \right) \quad (3.4)$$

donde las  $n_{\alpha}$  son las componentes del vector director. Si repetimos el cálculo donde el CL está orientado en la dirección  $z$ , las tres componentes diferentes de cero del tensor son las siguientes,

$$Q_{zz} = \frac{2}{3}S, \quad Q_{xx} = Q_{yy} = -\frac{1}{3}S \quad (3.5)$$

en la fase isótropa,  $S = 0$ , mientras que en la fase nemática o colestérica,  $-1/2 < S < 1$ , y para una fase perfectamente alineada como la esmética A,  $S = 1$ . Una ejemplificación se muestra en la figura 3.1b).

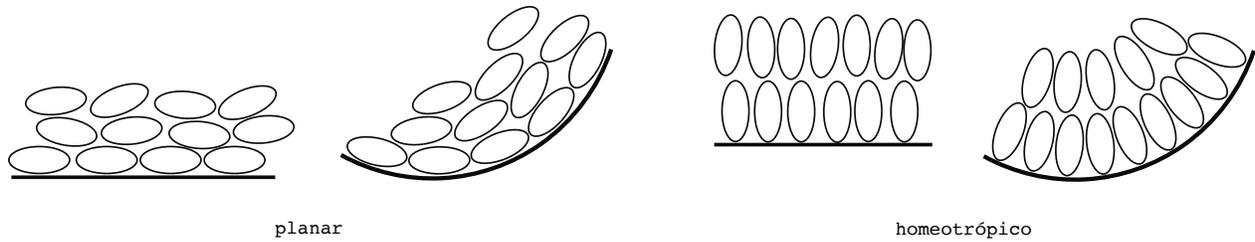


Figura 3.2: Representación esquemática del anclaje planar y homeotrópico en superficies con diferente curvatura.

### 3.2. Anclaje molecular

El anclaje molecular surge cuando las moléculas tienen la tendencia a orientarse en alguna dirección respecto a una superficie o sustrato (ver figura 3.2). Esta dirección,  $\hat{e}$  de la molécula, se le conoce como *eje fácil* de orientación [3]. Los tipos de anclaje que se pueden presentar son, anclaje *planar* y anclaje *homeotrópico*. El anclaje planar se da cuando la orientación de la partícula es tangente o paralela a la superficie, esto es, que el vector normal a la superficie y la dirección de la orientación de la molécula son ortogonales. Cuando la molécula se encuentra orientada en la misma dirección que la normal a la superficie, se dice que el anclaje es de tipo homeotrópico. La condición de anclaje determina el tipo de defectos que podrían llegar a formarse en un sistema de mesógenos (como los que se estudiaron en este trabajo) que se encuentran en presencia de paredes o superficies, por ejemplo debidas al confinamiento del sistema. Debido a la presencia de estas superficies, el nemático no puede estar orientado arbitrariamente si no que, el tipo de anclaje determina la dirección que puede tomar la fase nemática [32]. Este fenómeno fue descubierto por primera vez por Mauguin en 1913 [42]. En la siguiente sección el fenómeno de anclaje cobra sentido matemático en la definición del potencial de interacción entre mesógenos y partículas en una superficie.

### 3.3. Potencial de Gay-Berne

Cuando en las interacciones moleculares se añaden términos más realista, los diagramas de fase de la nueva familia de potenciales, se vuelven más complicados y se comportan cada vez más como sustancias reales. El potencial de Gay-Berne (GB) [23] es un modelo que se ha convertido en un referente para el estudio de fases de CL, estudiado por una gran comunidad de científicos al rededor del mundo. Escribiendo el potencial de GB como una generalización anisotrópica del potencial de Lennard-Jones (LJ-12-6), tenemos que

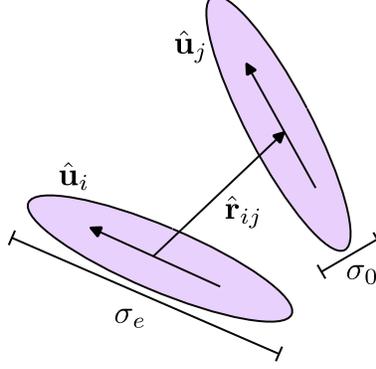


Figura 3.3: Representación esquemática de dos mesógenos de GB: sus vectores de orientación ( $\hat{\mathbf{u}}_i$ ,  $\hat{\mathbf{u}}_j$ ), la distancia relativa entre los centros de masa ( $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ ) y las dimensiones de la partícula, largo ( $\sigma_e$ ) y ancho ( $\sigma_0$ ).

$$u_{GB}(\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j) = 4\varepsilon(\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j) [\varrho_{ij}^{-12} - \varrho_{ij}^{-6}] \quad (3.6)$$

donde  $\hat{\mathbf{u}}_i$  se trata como un vector unitario a lo largo del eje principal de la  $i$ -th partícula (en este caso se hace referencia a las partículas formadoras de CL), la cantidad  $\varrho_{ij}$  es una distancia reescalada tipo Kihara [37], tal que,

$$\varrho_{ij} = \frac{1}{\sigma_0} [r_{ij} - \sigma(\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j) + \sigma_0] \quad (3.7)$$

donde  $\sigma(\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j)$  es un parámetro de forma y se define como,

$$\sigma(\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j) = \sigma_0 \left\{ 1 - \chi \left[ \frac{(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \hat{\mathbf{u}}_i)^2 + (\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \hat{\mathbf{u}}_j)^2 - 2\chi(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \hat{\mathbf{u}}_i)(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \hat{\mathbf{u}}_j)(\hat{\mathbf{u}}_i \cdot \hat{\mathbf{u}}_j)}{1 - \chi^2(\hat{\mathbf{u}}_i \cdot \hat{\mathbf{u}}_j)^2} \right] \right\}^{-1/2}, \quad (3.8)$$

este parámetro es heredado del trabajo original de Berne y Pechukas [8] que surgió como una aproximación al traslape de dos elipsoides gaussianos idénticos, donde  $\hat{\mathbf{u}}_i$  y  $\hat{\mathbf{u}}_j$  especificaban los ejes de simetría de las gaussianas y  $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$  la distancia entre sus centros [23].

La cantidad  $\chi = (\kappa^2 - 1)/(\kappa^2 + 1)$  caracteriza la no-esfericidad de las partículas, mientras que  $\kappa = \sigma_e/\sigma_0$  representa la razón largo( $\sigma_e$ )-ancho( $\sigma_0$ ) de la misma. El pozo de potencial depende, tanto del vector posición relativo entre pares de partículas,  $\hat{\mathbf{r}}_{ij}$ , así como de los vectores unitarios que definen las orientaciones de las mismas (ver la representación esquemática del la figura 3.3). Entonces, la intensidad de la interacción se escribe de la siguiente manera,

$$\varepsilon(\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j) = \varepsilon_0 [\varepsilon_1(\hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j)]^\nu [\varepsilon_2(\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j)]^\mu, \quad (3.9)$$

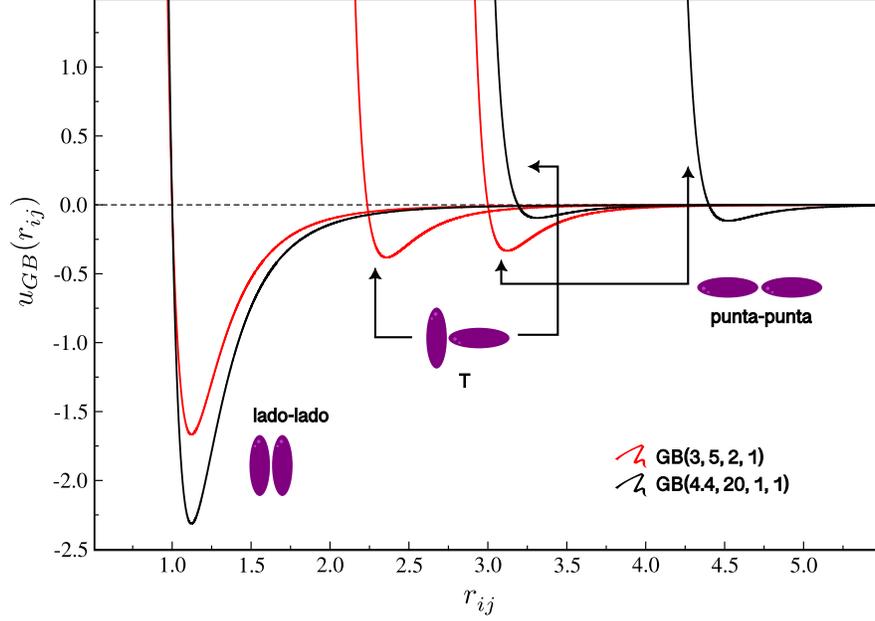


Figura 3.4: Representación gráfica del potencial GB para dos diferentes parametrizaciones, GB(3,5,2,1) y GB(4.4,20,1,1). Debido a la anisotropía del potencial, se muestran diferentes configuraciones orientacionales de dos partículas: lado-lado, T, punta-punta.

donde

$$\varepsilon_1(\hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j) = [1 - \chi^2 (\hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j)^2]^{-1/2}, \quad (3.10)$$

y

$$\varepsilon_2(\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j) = 1 - \chi' \left[ \frac{(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \hat{\mathbf{u}}_i)^2 + (\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \hat{\mathbf{u}}_j)^2 - 2\chi' (\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \hat{\mathbf{u}}_i) (\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \hat{\mathbf{u}}_j) (\hat{\mathbf{u}}_i \cdot \hat{\mathbf{u}}_j)}{1 - \chi'^2 (\hat{\mathbf{u}}_i \cdot \hat{\mathbf{u}}_j)^2} \right]. \quad (3.11)$$

En la última expresión,  $\mu$  y  $\nu$  son cantidades que carecen de dimensiones, además,  $\chi' = (\kappa'^{1/\mu} - 1) / (\kappa'^{1/\mu} + 1)$ , donde  $\kappa' = \epsilon_{ss}/\epsilon_{ee}$  representa la razón entre los mínimos de potencial correspondientes a las configuraciones orientacionales lado-lado ( $\epsilon_{ss}$ ) y punta-punta ( $\epsilon_{ee}$ ). El parámetro  $\varepsilon_0$  es el mínimo de potencial en la configuración cruzada, es decir, cuando  $(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \hat{\mathbf{u}}_i) = (\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \hat{\mathbf{u}}_j) = (\hat{\mathbf{u}}_i \cdot \hat{\mathbf{u}}_j) = 0$ . De las definiciones anteriores podemos entonces escribir la familia de potenciales GB bajo la siguiente parametrización: GB( $\kappa, \kappa', \mu, \nu$ ) (introducida por M. A. Bates y G. R. Luckhurst [5]). En la figura 3.4 se muestra el comportamiento del potencial de GB para dos parametrizaciones conocidas, GB(3,5,2,1) y GB(4.4,20,1,1). De manera adicional, en la figura 3.5, se muestran las curvas equipotenciales para la parametrización GB(3,5,2,1) con motivos ilustrativos.

La parametrización GB(3,5,2,1) ha sido ampliamente estudiada [2, 10, 9, 17, 16]. Uno

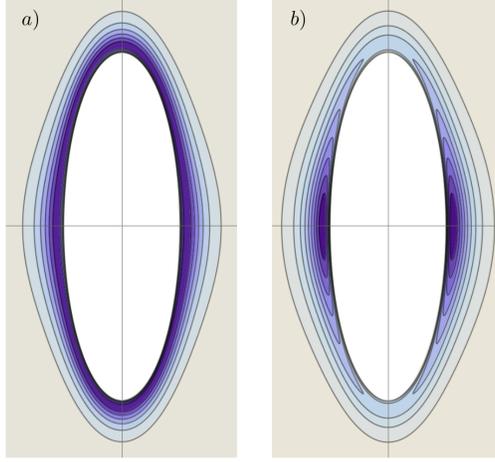


Figura 3.5: Curvas equipotenciales para la parametrización GB(3,5,2,1). En *a*)  $\hat{\mathbf{u}}_i \cdot \hat{\mathbf{u}}_j = 1$ , en *b*)  $\hat{\mathbf{u}}_i \cdot \hat{\mathbf{u}}_j = 0$ .

de los estudios reportados con más detalle fue realizado por de Miguel *et al* [16]. explorando mediante simulación por computadora diferentes puntos termodinámicos dando como resultado el diagrama de fases donde se reportan las fases isotrópica, nemática, esméctica B *inclinada*, además, las regiones de coexistencia como el líquido-vapor. Como se ha comentado en secciones previas, en este trabajo, además de involucrar a partículas tipo GB en las simulaciones, se adicionaron partículas esféricas al sistema que juegan el papel de frontera en el confinamiento. En la dinámica molecular existirán interacciones entre los mesógenos y entre los mesógenos y las esferas de la frontera. Por esta razón debemos escribir el potencial de GB para las interacciones mesógeno-esfera. Haciendo el límite apropiado de las ecuaciones 3.8 y 3.9 y asumiendo el caso donde la *j*-ésima partícula es un mesógeno y la *i*-ésima es una esfera, la expresión para el parámetro de forma y de energía, respectivamente, se pueden escribir de la siguiente manera[13, 4]:

$$\sigma(\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \hat{\mathbf{u}}_j) = \sigma_0 [1 - \chi(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \hat{\mathbf{u}}_j)^2]^{-1/2} \quad (3.12)$$

$$\varepsilon(\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \hat{\mathbf{u}}_j) = \varepsilon_{RS} [1 - \chi'_A(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \hat{\mathbf{u}}_j)^2]^\mu, \quad (3.13)$$

donde  $\varepsilon_{RS}$  [4] es una constante y la cantidad  $\chi'_A (= 1 - (\varepsilon_E/\varepsilon_S)^{1/\mu})$  depende de la razón  $\varepsilon_E/\varepsilon_S$  donde, a su vez,  $\varepsilon_S$  representa la energía asociada con el *anclaje* planar y  $\varepsilon_E$  la energía asociada al anclaje homeotrópico. Entonces, la cantidad  $\xi = \varepsilon_E/\varepsilon_S$  cuantifica la configuración dominante entre los mesógenos y las partículas en la superficie de la gota. En la figura 3.7 se muestran las curvas equipotenciales para la interacción mesógeno-esfera con la parametrización de GB(4.4,20,1,1) para diferentes valores del parámetro,  $\xi$  indicando los casos cuando

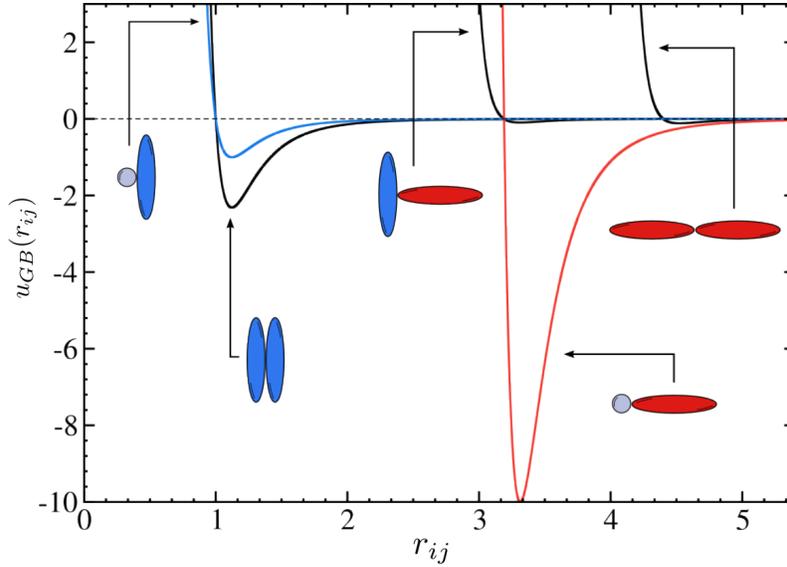


Figura 3.6: Representación gráfica del potencial GB para la parametrización (4.4, 20, 1, 1) que incluye la interacción mesógeno-esfera, especificando el tipo de anclaje.

se promueven el anclaje planar y homeotrópico. Una representación gráfica del potencial de GB con las interacciones entre mesógeno y esfera se muestra en la figura 3.6.

### 3.4. Matrices de Jones

Uno de los principales métodos que se utiliza para determinar las propiedades de *alineación* de un CL es la microscopía óptica. Una propiedad de los CL es que son birrefringentes, con el índice de refracción más alto orientado paralelo al vector director nemático. Supongamos que tenemos un fluido en la fase nemática y lo colocamos entre polarizadores cruzados, el fluido nemático inducirá un cambio o modificación en la fase de la luz incidente y, aparecerán regiones brillantes sobre un fondo oscuro. Cuando se tiene el caso en el que el campo director local se encuentra alineado paralelamente al polarizador, no se produce ningún cambio en la fase de la luz, de manera que al pasar por el polarizador cruzado, estas regiones de luz se vuelven oscuras [19, 25]. Es por esto que con esta técnica es posible *mapear* la estructura interna, de manera experimental, de una gota de CL nemático observando las zonas de luz y oscuridad al ser colocada entre polarizadores cruzados e ir girando la muestra.

A menudo resulta sencillo caracterizar la estructura interna de gotas *bipolares* y/o *radiales* por medio de este simple experimento. En gotas de CL nemático *pasivo*, los defectos topológicos estables aparecen cuando hay una frustración en la orientación, por ejemplo, en

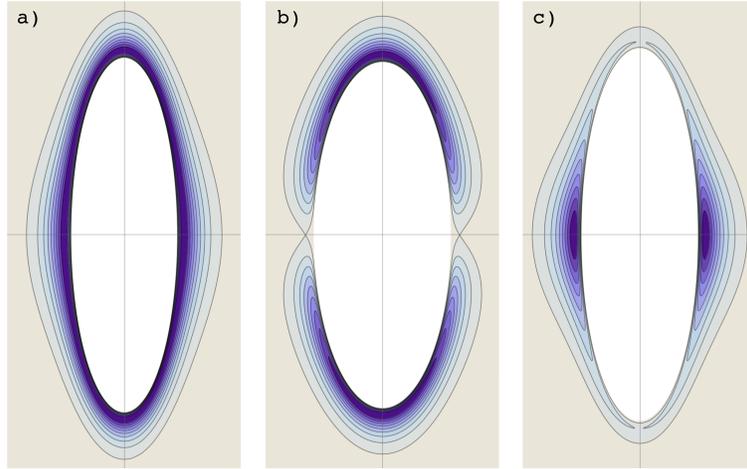


Figura 3.7: Curvas equipotenciales para la parametrización GB(4.4,20,1,1) cuando la interacción es mesógeno-esfera para diferentes valores del parámetro  $\xi$ : a)  $\xi = 1.0$ , b)  $\xi = 10.0$  (anclaje homeotrópico) y c)  $\xi = 0.2$  (anclaje planar).

el centro de la gota o en los polos de la misma. Una manera de controlar la ubicación de los defectos topológicos es controlando, a su vez, la geometría de la gota y las condiciones de anclaje entre las partículas y las paredes internas de la gota. Continuando con el ejemplo, si el anclaje se define como homeotrópico, esto es, las partículas se orientan perpendicularmente a la interfaz, se producirá una estructura *radial*, con un defecto en el centro de la gota. Por el contrario, si el anclaje se define planar, es decir, las partículas se orientan paralelamente a la interfaz, conducirá a una estructura *bipolar* con dos defectos topológicos ubicados en los polos. Lo antes descrito se puede observar en la figura 3.8 y en la sección 3.2.

En un experimento, se coloca una muestra de CL entre polarizadores cruzados para poder sondear la estructura interna de la fase líquido-cristalina. En la simulación molecular, existe un método capaz de calcular la imagen, resultado de polarizadores cruzados, como si de un experimento real se tratara. Esta metodología consiste en tomar una muestra de CL, realizar *cortes* o *rebanadas* muy delgadas en alguna dirección, de manera que esta coincida con la incidencia de la luz. Las rebanadas deben tener el grosor adecuado (suficientemente pequeño) para asumir que el director nemático permanece constante en esa capa. Como cada rebanada alberga una orientación diferente del CL nemático, podemos tratarla como un *slab* birrefringente. El efecto que tendrá cada director en cada rebanada es modificar la fase del vector que indica la polarización de la luz que ingresa a la misma. Con esto, se pretende dar a entender que, conforme se abre paso la luz incidente, los directores nemáticos locales van afectando la polarización de la luz a su paso por cada rebanada. Uno de los métodos más simples para realizar este cálculo, es el método de las matrices de Jones [1, 72, 19], las cuales

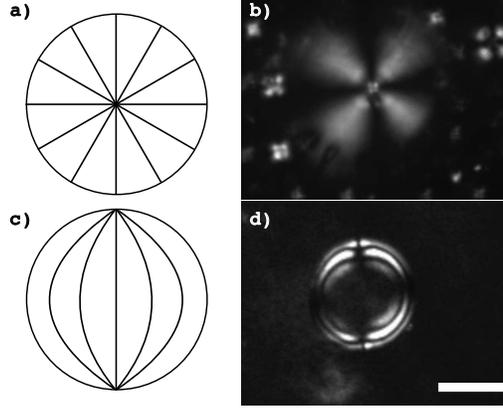


Figura 3.8: Configuraciones de una gota de cristal líquido nemático. En la parte superior se muestra una configuración radial: a) forma esquemática y b) imagen resultado del análisis por polarizadores cruzados. En la parte inferior se muestra una configuración bipolar: c) forma esquemática y d) imagen resultado del análisis de polarizadores cruzados. Las imágenes b) y d) fueron tomadas de la referencia [44].

son matrices de  $2 \times 2$ . Para calcular la transmisión de luz a través de una gota de CL vista entre polarizadores cruzados, se puede utilizar la siguiente expresión [19],

$$\begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix}_{salida} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{J}_N \mathbf{J}_{N-1} \cdots \mathbf{J}_2 \mathbf{J}_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \end{bmatrix}_{incidente} \quad (3.14)$$

la intensidad de la luz se puede calcular como,  $I = E_x E_x^* + E_y E_y^*$ . Cada una de las N matrices de Jones (donde N es el número de rebanadas) se define de la siguiente manera [19],

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \cos^2 \gamma \exp(i\phi_e) + \sin^2 \gamma \exp(i\phi_o) & \cos \gamma \sin \gamma [\exp(i\phi_e) - \exp(i\phi_o)] \\ \cos \gamma \sin \gamma [\exp(i\phi_e) - \exp(i\phi_o)] & \sin^2 \gamma \exp(i\phi_e) + \cos^2 \gamma \exp(i\phi_o) \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

$$\phi_e = \frac{2\pi}{\lambda} n_e(\beta) \Delta z \quad (3.16)$$

$$\phi_o = \frac{2\pi}{\lambda} n_o \Delta z \quad (3.17)$$

$$n_e^2(\beta) = \frac{n_o n_e}{\sqrt{n_o^2 \sin^2 \beta + n_e^2 \cos^2 \beta}} \quad (3.18)$$

aquí  $\gamma$  no tiene ninguna relación con el factor geométrico para la construcción de las gotas esféricas, la variable  $\lambda$  es la longitud de onda de la luz incidente,  $n_o$  y  $n_e$  son los índices de refracción en el eje *ordinario* (perpendicular) y *extraordinario* (paralelo), respectivamente, y  $\Delta z$  es el grosor de la rebanada de la muestra (se ha elegido en la notación la dirección  $z$  como eje de incidencia). Los ángulos  $\gamma$ ,  $\beta$ ,  $\phi$  se muestran de manera gráfica en la figura 3.9.

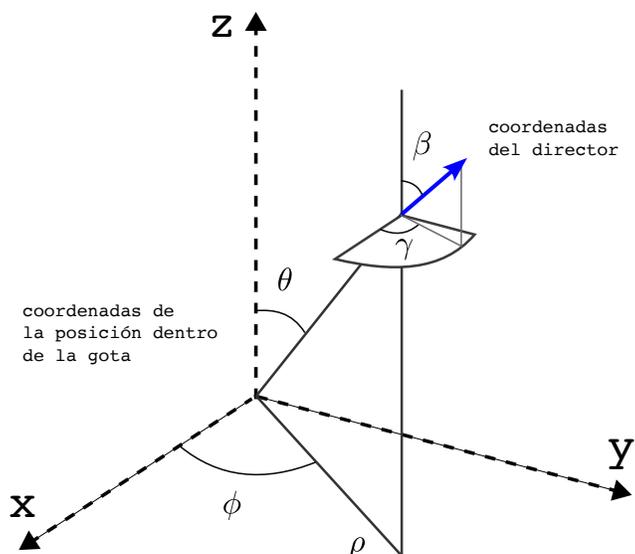


Figura 3.9: Coordenadas del sistema de referencia donde se indica la posición y dirección del director nemático local en un marco de referencia dentro de la gota. Figura tomada de [19].

Por otra parte, la birrefringencia no es una cantidad constante, para mesógenos como el para-terfenilo (considerado en este trabajo) o el 4-ciano-4'-pentilbifenilo (5CB) por ejemplo, los índices de refracción ordinario y extraordinario, resultan ser dependientes de la longitud de onda de la luz incidente ( $\lambda$ ) y el parámetro de orden ( $S$ ), el cual, a su vez, está fuertemente relacionado con la temperatura. Si consideramos el caso de gotas de CL, el campo nemático se distorsiona en los sitios donde aparecen defectos topológicos, en estos sitios de defecto el parámetro de orden  $S$  suele ser pequeño [12].

# Capítulo 4

## Metodología

Para estudiar el comportamiento del cristal líquido nemático confinado en una gota esferoidal y, cómo son los defectos topológicos que surgen debido a estas condiciones, realizamos simulaciones de dinámica molecular de partículas no-esféricas, específicamente se trata de partículas elipsoidales prolatas, gobernadas por la interacción del potencial de Gay-Berne descrito en la sección 3.3. El confinamiento, conocido en este contexto como *gota*, es una estructura conformada por partículas esféricas de diámetro  $\sigma_0$  (aproximadamente 1 nm para el para-terfenilo [40, 48]) colocadas sobre la superficie de un esferoide. Estas partículas se mantienen estáticas y no interactúan entre sí, solamente interactúan con las partículas en el interior de la gota jugando el papel de barrera que delimita el volumen del sistema. Como ya se mencionó, la gota es una estructura esferoidal, es decir, se trata de un elipsoide de revolución, el cual puede ser oblato o prolato. A continuación se define la metodología para la construcción de las gotas.

Un esferoide es un elipsoide que tiene dos de sus ejes de la misma longitud ( $a$  y  $b$ ), mientras que el tercer eje ( $c$ ) es distinto de estos dos (esto implica que  $b = a$ ). Cuando el eje  $c$  es menor que  $a$  y  $b$  se obtiene un esferoide oblato, mientras que cuando  $c$  es mayor que  $a$  y  $b$  se obtiene un esferoide prolato. Sabiendo esto último se puede hacer variar el valor del eje  $c$  para construir una familia de esferoides que vayan desde oblatos a prolatos, pasando por la esfera, es decir,  $c = a = b$ . Por convención, el esferoide está orientado de modo que su eje de simetría rotacional esté a lo largo del eje  $z$ , que coincide con su eje  $c$ . Una representación se muestra en la fig. 4.1. Para obtener esferoides prolatos u oblatos en este trabajo, se introduce el parámetro  $\gamma$  tal que,  $c = \gamma a$ , con  $\gamma > 0$ . Podemos identificar ciertos casos importantes: si  $\gamma = 1$  tenemos una esfera de radio  $R = a$ , si  $\gamma > 1$  tenemos un esferoide prolato y si  $1 > \gamma > 0$  entonces tenemos un esferoide oblato. Una representación de lo antes mencionado se puede visualizar en la fig. 4.2.

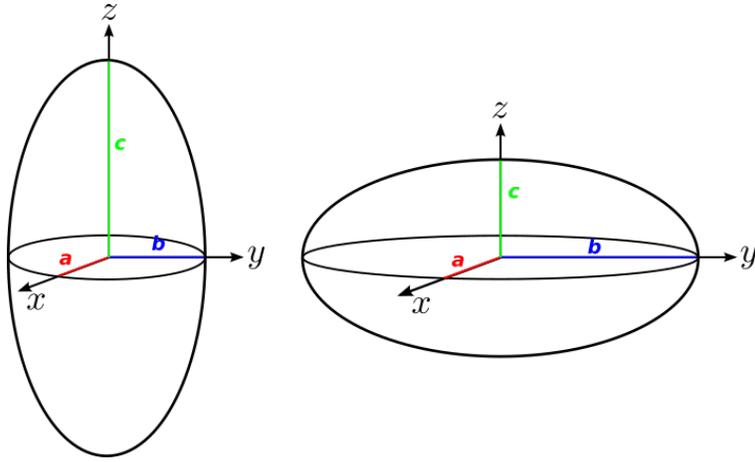


Figura 4.1: De izquierda a derecha, se muestran representaciones esquemáticas de un esferoide prolato y un esferoide oblato, respectivamente ( $b = a$ ). Se indica la convención de orientar el eje de simetría rotacional a lo largo del eje  $z$ .

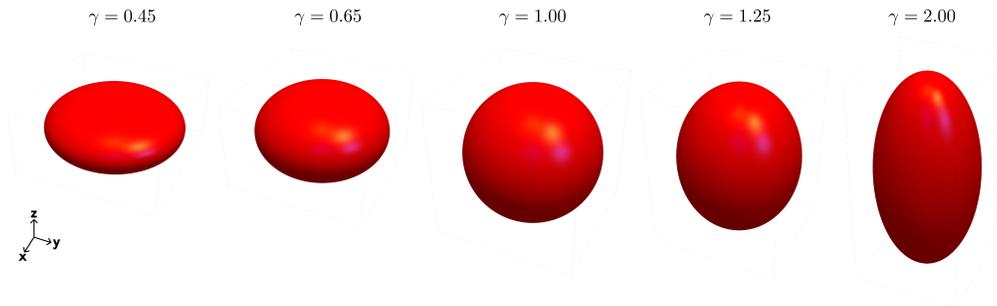


Figura 4.2: Representación de una serie de esferoides (incluida la esfera) como función del valor  $\gamma$ .

## 4.1. Construcción de la superficie esferoidal

A continuación se describe un algoritmo para la construcción de la superficie de las gotas esferoidales, necesarias para el confinamiento de los mesógenos de GB. Primero partimos de la idea de que un esferoide se puede construir no solo de una elipse en revolución, sino también, de una serie de *anillos* que pueden verse como el resultado de hacer cortes transversales al esferoide, donde el vector normal al plano de estos está orientado en la misma dirección del eje de simetría rotacional. Estos anillos deberán tener un radio adecuado según la posición en la que se encuentren (ver fig. 4.3.c). Los anillos sirven como guía para colocar esferas de diámetro igual a  $\sigma_0$  de manera que el arreglo que presenten en la superficie sea una red *triangular* (o hexagonal), como se aprecia en la fig. 4.3a. El valor del radio de cada anillo se puede calcular utilizando la ecuación de una elipse, que en coordenadas cartesianas con centro en el origen, se escribe como,

$$\frac{z^2}{c^2} + \frac{y^2}{a^2} = 1 \quad (4.1)$$

donde  $c$  y  $a$  son los semiejes mayor y menor, respectivamente, positivos definidos, es decir,  $a, c > 0$ . Según el marco de referencia de la figura 4.3a, el radio de los anillos corresponde con la coordenada  $y$  de la posición de las partículas, la cual se escribe como sigue,

$$y = a\sqrt{1 - \frac{z^2}{c^2}}. \quad (4.2)$$

En las figuras 4.3a-b se ejemplifica la disposición de las partículas en la superficie de la gota, donde  $\Delta s$  es la separación entre anillos contiguos; de aquí se puede ver, utilizando el teorema de Pitágoras, que  $\Delta s = \sqrt{3}\sigma_0/2$ . Ahora bien, la coordenada  $z$  de estas partículas (la cual es también la posición en el eje  $z$  de los planos de los anillos) se determina mediante la siguiente función,

$$f(z) = (z - z_0)^2 - \Delta s^2 + \left( a\sqrt{1 - \frac{z^2}{c^2}} - y_0 \right), \quad (4.3)$$

donde  $(z_0, y_0)$  son las coordenadas del punto que forma la intersección de un anillo contiguo (previamente ya formado) con la elipse que se considera como la superficie de la gota. Se ha optado utilizar el método de Newton-Raphson para resolver numéricamente la ecuación 4.3 para la variable  $z$ , el cuál resulta bastante efectivo en este tratamiento. Una vez que se tienen las coordenadas  $(z, y)$  se forma el siguiente anillo y así sucesivamente hasta completar la mitad de la superficie esferoidal. La otra mitad se obtiene simplemente haciendo una reflexión respecto al plano  $xy$ .

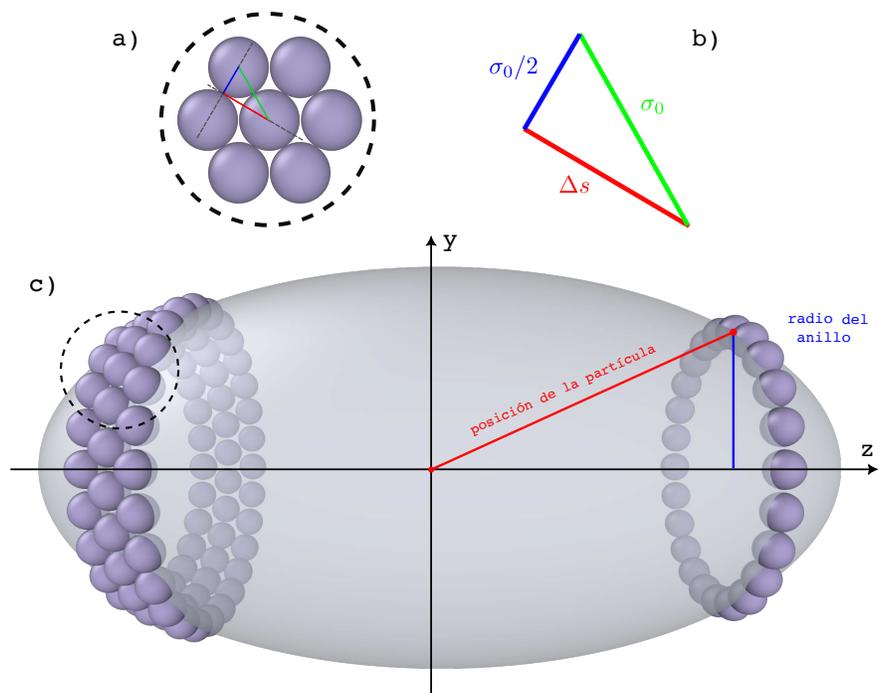


Figura 4.3: Representación de los pasos y consideraciones para la formación de la superficie esferoidal. En c) se tiene una gota prolata con un anillo formado donde se indica la posición de las partículas en el anillo y el radio de este último. En a) se muestra una ampliación de la sección encerrada con líneas punteadas del inciso c). Esta sección exhibe un arreglo hexagonal. Finalmente, en b) se observa una ampliación del triángulo que se forma en a) que indica la interpretación geométrica de la cantidad  $\Delta s$ .

## 4.2. Código de dinámica molecular y su verificación

Cumpliendo con uno de los objetivos marcados en este trabajo, el cuál se refiere a la implementación de un código de DM para simular sistemas de partículas no- esféricas, con interacciones anisótropas, se desarrolló en un código escrito en ForTran con algoritmos donde se implementan las librerías de MPI (Message Passing Interface) [24, 53] para su optimización en paralelo. Se utilizó el algoritmo integrador de VV y el termostato y barostato de NH para las simulaciones en los ensembles NVT y NPT, respectivamente. Para la comprobación del código, se simularon algunos sistemas reportados previamente para la parametrización GB(4.4,20,1,1) [15] y para el GB(3,5,2,1) [16]. En esta sección se muestran los resultados de simulaciones de DM realizadas en el ensamble NpT (isobárico-isotérmico) para un total de  $N = 1372$  partículas interactuando bajo el potencial y parametrización de GB(4.4,20,1,1). Se utilizó un radio de corte  $r_c = 5.5\sigma_0$  (igual que en el trabajo original de Miguel [15]) y un radio de lista, para el algoritmo de lista de vecinos, de  $r_l = r_c + 1$ .

Las simulaciones se iniciaron a la temperatura de  $T = 1.4$  para asegurar la fase isotropa. Después, se fue disminuyendo la temperatura del sistema utilizando la misma información (posiciones y velocidades) del sistema anterior, así, hasta llegar a  $T = 0.7$ . Las simulaciones se realizaron a presión constante,  $P = 1.0$ , y los resultados se muestran en la figura 4.4 donde se reporta: *a*) el valor de la densidad como función de la temperatura y *b*) el parámetro de orden nemático escalar,  $S$ , como función de la temperatura. Los símbolos triangulares son resultados de este trabajo y concuerdan muy bien con los reportados por Miguel *et al.* [15].

Para el sistema con la parametrización GB(3,5,2,1), se simularon en el ensamble canónico NVT, un total de  $N = 500$  partículas a temperatura constante  $T = 0.95$ , para diferentes valores de la densidad,  $\rho = 0.29, 0.33, 0.35, 0.36$  y  $0.37$ . Cada simulación se realizó de manera independiente a partir de una configuración inicial aleatoria. La cantidad termodinámica que se sometió a comparación fue la presión. Estos resultados se muestran en la figura 4.6 teniendo buena concordancia con los resultados publicados en [16].

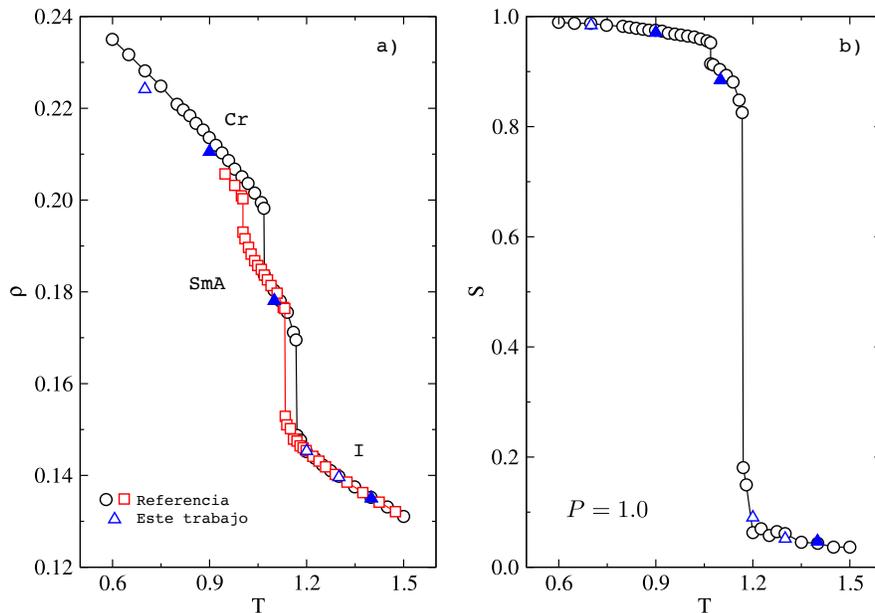


Figura 4.4: Comparación de resultados de simulación para un sistema de  $GB(4.4, 20, 1, 1)$  reportados por de Miguel *et al.* [15] y calculados en este trabajo con motivos de comparación y verificación del código de dinámica molecular. *a)* La densidad como función de la temperatura; los círculos son resultado de ir incrementando la temperatura, los cuadrados, de ir disminuyendo la temperatura [15]. *b)* El parámetro de orden nemático escalar,  $S$  como función de la temperatura reportada por [15]. En ambos, *a)* y *b)*, los triángulos son resultados de este trabajo y se simularon en el ensamble NpT disminuyendo la temperatura del sistema. Las imágenes instantáneas que corresponden a los símbolos llenos se muestran más adelante. Las barras de error, de los puntos de simulación calculados en este trabajo, son menores al tamaño del símbolo.

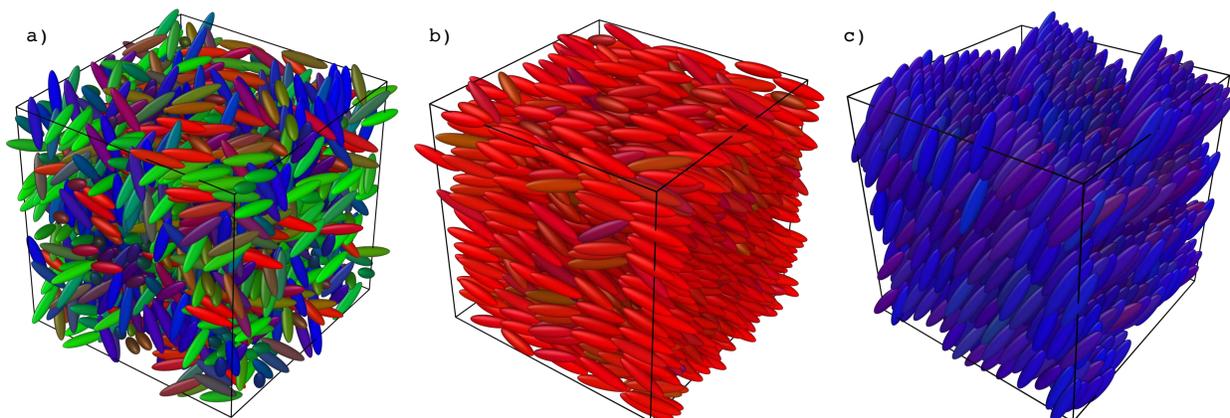


Figura 4.5: En esta figura se muestran imágenes instantáneas de la simulación del sistema  $GB(4.4, 20, 1, 1)$  correspondientes con los puntos señalados con símbolos llenos en la figura 4.4. *a)* Isótropa (I),  $T = 1.3$ , *b)* Esméctica-A (SmA),  $T = 1.1$  y *c)* Cristal (Cr),  $T = 0.9$ .

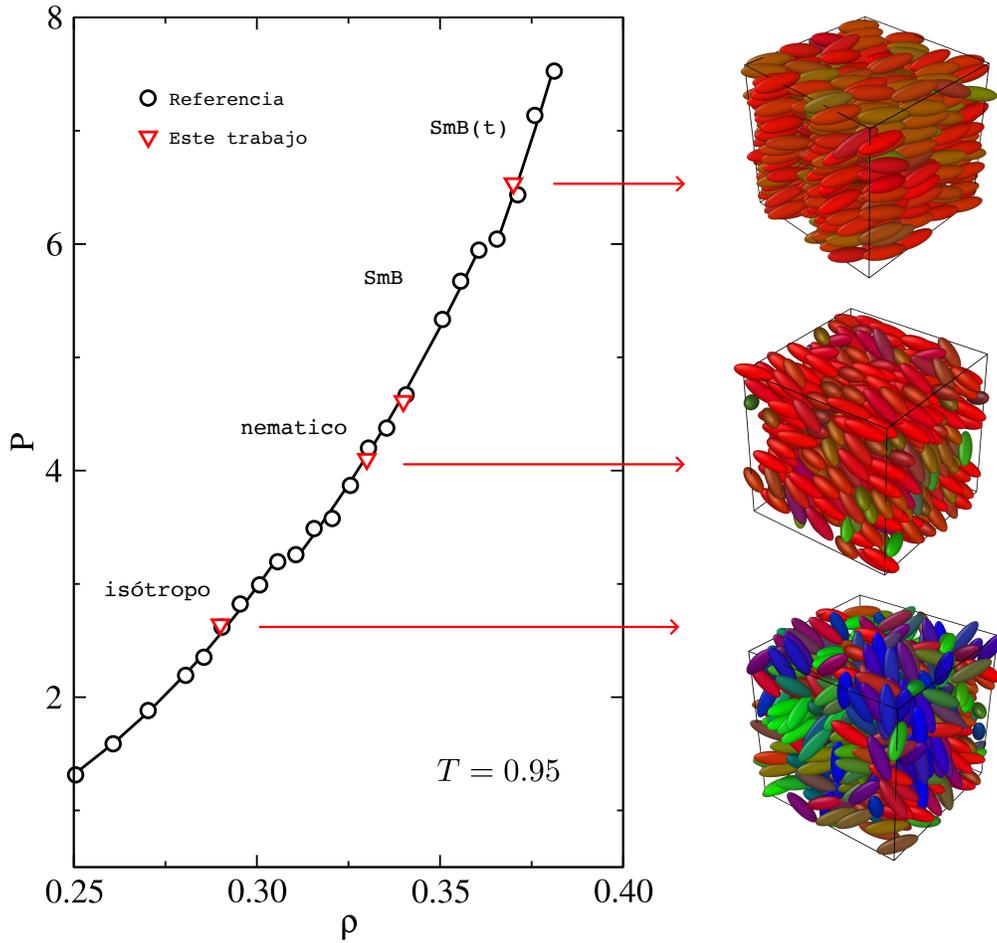


Figura 4.6: En esta figura se hace una comparación de los resultados calculados por de Miguel *et al* [16] y cálculos realizados en este trabajo para verificar nuestro código de dinámica molecular. Se puede observar una buena concordancia entre ambos. Del lado izquierdo se muestra la presión como función de la densidad del sistema y del lado derechos aparecen imágenes instantáneas del sistema correspondiente; de arriba a abajo: esméctico-B, nemático e isotropo. Las barras de error, de los puntos de simulación calculados en este trabajo, son menores al tamaño del símbolo.

### 4.3. Detalles de simulación: Gotas esféricas

En esta sección se describen los detalles de las simulaciones realizadas en este trabajo. Los sistemas simulados fueron un conjunto de partículas elipsoidales prolatas que interactúan por medio del potencial de GB (ver sección 3.3). Dada la notación para especificar los parámetros de GB,  $GB(\kappa, \kappa', \mu, \nu)$ , la parametrización utilizada para nuestros sistemas fue  $GB(4.4, 20, 1, 1)$  [40] ( $\kappa = 4.4, \kappa' = 20.0, \mu = \nu = 1.0$ ) correspondiente con el para-terfenilo. El para-terfenilo tiene la típica estructura molecular de muchos mesógenos y ha sido estudiado en simulaciones de dinámica molecular empleando el potencial de GB bajo la parametrización antes mencionada, exhibiendo las fases isotrópica, nemática, esméctica A y B en sistemas moleculares sin confinamiento [15]. Se sabe que los para-terfenilos que portan en su anillo central dos átomos de flúor exhiben las fases nemática, esméctica A y C [75]. Este estudio permite que el modelo propuesto por Luckhurst *et al.* [40] sea el adecuado para modelar a los mesógenos estudiados en este trabajo.

Las cantidades físicas que a continuación aparecerán se encuentran en unidades reducidas (ver apéndice C). Las partículas formadoras de CL se colocaron dentro de una gota esférica conformada por esferas en la superficie manteniendo una densidad de mesógenos de  $\rho = 0.206$  (a esta densidad de partículas se ha observado la fase nemática en condiciones de confinamiento muy similares [48]), que corresponde con  $0.70 \text{ g/cm}^3$  [40, 48]. Inicialmente se colocan las partículas en una configuración aleatoria en las posiciones de sus centros de masa, además se le asignan velocidades angulares y lineales al azar. Se coloca el sistema en un baño térmico que se controla con el termostato de NH-NVT. Las ecuaciones de movimiento se calculan utilizando el algoritmo de VV para dinámicas orientacionales con pasos de tiempo  $\delta t = 0.0012$  (aproximadamente  $0.12 \text{ ns}$ ). El radio de corte para truncar la interacción que se utilizó fue  $r_c = \kappa + 1$  y el radio de corte para la construcción de la lista de vecinos para evaluar las interacciones fue  $r_l = r_c + 1$ .

El estudio de estos sistemas se organizó de la siguiente manera: separar el tipo de geometría, es decir, si se trata de una gota esférica oblata o prolata, haciendo uso del parámetro  $\gamma$ , después, para cada tipo de geometría se analizaron ambos tipos de fuerzas de anclaje, planar y homeotrópico. Las dimensiones de los esferoides generados (tamaño de los semiejes) se pueden encontrar en la tabla 8.4 del apéndice D. Esto se hizo para diferentes valores de la temperatura, haciendo un barrido desde temperaturas altas hasta llegar a valores pequeños. El rango de temperaturas que se consideró en todos los sistemas fue  $2.0 \leq T \leq 16.0$  en decrementos de  $\Delta T = 2.0$ . El costo computacional de estos sistemas es elevado, de modo que se necesitaron  $10 \times 10^6$  pasos de tiempo  $\delta t$  para lograr el equilibrio del sistema y otros

$10 \times 10^6$  pasos para el cálculo de propiedades físicas de interés. Se monitoreó la energía interna, la temperatura y el parámetro de orden nemático cada 1000 pasos de tiempo. En el apéndice D se incluyen representaciones gráficas de la energía potencial por partícula (de los mesógenos de GB) para algunos pasos de tiempo de simulación de la segunda ronda de simulaciones previamente descrita. En las figuras 8.1 8.2 se muestra que la energía potencial permanece fluctuando alrededor de un valor estacionario lo cual podría ser indicativo de que el sistema relajo correctamente. El cálculo del parámetro de orden se realizó según la metodología descrita en la sección 3.1 para mesógenos uniaxiales cada 100 mil pasos de tiempo en la simulación. El número de partículas que componen cada sistema simulado es especificado en la sección de Resultados. Finalmente, el protocolo seguido para el enfriamiento de los sistemas en la simulación fue el siguiente: Se inician las simulaciones en la temperatura más alta  $T = 16.0$ ; una vez alcanzado el equilibrio y haber calculado las propiedades de interés, se procede a cederle las características del estado termodinámico (posiciones y velocidades de todas las partículas) a la temperatura siguiente,  $T = 14.0$ , y así sucesivamente hasta llegar a la temperatura de  $T = 2.0$ .

Para el cálculo de las texturas simuladas de polarizadores cruzados se tomaron en cuenta algunas consideraciones. Dado que, estimar los valores de los índices de refracción ordinario y extraordinario del para-terfenilo modelado con mesógenos de GB para diferentes valores del parámetro de orden y temperaturas está fuera de los propósitos de este trabajo, se eligieron valores para estos índices de refracción con propósitos ilustrativos y así poder hacer comparaciones cualitativas con resultados experimentales. Los valores implementados para este cálculo se encuentran en el apéndice D.

En la siguiente sección se presentan los resultados de dichas simulaciones y se analizan los defectos topológicos que surgen debido a la geometría y las condiciones de anclaje impuestas al sistema.

# Capítulo 5

## Resultados

En esta sección se presentan y discuten los resultados de las simulaciones de DM para mesógenos de GB bajo la parametrización (4.4, 20, 1, 1) confinados en gotas esferoidales. El orden de la presentación de los resultados se consideró de la siguiente manera: se muestran las gotas de acuerdo al tipo de anclaje dominante en la superficie, empezando por el anclaje planar y seguido del anclaje homeotrópico. Después, en una subcategoría, se encuentra el tipo de geometría, empezando por las gotas esferoidales prolatas y después las oblatas. Cada una de estas geometrías queda determinada por el parámetro  $\gamma$ , definido previamente en la sección 4. En cada subsección, se presentan diferentes tipos de figuras que clarifican la discusión y ayudan al análisis de los resultados. Finalmente, a modo de resumen, se presentan las diferentes configuraciones de defectos encontradas en las simulaciones, donde además se comparan los patrones (o también conocidos en la literatura como *texturas*) resultado de la incidencia de luz entre polarizadores cruzados de referencias experimentales con los calculados en este trabajo por el método de Jones (ver sección 3.4). Esto último, se presenta en las secciones: configuración bipolar 5.3 y radial 5.4. Para una mejor comunicación de los resultados, a continuación se muestran en la figura 5.1, dos diagramas morfológicos (en la representación Temperatura vs  $\gamma$ ) que resumen las diferentes configuraciones encontradas, para los dos tipos de anclaje que se estudiaron en este trabajo.

### 5.1. Anclaje planar

#### 5.1.1. Gota esferoidal prolata

La gota esferoidal que se estudió y que resulta ser más cercana a la esfera es la que corresponde con el parámetro  $\gamma = 1.25$ . El número de partículas en la superficie de la gota ( $N_g$ ) fue  $N_g = 11765$ , mientras que en el interior, el número de mesógenos ( $N_{GB}$ ) fue  $N_{GB} = 20186$ .

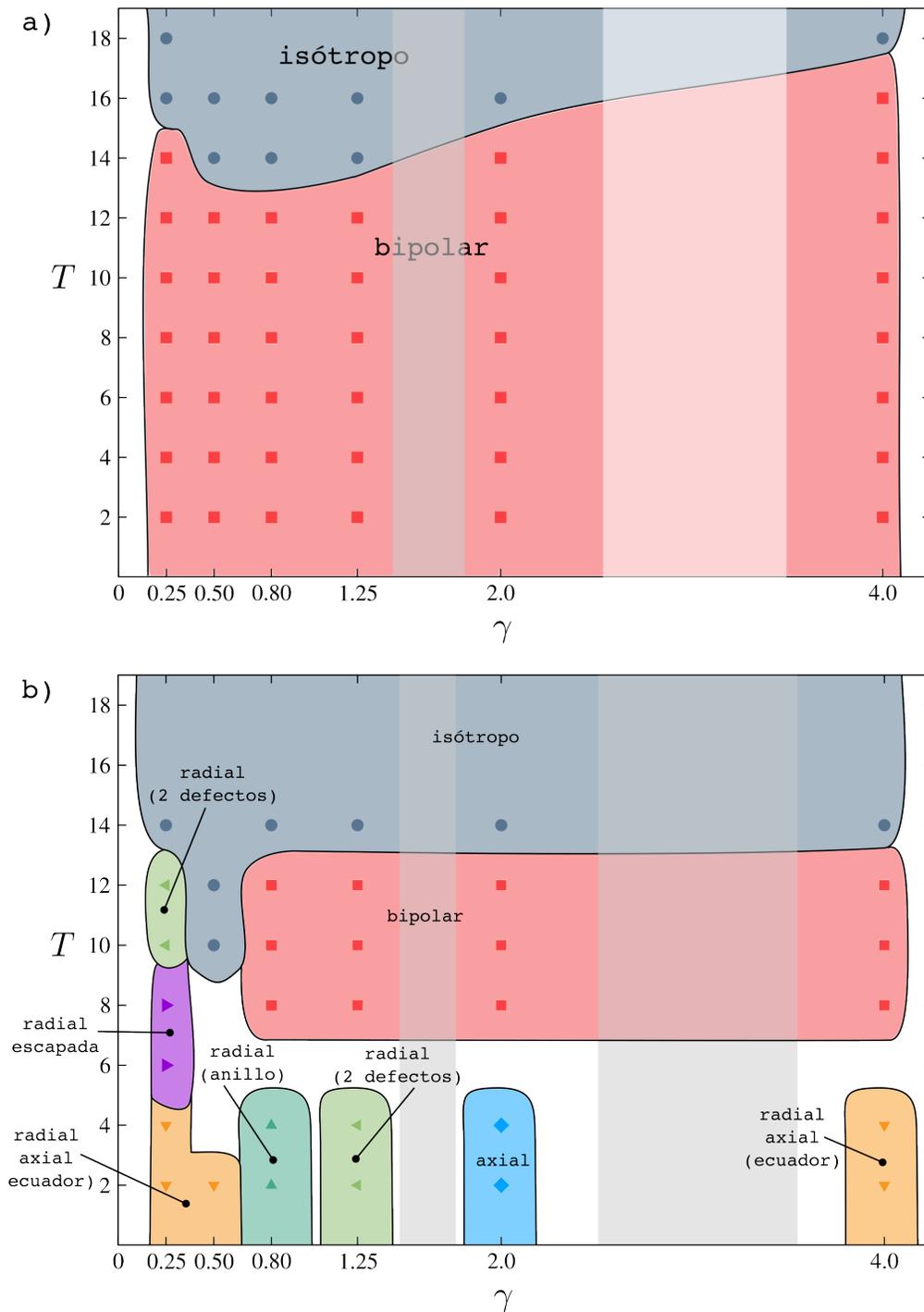


Figura 5.1: Diagramas morfológicos de las configuraciones encontradas para los dos tipos de anclaje estudiados: a) anclaje planar y b) anclaje homeotrópico. La franja con transparencia indica una región no explorada.

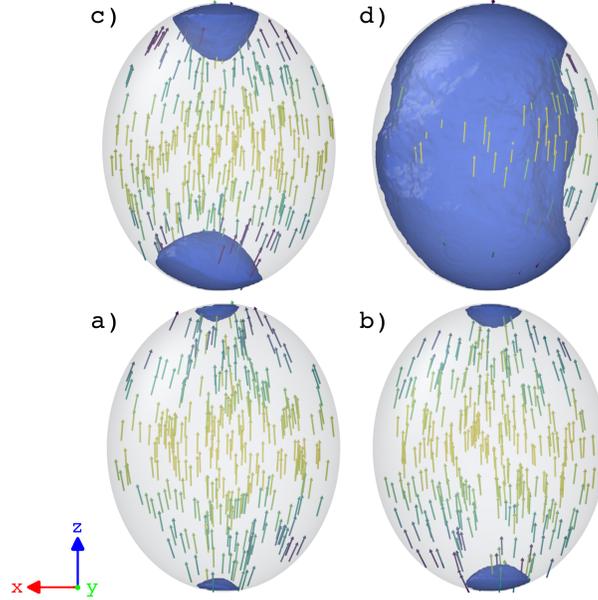


Figura 5.2: Representación de la gota esferoidal prolata con  $\gamma = 1.25$  para un anclaje planar en su superficie. Se pueden visualizar en color azul sólido los defectos topológicos en la fase nemática y los sitios con un valor del parámetro de orden pequeño ( $S < 0.27$ ), además de vectores representativos de la orientación que presenta el campo nemático dentro de la gota. La temperatura corresponde con: a)  $T = 2.0$ , b)  $T = 6.0$ , c)  $T = 10.0$  y d)  $T = 16.0$ .

En la figura 5.2 se muestra el proceso de formación de los defectos topológicos para la gota esferoidal prolata con anclaje planar en su superficie. Los defectos en el nemático se pueden representar eligiendo un valor del parámetro de orden nemático  $S$  que sea relativamente pequeño. Para este sistema se consideró como defecto aquellas regiones locales (ver sección 3.1) con valores de  $S < 0.27$  representadas en color azul en la fig. 5.2. Esta formación se presenta con una dependencia en la temperatura tal y como se señala. También es posible representar una porción del total de vectores propios y visualizar el campo nemático dentro de la gota. En la fig. 5.2.d se aprecia en su mayoría la fase isotrópica, cubriendo prácticamente el volumen de toda la gota. Para temperaturas más bajas, (figs. 5.2c-a) se forman dos defectos en las *puntas* (polos) de la gota; esta configuración se conoce como *bipolar*. La disminución de la temperatura tiene el mismo efecto sobre el tamaño de los defectos, esto es, se reducen de tamaño también, mientras que el campo nemático se dirige de un defecto a otro, o bien, de un polo a otro.

Para el esferoide con  $\gamma = 2.0$  con anclaje planar en la superficie se muestran los resultados de la formación de defectos en la figura 5.3. Se puede visualizar el proceso de formación de una estructura bipolar, donde los defectos se han ido hacia las puntas del prolato. Al igual que para  $\gamma = 1.25$ , los vectores propios del campo nemático se dirigen de un polo a otro,

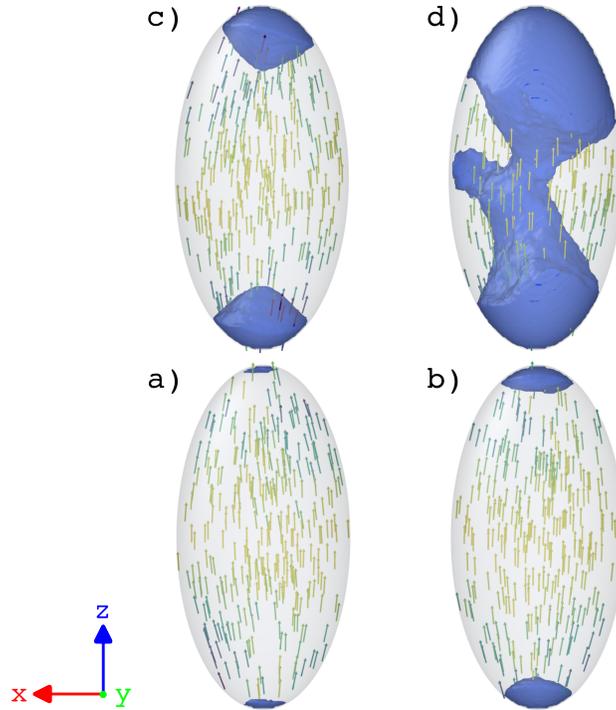


Figura 5.3: Representación de la gota esferoidal prolata con  $\gamma = 2.0$  para un anclaje planar en su superficie. Se pueden visualizar los defectos topológicos en la fase nemática y los sitios con un valor del parámetro de orden pequeño ( $S < 0.36$ ), además de vectores representativos de la orientación que presenta el campo nemático dentro de la gota. La temperatura corresponde con: a)  $T = 2.0$ , b)  $T = 6.0$ , c)  $T = 10.0$  y d)  $T = 14.0$ .

exhibiendo la dirección de la fase nemática. En la fig. 5.3d, que corresponde con  $T = 14.0$ , se observa que la transición isotropa-nemática del CL se da en la región central del esferoide donde existe mayor volumen disponible. El número de partículas esféricas en la superficie fue de  $N_g = 12519$ , mientras que las partículas en el interior fueron  $N_{GB} = 20186$ . El valor del parámetro de orden nemático que se utilizó para representar los defectos en la figura 5.3 fue  $S < 0.36$ .

Finalmente, para el esferoide con  $\gamma = 4.0$ , se simularon  $N_g = 15016$  partículas esféricas en la superficie y  $N_{GB} = 20129$  en el interior. Los resultados para los defectos topológicos en el nemático se muestran en la figura 5.4. En este sistema aparecen dos defectos topológicos en el nemático correspondiente con una configuración bipolar. En las figs. 5.4c-d predomina la fase isotropa ocupando casi la totalidad del volumen de la gota, mientras que en las figs. 5.4a-b la configuración bipolar toma el dominio en la gota. Es evidente que el tamaño de los defectos (para un mismo valor del parámetro de orden nemático,  $S < 0.48$ ) queda determinado por la disminución de la temperatura. Se puede remarcar el hecho mostrado en esta serie de

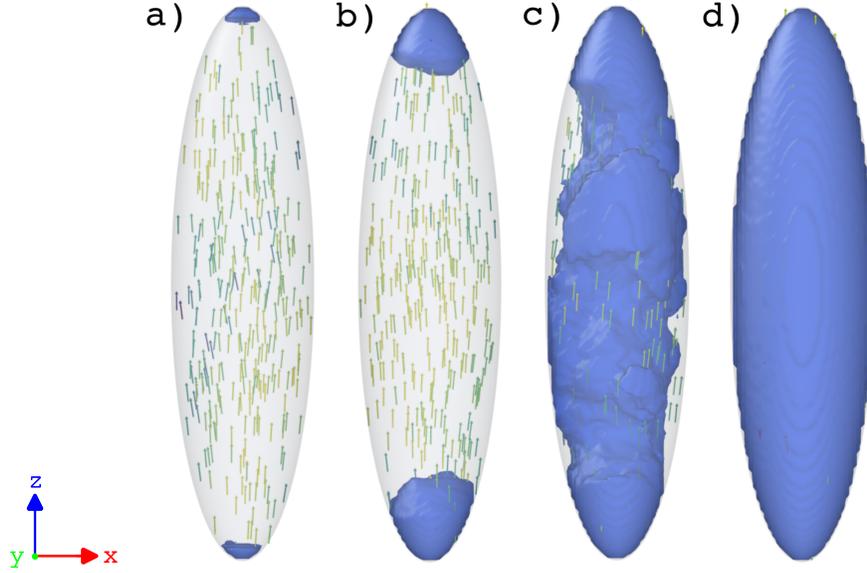


Figura 5.4: Representación de la gota esferoidal prolata con  $\gamma = 4.0$  para un anclaje planar en su superficie. Se pueden visualizar en los defectos topológicos en la fase nemática y los sitios con un valor del parámetro de orden pequeño ( $S < 0.48$ ), además de vectores representativos de la orientación que presenta el campo nemático dentro de la gota. La temperatura corresponde con: a)  $T = 2.0$ , b)  $T = 6.0$ , c)  $T = 10.0$  y d)  $T = 14.0$ .

resultados, para el caso de una gota esferoidal prolata, que el tipo de configuración que exhiben los defectos topológicos en el nemático es la conocida como configuración bipolar, enviando los defectos a las puntas o polos de la gota. La dirección de los vectores directores locales del nemático también son indicativos de la configuración bipolar. La configuración de defectos encontrada en estos resultados, se someten a comparación al final de la sección.

### 5.1.2. Gota esferoidal oblata

Siguiendo con los resultados, ahora para una gota esferoidal oblata, bajo la misma condición de anclaje planar en la superficie de la misma, se muestran a continuación las diferentes configuraciones adoptadas por los defectos topológicos en el nemático. Para el oblato con  $\gamma = 0.8$  el número de partículas que conforman la superficie de la gota fue  $N_g = 11711$  y el total de partículas tipo GB en el interior fueron  $N_{GB} = 20194$ . Los resultados de los defectos formados en el nemático dentro de la gota se muestran en la figura 5.5. Lo que muestra este resultado es una configuración de defectos bipolar que empieza a ser más evidente a  $T = 12.0$  (fig. 5.5c) y se consolidan conforme disminuye la temperatura. En la fig. 5.5d se muestra mayormente la fase nemática, con fluctuaciones en regiones de la gota que más adelante (esto quiere decir, al disminuir la temperatura del sistema) serán las causantes de la transición a

la configuración bipolar. Los vectores propios del campo nemático, al igual que los resultados de configuraciones bipolares previamente presentados, se dirigen de un defecto a otro. Algo importante en este oblató es que los defectos esta vez no van a los polos sobre el eje  $z$  de referencia, sino que se ubican sobre el plano  $xy$ . Esta orientación de los defectos coincide (al igual que en las configuraciones bipolares presentadas) con el director de la fase nemática, a su vez, coinciden con el lugar geométrico donde los semiejes del esferoide son mayores.

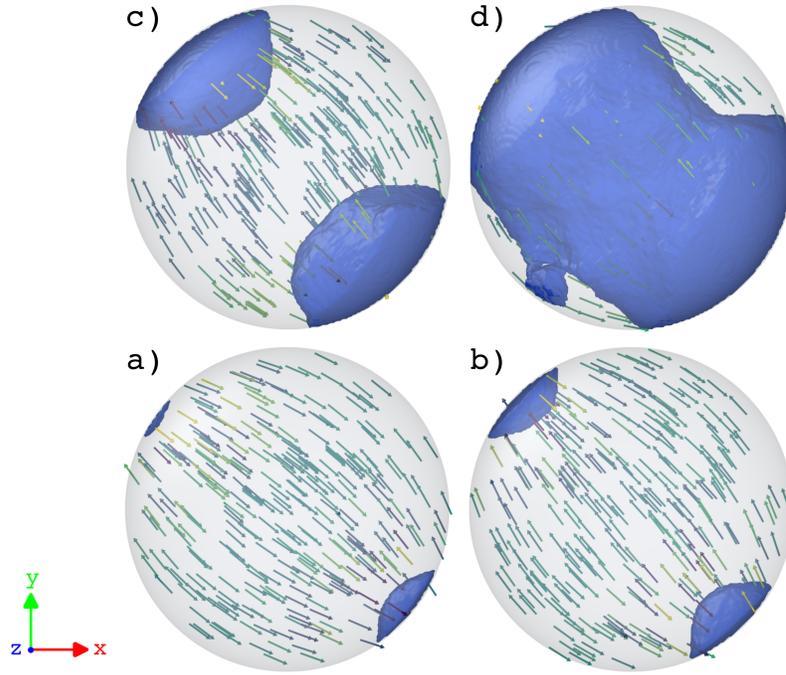


Figura 5.5: Representación de la gota esferoidal oblata con  $\gamma = 0.8$  para un anclaje planar en su superficie. Se pueden visualizar los defectos topológicos en la fase nemática y los sitios con un valor del parámetro de orden pequeño ( $S < 0.3$ ), además de vectores representativos de la orientación que presenta el campo nemático dentro de la gota. La temperatura corresponde con: a)  $T = 2.0$ , b)  $T = 6.0$ , c)  $T = 12.0$  y d)  $T = 14.0$ .

La gota esferoidal oblata con  $\gamma = 0.5$  fue simulada con  $N_g = 12750$  partículas en la superficie y  $N_{GB} = 20129$  partículas en el interior para formar un CL nemático. La naturaleza del anclaje en la superficie de tipo planar produjo los correspondientes resultados que se muestran en la figura 5.6. De nueva cuenta se puede observar que el tipo de configuración de defectos es bipolar. Al igual que en  $\gamma = 0.8$ , la gota oblata de  $\gamma = 0.5$  hereda la formación de defectos sobre el plano  $xy$  donde los semiejes son mayores. Los vectores del campo nemático van de un defecto a otro exhibiendo la dirección de la propia fase del CL.

Por último, para el oblató de  $\gamma = 0.25$ , se obtuvieron configuraciones de defectos del tipo bipolar. Los defectos en esta gota se ubicaron sobre el plano  $xy$ , lugar geométrico en el cual el director del nemático existe; estos resultados pueden verse en la figura 5.7. En las figs. 5.7c-d

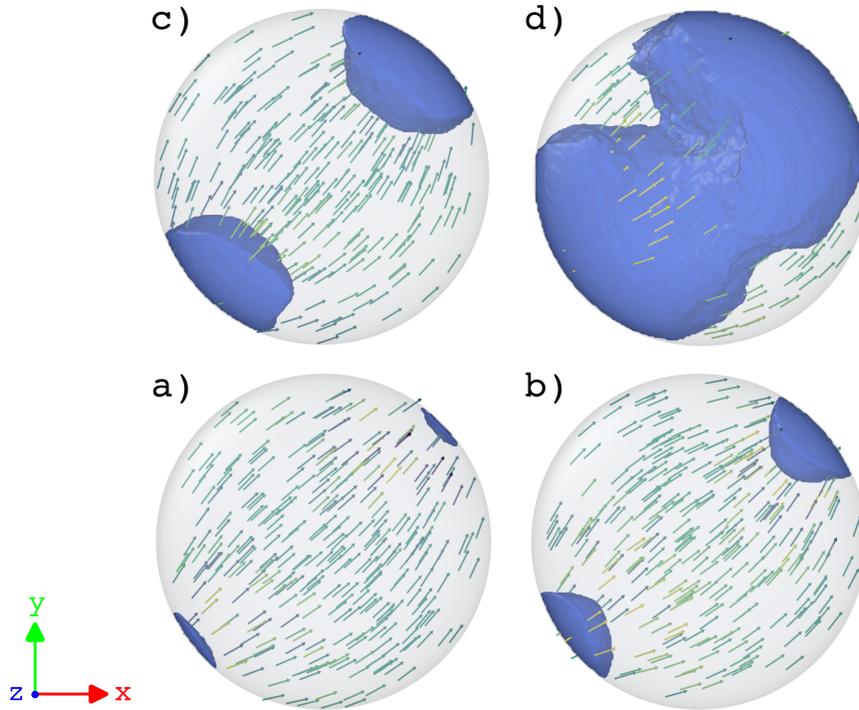


Figura 5.6: Representación de la gota esferoidal oblata con  $\gamma = 0.5$  para un anclaje planar en su superficie. Se pueden visualizar los defectos topológicos en la fase nemática y los sitios con un valor del parámetro de orden pequeño ( $S < 0.36$ ), además de vectores representativos de la orientación que presenta el campo nemático dentro de la gota. La temperatura corresponde con: a)  $T = 2.0$ , b)  $T = 6.0$ , c)  $T = 10.0$  y d)  $T = 14.0$ .

se muestra el proceso de formación de los defectos (correspondientes con  $S < 0.45$ ) bipolares empezando por una gota que exhibe la fase nemática (fig. 5.7d), posteriormente, a menor temperatura, los defectos se ubican sobre el ecuador del esferoide adoptando una forma muy irregular (fig 5.7c). La cantidad de partículas para simular esta geometría fue de  $N_g = 16764$  en la superficie y  $N_{GB} = 20186$  en el interior de la gota. Cuando la temperatura del sistema llega a  $T = 2.0$ , dos sitios en el plano  $xy$  sobre el ecuador de la gota, son el lugar geométrico donde se ubican los defectos. Los vectores propios del nemático sugieren una configuración bipolar.

En resumen, para gotas esferoidales oblatas, la configuración de defectos resulta en una bipolar. Los polos de esta configuración aparecen en el plano  $xy$  (señalado en cada una de las figuras) sobre el ecuador de la gota. También, esta ubicación coincide con los semiejes de mayor longitud. Las interacciones que se han impuesto, entre los mesógenos y las paredes internas de la gota, en conjunto con las interacciones de tipo GB entre mesógenos, promueven la formación de defectos bipolares donde la fase nemática se orienta sobre la dirección de los semiejes del esferoide de mayor longitud.

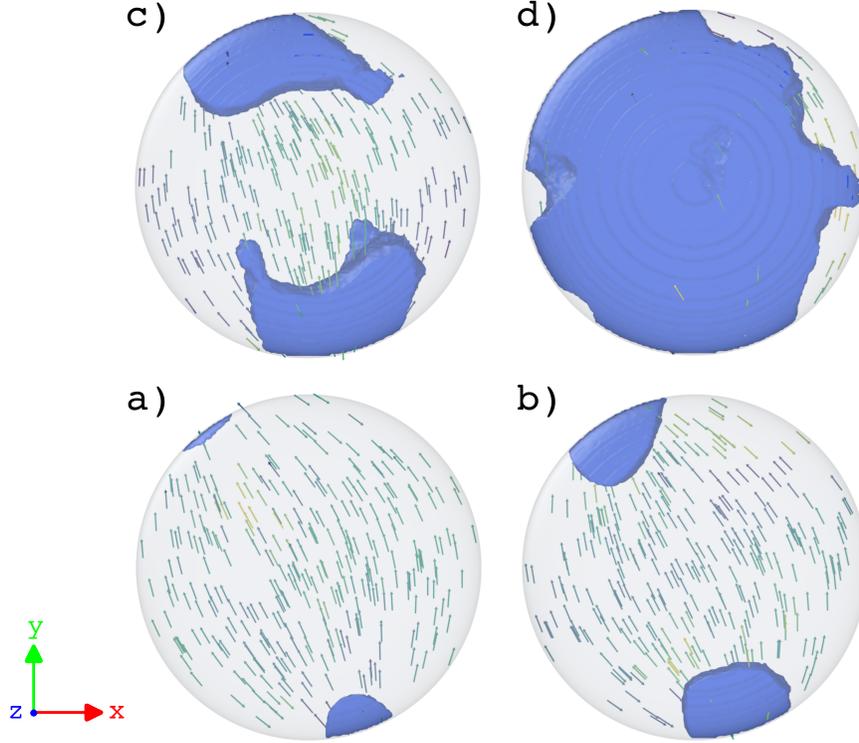


Figura 5.7: Representación de la gota esferoidal oblata con  $\gamma = 0.25$  para un anclaje planar en su superficie. Se pueden visualizar los defectos topológicos en la fase nemática y los sitios con un valor del parámetro de orden pequeño ( $S < 0.45$ ), además de vectores representativos de la orientación que presenta el campo nemático dentro de la gota. La temperatura corresponde con: a)  $T = 2.0$ , b)  $T = 6.0$ , c)  $T = 10.0$  y d)  $T = 14.0$ .

## 5.2. Anclaje homeotrópico

En la sección anterior se presentaron resultados para todos los esferoides que se consideraron en este trabajo, como función del parámetro  $\gamma$ , manteniendo el anclaje planar. A continuación se presentan los resultados de las simulaciones de las gotas esferoidales para un anclaje en la superficie de tipo homeotrópico.

### 5.2.1. Gota esferoidal prolata

Comenzando con la gota esferoidal prolata con  $\gamma = 1.25$  con anclaje homeotrópico, los resultados de las simulaciones realizadas se muestran en la figura 5.8. El número total de partículas utilizadas para esta geometría fue de  $N_g = 11765$  y  $N_{GB} = 20186$ , para la construcción de la superficie de la gota y para la formación de CL en el interior, respectivamente. El número de partículas coincide con el sistema simulado previamente: gota esferoidal pro-

lata con anclaje planar. Esto quiere decir que, para estudiar los efectos debidos al anclaje, el tamaño del sistema no cambió. En la figura 5.8 se muestra el proceso de formación de los defectos en el nemático dentro de la gota. Para su visualización fue necesario considerar diferentes valores del parámetro de orden nemático, que fuera relativamente pequeño y que permitiera vislumbrar el tipo de defecto que se había formado. Se puede notar que en las figs. 5.8e-f la configuración de defectos resultante es de tipo bipolar. Conforme la temperatura va descendiendo, los defectos en los polos de la gota se mueven de lugar viajando hacia el centro del esferoide para formar dos cúmulos curvos, tal como lo muestran las figuras 5.8a y c.

Estas últimas configuraciones descritas fueron representadas utilizando un valor del parámetro de orden nemático de  $S < 0.09$  y  $S < 0.08$ , respectivamente; si aumentamos un poco el valor en esta consideración, es decir,  $S < 0.10$  y  $S < 0.095$ , respectivamente, entonces aparecerán dos conexiones que unen estos cúmulos formando una especie de anillo (ver figs. 5.8b y d). Este proceso de formación de defectos en forma de anillo, pasando previamente por una bipolar, se debe a lo siguiente: A temperaturas altas (relativas al sistema en cuestión) predomina la fase isótropa; conforme la temperatura desciende surge la fase nemática, esto significa que predomina una dirección de los mesógenos. Esta dirección, como ya se mencionó, coincide con el semieje de mayor longitud del esferoide. En el caso de prolatos, es el eje  $z$ , en los oblatos, alguna dirección sobre el plano  $xy$ . La ubicación de los defectos se establece también debido a la geometría.

Ahora bien, para la gota esferoidal prolata con  $\gamma = 2.0$  con anclaje homeotrópico en su superficie, se simularon  $N_g = 12519$  partículas en la superficie y  $N_{GB} = 20186$  mesógenos en el interior. La formación de defectos como función de la temperatura se muestra en la figura 5.9. El valor del parámetro de orden utilizado para considerar que en una región de la gota existe un defecto fue  $S = 0.16$ . En la fig. 5.9c, se muestra una configuración del sistema exhibiendo un gran defecto en la parte media de la gota, terminando en los polos de la misma; el conjunto de vectores propios rodean este defecto (que cambia con el paso del tiempo debido a la temperatura). Para temperaturas más bajas, como en la fig. 5.9b, los defectos se mueven a los costados o *caras* del oblato permaneciendo en sitios opuestos, tal cual como ocurre en las configuraciones bipolares. La dirección que adquiere el director del nemático, que es paralela al plano  $xy$ , coincide con la dirección predominante debido a la condición de anclaje. A temperaturas más bajas, las interacciones de los mesógenos con la frontera de la gota juegan un papel decisivo en la disposición de los defectos. En la fig. 5.9a se muestra que a  $T = 2.0$  los defectos en las caras de la gota han desaparecido y se han movido a los polos de la misma, además, las interacciones debidas al anclaje en la superficie

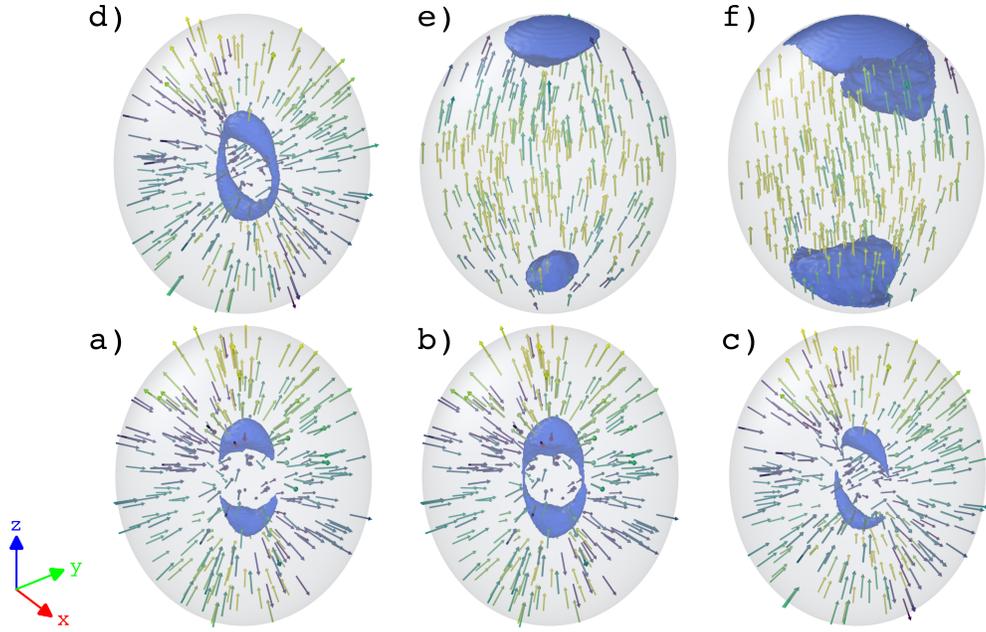


Figura 5.8: Representación de la gota esferoidal prolata con  $\gamma = 1.25$  para un anclaje homeotrópico en su superficie. Se pueden visualizar los defectos topológicos en la fase nemática y los sitios con un valor del parámetro de orden pequeño, además de vectores representativos de la orientación que presenta el campo nemático dentro de la gota. La temperatura corresponde con: a) y b)  $T = 2.0$ , c) y d)  $T = 4.0$ , e)  $T = 8.0$  y f)  $T = 12.0$ . El valor del parámetro de orden nemático que se utilizó para representar los defectos corresponde con: a)  $S < 0.09$ , b)  $S < 0.10$ , c)  $S < 0.08$ , d)  $S < 0.095$ , e)  $S < 0.38$  y f)  $S < 0.20$ .

produjeron dos líneas de defectos paralelas al eje  $z$  en la parte central de la gota. Los vectores debidos al parámetro de orden local se comportan como hipérbolas vistas desde el plano  $xy$ .

Por último, para la geometría, esferoide prolato con un anclaje homeotrópico en la superficie, se presentan los resultados de las simulaciones en la figura 5.10. En esta, podemos observar que a temperaturas altas, relativas a este sistema, predomina la fase isotrópica (fig. 5.10c). Con el descenso de la temperatura del sistema, la formación de defectos topológicos en el nemático de la gota se presentan y lo hacen ubicándose en los polos. Además de estos defectos, dos líneas de defectos se forman en las caras del esferoide a través de la línea de los polos de la gota hasta unirse con sus homólogos bipolares. Estos resultados descritos anteriormente pueden visualizarse en las figs. 5.10a-b. El número de partículas utilizado en este sistema fueron  $N_g = 15016$  y  $N_{GB} = 20129$ .

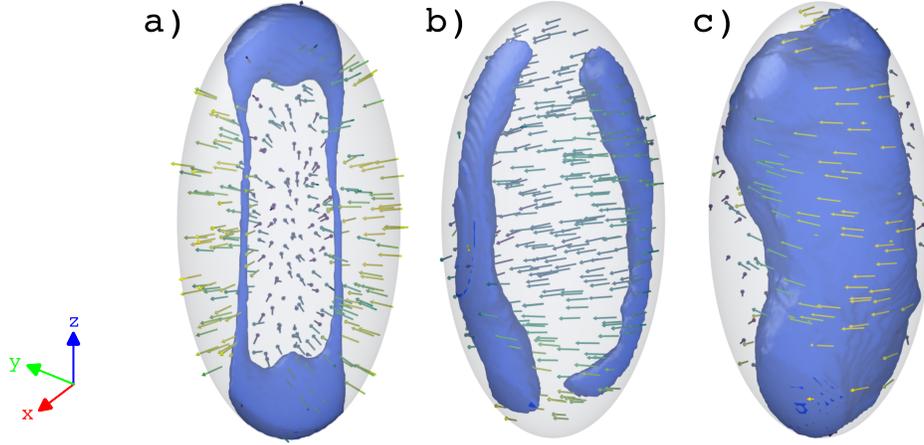


Figura 5.9: Representación de la gota esferoidal prolata con  $\gamma = 2.0$  para un anclaje homeotrópico en su superficie. Se pueden visualizar los defectos topológicos en la fase nemática y los sitios con un valor del parámetro de orden pequeño ( $S < 0.16$ ), además de vectores representativos de la orientación que presenta el campo nemático dentro de la gota. La temperatura corresponde con: a)  $T = 2.0$ , b)  $T = 12.0$  y c)  $T = 14.0$ .

### 5.2.2. Gota esferoidal oblata

Continuando con los resultados, ahora para los esferoides oblatos con anclaje homeotrópico, se presentan los defectos topológicos en la fase nemática. En primer lugar, se analizará la gota con  $\gamma = 0.8$ . Esta configuración es uno de los sistemas más similares a una esfera y es posible una comparación más cercana con los resultados de Moreno-Razo [48]. El número de partículas necesarias para construir la superficie del oblato fue  $N_g = 11711$  y para formar el CL nemático en el interior se utilizaron  $N_{GB} = 20194$ . Los resultados de las simulaciones para este tipo de gota se muestran en la figura 5.11. En las figs. 5.11d y c se visualizan configuraciones de defectos bipolares debido a que un par de defectos se formaron en las puntas de los oblatos (sobre el eje  $z$ , en la línea de los polos). Es posible apreciar que para la temperatura de  $T = 12.0$  (fig. 5.11c) los defectos aumentan su tamaño, pero esto es efecto de que para representarlos se consideró un valor en el parámetro de orden nemático de  $S < 0.36$ , más alto que en los otros incisos. La razón de lo antes mencionado es la siguiente: al reducir la temperatura del sistema, las interacciones debido al anclaje predominan, y si a esto le añadimos que la interacción *side-side* entre los mesógenos es más intensa respecto a otras configuraciones (mesógeno-mesógeno), el resultado que se obtiene es que los defectos bipolares desaparecen. Si se reduce más la temperatura, como es el caso de las figs. 5.11a-b, el tipo de defecto que surge en estas condiciones es un anillo (o un toroide) en la parte central de la gota. El parámetro de orden nemático que se utilizó para representar los defectos en estas últimas gotas se mantuvo en  $S < 0.13$ .

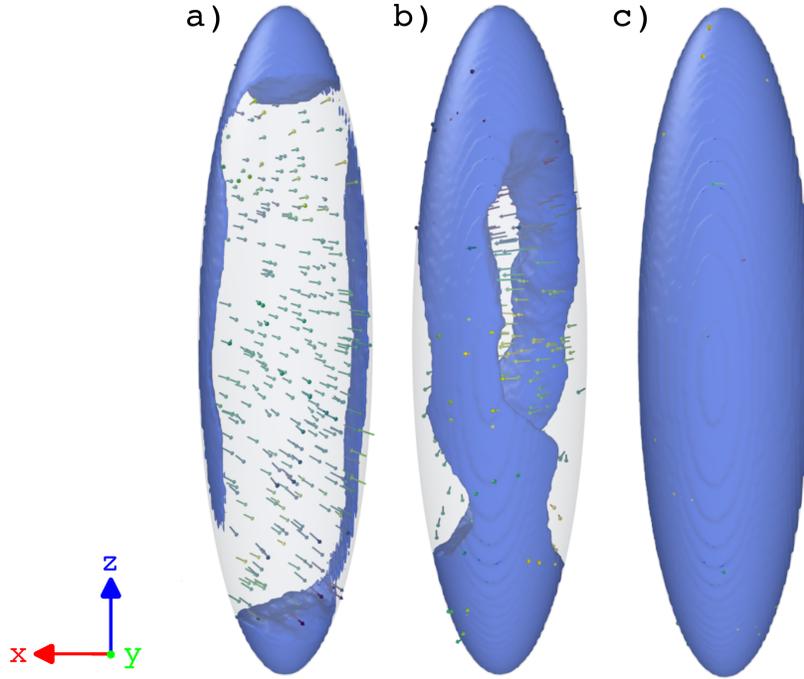


Figura 5.10: Representación de la gota esferoidal prolata con  $\gamma = 4.0$  para un anclaje homeotrópico en su superficie. Se pueden visualizar los defectos topológicos en la fase nemática y los sitios con un valor del parámetro de orden pequeño ( $S < 0.28$ ), además de vectores representativos de la orientación que presenta el campo nemático dentro de la gota. La temperatura corresponde con: a)  $T = 2.0$ , b)  $T = 12.0$  y c)  $T = 14.0$ .

Para el oblato con  $\gamma = 0.5$  se utilizaron  $N_g = 12750$  partículas en la superficie de la gota y  $N_{GB} = 20129$  mesógenos en el interior. La figura 5.12 contiene los resultados del proceso de formación de los defectos en el nemático. Se puede observar que al reducir la temperatura se deja atrás la fase isotrópica para abrir paso a la fase nemática (fig. 5.12d) mostrando pocos defectos que aparecen y desaparecen en la parte ecuatorial de la gota (fig. 5.12b-c). Posteriormente, continuando con el descenso de la temperatura del sistema, aparece un cinturón de defectos en el ecuador del oblato, esto se puede visualizar en la figura. 5.12a.

Por último, los resultados para la gota que corresponde con  $\gamma = 0.25$ , esferoidal oblata, se muestran en la figura 5.13. El número de partículas suficientes para realizar esta simulación es idéntica a su homóloga con anclaje planar, esto es,  $N_g = 16764$  para la superficie y  $N_{GB} = 20186$  para el interior. A temperaturas altas, cuando aparece la fase nemática ( $T = 12.0$ ) se forman dos defectos tubulares en la parte central de la gota, orientados a través del eje  $z$  hasta temperaturas mayores a  $T = 8.0$  aproximadamente (ver figs. 5.13d-e). Para la temperatura de  $T = 8.0$  los dos defectos tubulares se han desvanecido y han dejado un núcleo tubular libre de defectos, orientado también en la dirección del eje  $z$ , en la parte central de la gota (fig. 5.13c); a esta configuración se le conoce como radial-escapada [78, 45, 55]. En las figuras. 5.13a-b, se

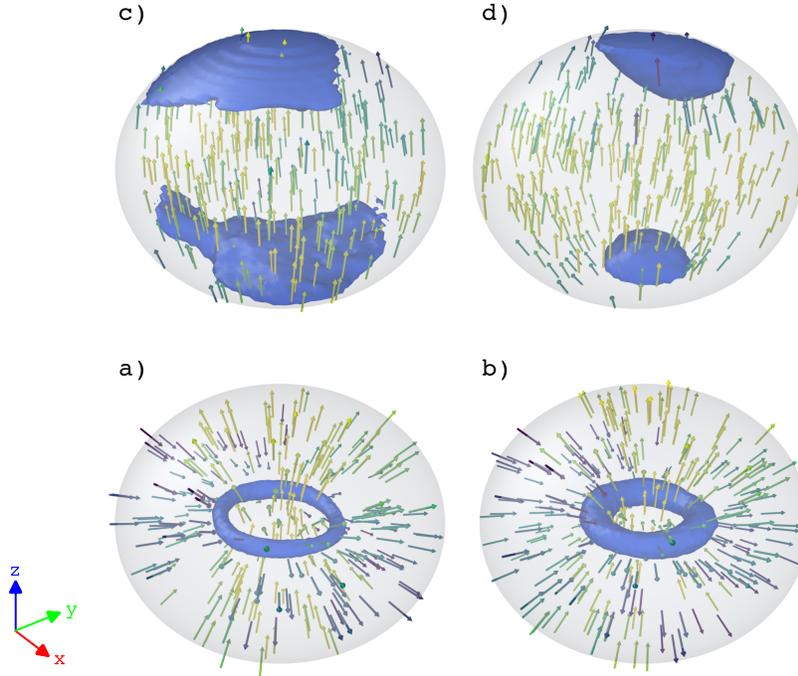


Figura 5.11: Representación de la gota esferoidal oblata con  $\gamma = 0.8$  para un anclaje homeotrópico en su superficie. Se pueden visualizar los defectos topológicos en la fase nemática y los sitios con un valor del parámetro de orden pequeño, además de vectores representativos de la orientación que presenta el campo nemático dentro de la gota. La temperatura corresponde con: a)  $T = 2.0$ , b)  $T = 4.0$ , c)  $T = 8.0$  y d)  $T = 12.0$ . El valor del parámetro de orden nemático que se utilizó para representar los defectos corresponde con: a), b) y d)  $S < 0.13$  y c)  $S < 0.36$ .

formaron defectos en forma de cinturón sobre el ecuador del esferoide, también, el director del nemático se orienta a lo largo del eje menor del oblato.

### 5.3. Configuración bipolar

En el siguiente apartado se muestran configuraciones representativas que exhiben una configuración bipolar. De manera breve, una configuración bipolar consiste en dos regiones de defectos que se encuentran diametralmente opuestas. El director del campo nemático se encuentra dirigido de un defecto a otro. En las figuras 5.14 5.15 se muestran las gotas esferoidales prolatas y oblatas, respectivamente, con un anclaje planar en su superficie en distintas representaciones. Mientras que en la figura 5.16 se muestran las configuraciones de defectos cuando existe anclaje homeotrópico en la superficie de la gota, en a) y b) se tienen gotas prolatas y en c) se tiene una gota oblata. Cada panel muestra: una representación esquemática

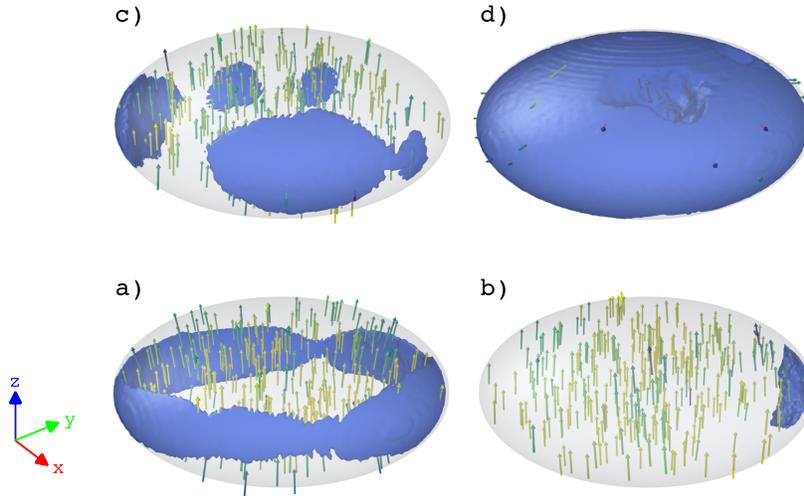


Figura 5.12: Representación de la gota esferoidal oblata con  $\gamma = 0.5$  para un anclaje homeotrópico en su superficie. Se pueden visualizar los defectos topológicos en la fase nemática y los sitios con un valor del parámetro de orden pequeño ( $S < 0.36$ ), además de vectores representativos de la orientación que presenta el campo nemático dentro de la gota. La temperatura corresponde con: a)  $T = 2.0$ , b)  $T = 4.0$ , c)  $T = 6.0$  y d)  $T = 10.0$ .

del director del nemático, las gotas con defectos (como las mostradas en las secciones 5.1 5.2), una sección transversal que muestra los mesógenos y el interior de la gota de simulación y por último una imagen de polarizadores cruzados simulada. Además, algunas imágenes tomadas de las referencias [77, 45, 57, 48] que sirven como guía para la caracterización de la configuración de defectos. Como se puede apreciar, el patrón experimental producido en los polarizadores cruzados, está fuertemente relacionado con el ángulo de incidencia de la luz sobre la gota, lo que genera una serie de texturas diferentes según las condiciones de incidencia. Dicho esto, es posible encontrar diferentes patrones de polarizadores cruzados para una determinada configuración de defectos. Los resultados presentados en este trabajo tienen una gran similitud con los resultados experimentales tomados como referencia y algunos de simulación por computadora previamente reportados. Tal es el caso del trabajo de Moreno-Razo *et. al.* [48] que se encuentra en el panel f) de la figura 5.15, la cual muestra una gran concordancia con el panel c) y d) de la misma figura. Por otra parte, en el panel b) de la figura 5.16 se muestra una configuración bipolar muy peculiar, esto es, los defectos se encuentran en las caras del esferoide y no en los *polos* de la gota, como sus casos homólogos, y los vectores directores se dirigen de un defecto a otro.

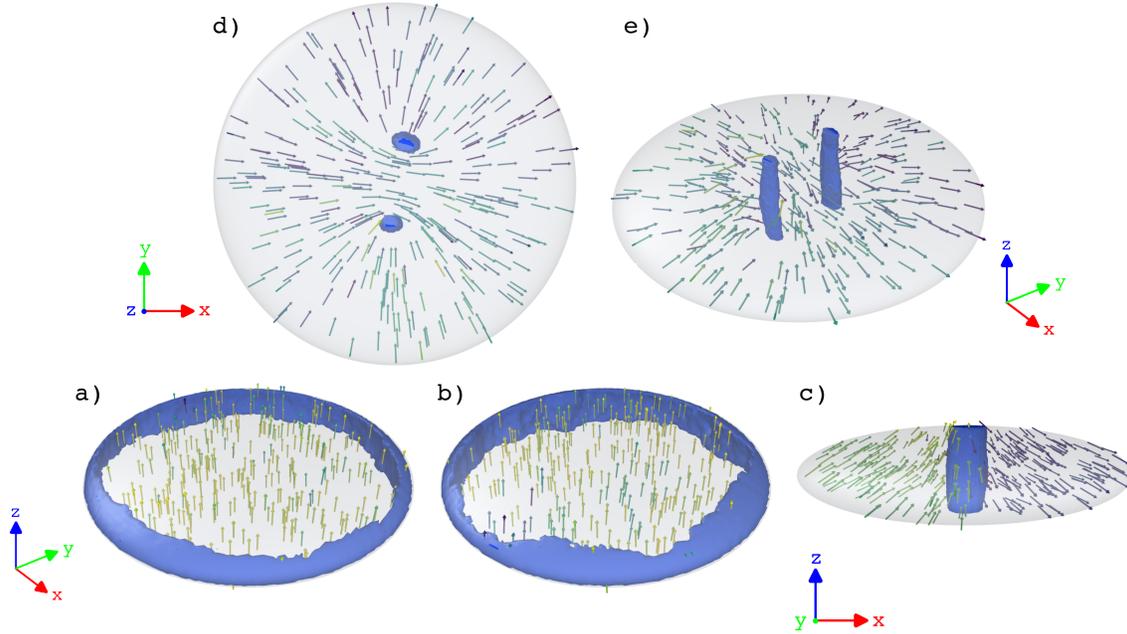


Figura 5.13: Representación de la gota esferoidal oblata con  $\gamma = 0.25$  para un anclaje homeotrópico en su superficie. Se pueden visualizar los defectos topológicos en la fase nemática y vectores representativos de la orientación que presenta el campo nemático dentro de la gota. La temperatura corresponde con: a)  $T = 2.0$ , b)  $T = 4.0$ , c)  $T = 8.0$ , d) y e)  $T = 10.0$ . El valor del parámetro de orden nemático que se utilizó para representar los defectos corresponde con: a)  $S < 0.45$ , b)  $S < 0.4$ , c), d) y e)  $S < 0.15$ .

## 5.4. Configuración radial

En este último apartado se muestran las configuraciones representativas que exhiben una configuración radial. En algunas referencias se hace alusión a una configuración *axial-radial* [45, 81, 48, 78, 55]. La configuración de defectos radial, o también llamada *erizo* (hedgehog), se caracteriza por poseer un defecto en el núcleo de la gota, mientras que los vectores directores del nemático se dirigen radialmente a la superficie. En los resultados presentados en las figuras 5.17 5.18 se puede apreciar que la configuración de defectos no son propiamente radiales, sino que, en algunos casos (ver figs. 5.17b y f) se trata de defectos en forma de anillo. Los paneles d-e de la figura 5.17 son tomados de la literatura [45, 81] y muestran una muy buena concordancia con los resultados de este trabajo. También, como ya se mencionó anteriormente, las imágenes de polarizadores cruzados obtienen su textura según el plano de incidencia de la luz. Por lo tanto, en algunas gotas con configuraciones de defectos bipolares, si se les calcula su imagen de polarizadores cruzados, lo que se obtiene es una imagen correspondiente a una tipo-radial. Esto se debe a que las componentes vectoriales del director nemático, en el plano de incidencia, son radiales al centro de la gota. Como ejemplo

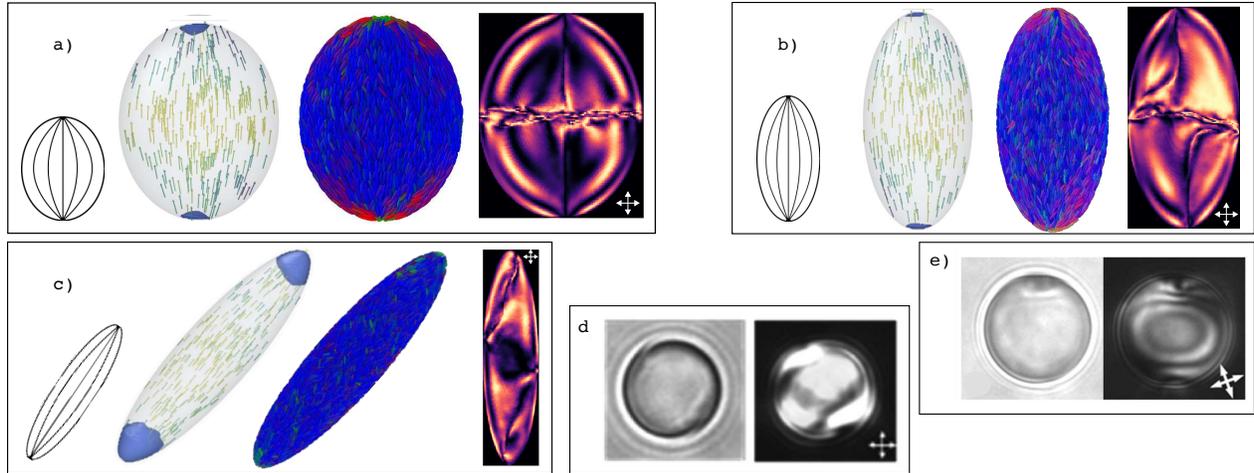


Figura 5.14: Comparación de los resultados de este trabajo, para la configuración de defectos bipolar, con publicaciones. De a)-c) se muestran resultados de configuraciones representativas: a)  $\gamma = 1.25$ , b)  $\gamma = 2.0$  y c)  $\gamma = 4.0$ , con anclaje planar en la superficie de la gota, todos a  $T = 2.0$ . En cada panel se muestran (de izq.-der.): representación esquemática del director del nemático, gota con defectos, sección transversal que muestra los mesógenos, imagen de polarizadores cruzados simulada (se señala la orientación de los polarizadores). De d)-e) se muestran resultados tomados de las referencias [77, 45] respectivamente.

pueden visualizarse las figuras 5.18a-c. En las figs. 5.17c y 5.18e se exhibe una configuración conocida como *radial-escapada*, la cual, en este caso, consiste en un núcleo que no representa defecto topológico en la parte central de la gota orientado a lo largo del eje  $z$ . Las partículas, así como los vectores directores, se orientan de manera radial al núcleo y se desvían hacia la parte superior de la gota.

### Configuración tipo-axial

La configuración de defectos tipo axial presenta un anillo ecuatorial de defectos sobre la superficie de la gota. También podría presentarse esta configuración sin la existencia de defectos [66, 52, 29]. En algunos casos se puede observar que el anillo de defectos se encuentra dentro de la gota, similar a las configuraciones previamente mostradas (ver figura 5.17b). Los resultados de polarizadores cruzados, así como snapshots de la simulación que muestran los mesógenos, para configuraciones de tipo axial, se encuentran en las figuras 5.19 5.20. Estas son producto de la perspectiva, es decir, si le hacemos incidir luz (o en el contexto de la simulación, bajo el cálculo de las matrices de Jones) en el ángulo adecuado, lograremos observar que los vectores del director nemático tienen este comportamiento.

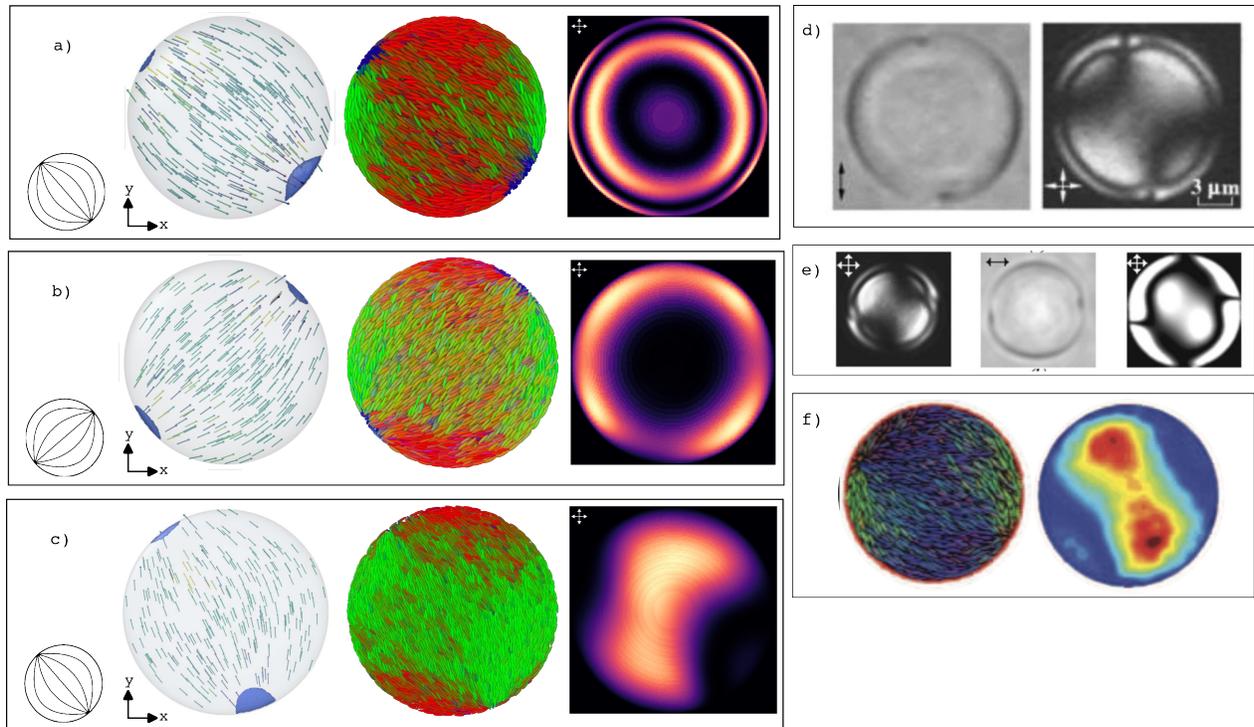


Figura 5.15: Comparación de los resultados de este trabajo, para la configuración de defectos bipolar, con publicaciones. De a)-c) se muestran resultados de configuraciones representativas: a)  $\gamma = 0.8$ , b)  $\gamma = 0.5$  y c)  $\gamma = 0.25$ , con anclaje planar en la superficie de la gota, todos a  $T = 2.0$ . En cada panel se muestran (de izq.-der.): representación esquemática del director del nemático, gota con defectos, sección transversal que muestra los mesógenos, imagen de polarizadores cruzados simulada (se señala la orientación de los polarizadores). De d)-f) se muestran resultados tomados de las referencias [45, 57, 48] respectivamente.

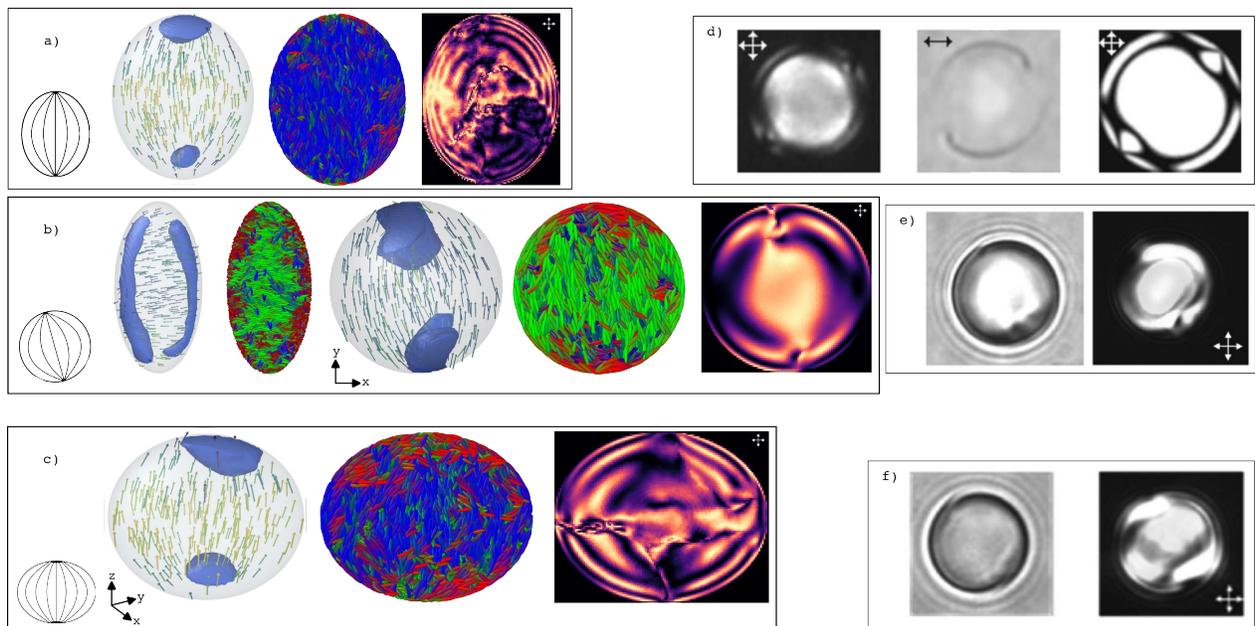


Figura 5.16: Comparación de los resultados de este trabajo, para la configuración de defectos bipolar, con publicaciones. De a)-c) se muestran resultados de configuraciones representativas: a)  $\gamma = 1.25$  con  $T = 8.0$ , b)  $\gamma = 2.0$  con  $T = 12.0$  y c)  $\gamma = 0.8$  con  $T = 12.0$ , con anclaje homeotrópico en la superficie de la gota. En cada panel se muestran (de izq.-der.): representación esquemática del director del nemático, gota con defectos, sección transversal que muestra los mesógenos, imagen de polarizadores cruzados simulada (se señala la orientación de los polarizadores). De d)-f) se muestran resultados tomados de las referencias [57, 45, 45] respectivamente.

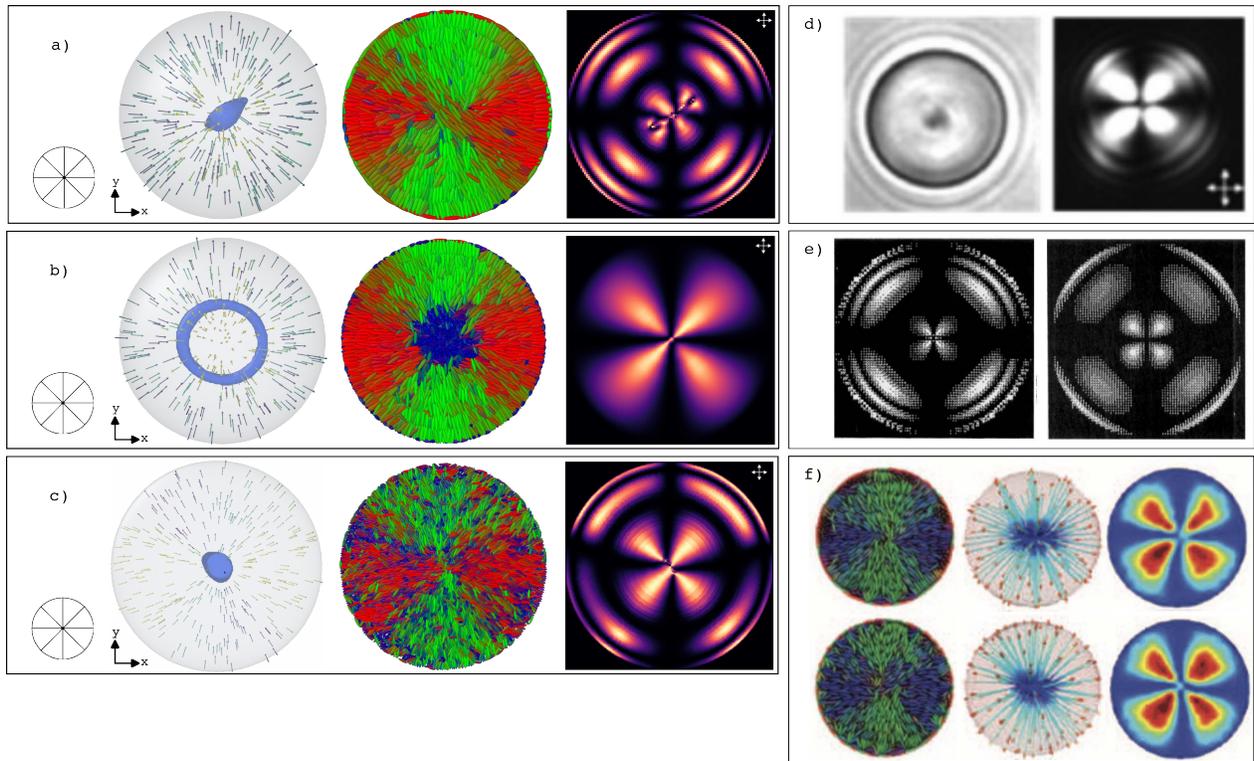


Figura 5.17: Comparación de los resultados de este trabajo, para la configuración de defectos radial, con publicaciones. De a)-c) se muestran resultados de configuraciones representativas: a)  $\gamma = 1.25$  y  $T = 2.0$ , b)  $\gamma = 0.8$  y  $T = 2.0$  y c)  $\gamma = 0.25$  y  $T = 8.0$ , con anclaje homeotrópico en la superficie de la gota. En cada panel se muestran (de izq.-der.): representación esquemática del director del nemático, gota con defectos, sección transversal que muestra los mesógenos, imagen de polarizadores cruzados (se señala la orientación de los polarizadores). De d)-f) se muestran resultados tomados de las referencias [45, 81, 48] respectivamente. En c) se muestra una configuración conocida como radial-escapada [78, 45, 55].

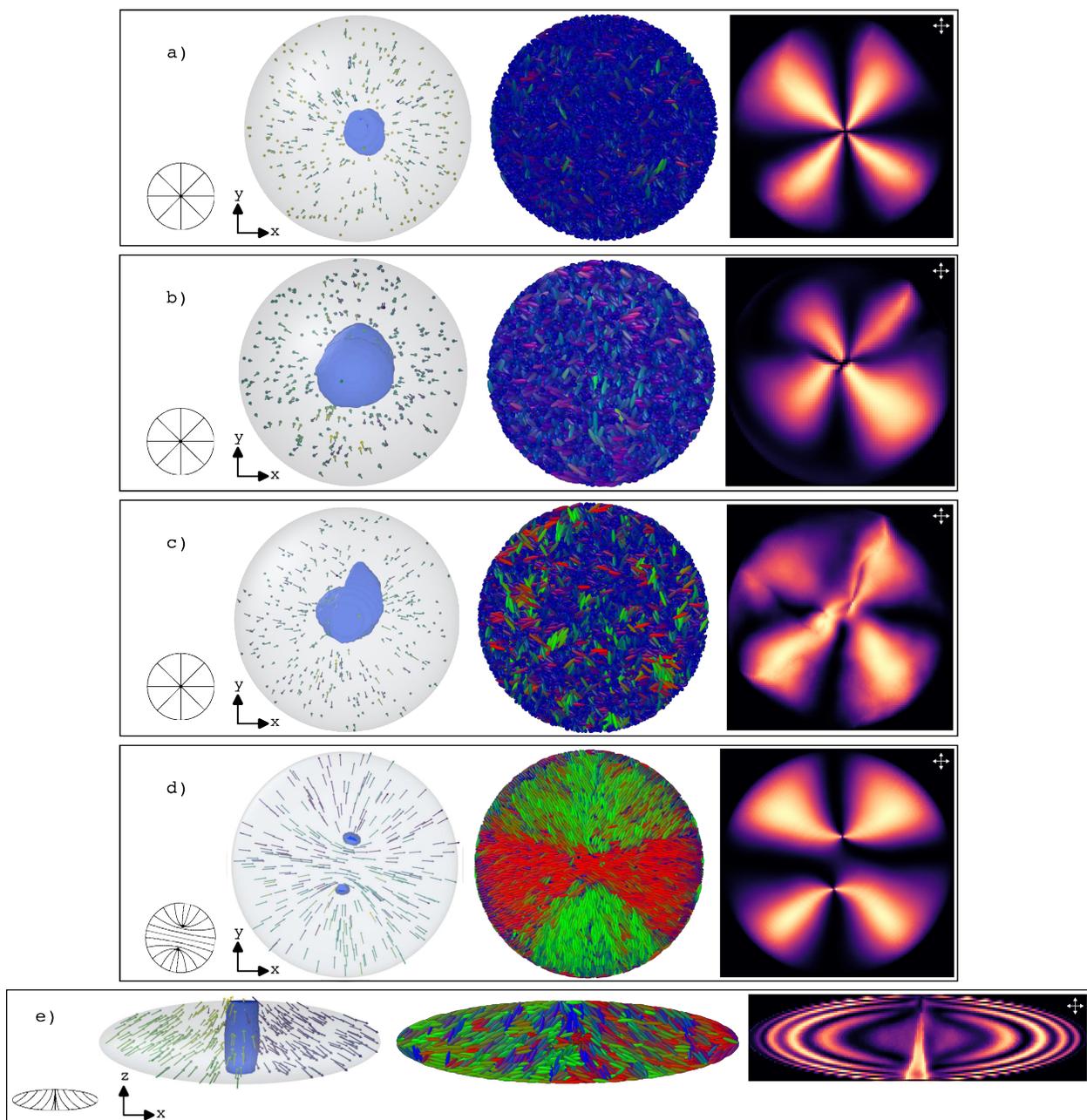


Figura 5.18: Resultados para configuraciones de defectos tipo-radial debido a la perspectiva. Se muestran resultados de configuraciones representativas: a)  $\gamma = 1.25$  y  $T = 4.0$ , b)  $\gamma = 2.0$  y  $T = 4.0$ , c)  $\gamma = 0.8$  y  $T = 12.0$ ,  $\gamma = 0.25$  y  $T = 10.0$  y e)  $\gamma = 0.25$  y  $T = 8.0$ , con anclaje en la superficie de la gota: a)-b) planar y c)-e) homeotrópico. En cada panel se muestran (de izq.-der.): representación esquemática del director del nemático, gota con defectos, sección transversal que muestra los mesógenos, imagen de polarizadores cruzados (se señala la orientación de los polarizadores). En e) se muestra una vista de la configuración radial-escapada [78, 45, 55].

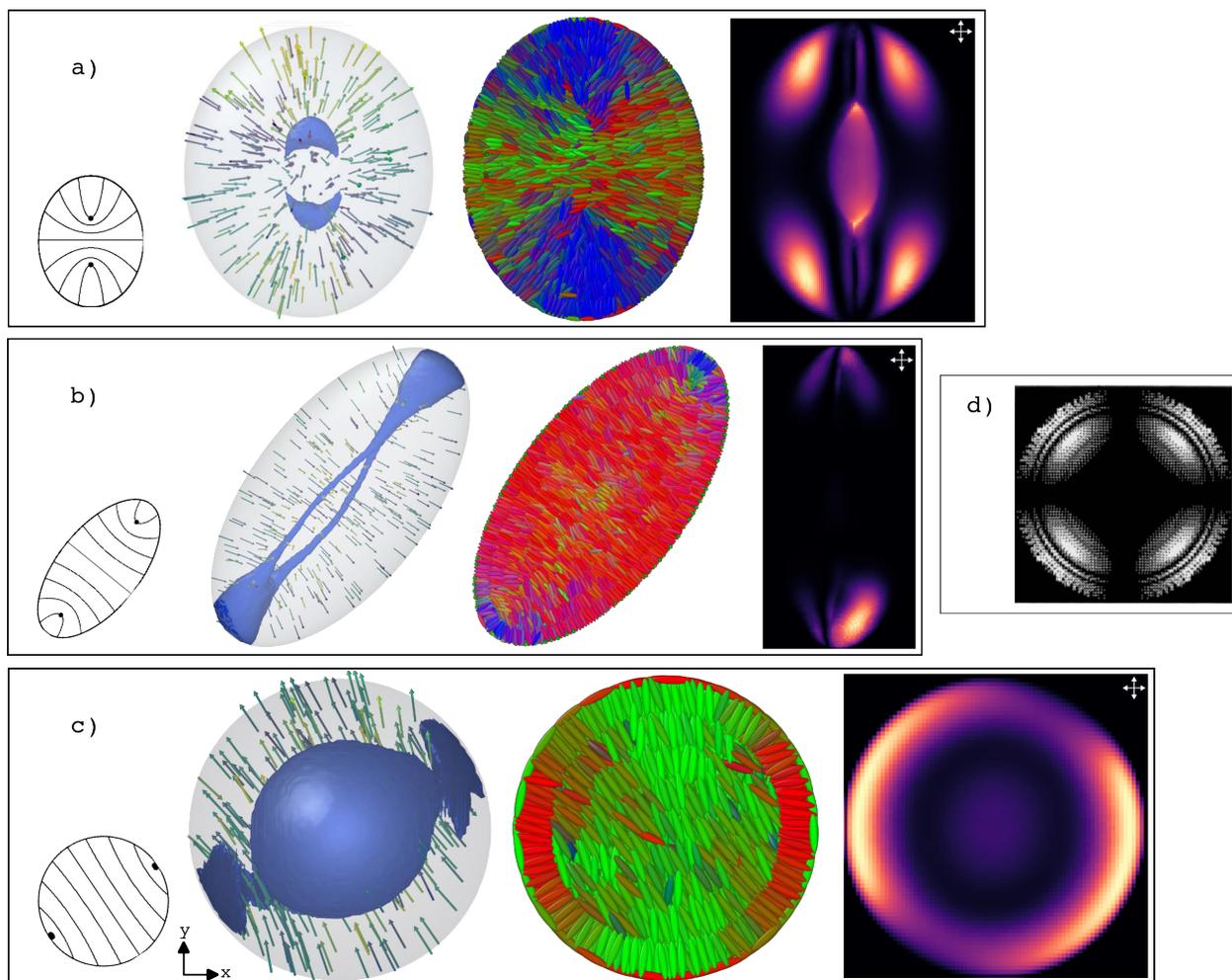


Figura 5.19: Resultados para configuraciones de defectos tipo-axial debido a la perspectiva. Se muestran resultados de configuraciones representativas: a)  $\gamma = 1.25$ , b)  $\gamma = 2.0$  y c)  $\gamma = 4.0$ , con anclaje homotrópico en la superficie de la gota. En cada panel se muestran (de izq.-der.): representación esquemática del director del nemático, gota con defectos, sección transversal que muestra los mesógenos, imagen de polarizadores cruzados (se señala la orientación de los polarizadores). En d) se muestran resultados tomados de la referencia [81].

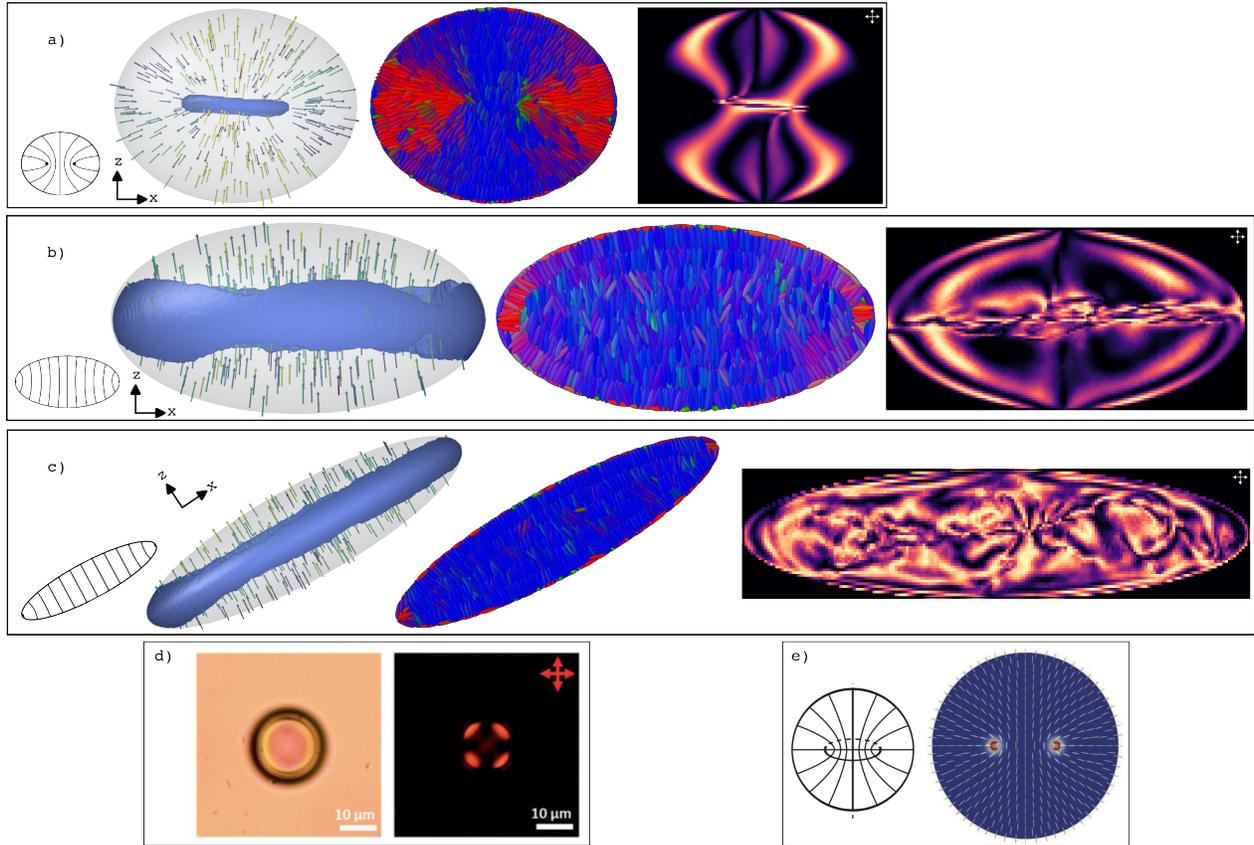


Figura 5.20: Comparación de los resultados de este trabajo, para la configuración de defectos tipo-axial, con publicaciones. De a)-c) se muestran resultados de configuraciones representativas: a)  $\gamma = 0.8$ , b)  $\gamma = 0.5$  y c)  $\gamma = 0.25$ , con anclaje homeotrópico en la superficie de la gota, todos a  $T = 2.0$ . En cada panel se muestran (de izq.-der.): representación esquemática del director del nemático, gota con defectos, sección transversal que muestra los mesógenos, imagen de polarizadores cruzados (se señala la orientación de los polarizadores). De d)-e) se muestran resultados tomados de las referencias [54, 29] respectivamente.

# Capítulo 6

## Conclusiones

En este trabajo se realizaron simulaciones de DM de partículas no-esféricas que interactúan con el potencial de GB confinadas en gotas esferoidales, que van desde prolatas a oblatas, donde la frontera de dichas gotas se construyó con partículas esféricas. La interacción entre los mesógenos y las paredes de la gota se expresó en la sección 3.3 considerando que la partícula esférica carece de orientación (esto es,  $\hat{\mathbf{u}}_i = 0$ ). Para estas simulaciones se consideró trabajar en el ensemble canónico NVT manteniendo constante la densidad de mesógenos dentro de la gota,  $\rho = 0.206$ . Se estudió de manera sistemática la influencia que tiene la geometría de la nanogota y las condiciones de anclaje de las partículas con la superficie interna sobre la fase líquido cristalina en su interior.

Para las gotas esferoidales prolatas con una condición de anclaje planar en su superficie interna, se encontró que el factor geométrico  $\gamma$  introduce un eje preferencial en la orientación de los mesógenos y el director de la fase nemática, haciéndolo coincidir con el eje mayor del esferoide (correspondiente con el eje  $z$  en el marco de referencia definido en este trabajo). Esta anisotropía en la geometría del confinamiento induce la formación de defectos en la configuración bipolar, enviando los sitios de defecto a las puntas del esferoide 5.14. Para valores de  $\gamma$  altos (relativos a los estudiados en este trabajo) se observó que la aparición de defectos tipo bipolar ocurre a temperaturas cada vez más altas (ver figuras 5.2 5.3 5.4). Esto se puede explicar de la siguiente manera. La similitud geométrica que existe entre la gota y los mesógenos (geometría prolata en ambos casos), promueve el anclaje planar de las partículas en las proximidades de la superficie de la gota, propagando la orientación de la fase ordenada en el resto del sistema, promoviendo además la configuración lado-lado entre los mesógenos. Para *romper* esta configuración, o bien, transitar hacia la fase isotrópica, es necesario incrementar la temperatura del sistema.

Para valores pequeños de  $\gamma$ , se observó que la aparición de defectos ocurre de forma más

homogénea por toda la gota en comparación con valores de  $\gamma$  mayores a las mismas temperaturas, promoviendo así, la aparición de la fase nemática a condiciones de temperatura mayores. Para el caso de gotas esféricas oblatas con una condición de anclaje planar en la superficie interna, se encontró que el factor  $\gamma$  induce defectos en la dirección del eje mayor del esferoide. Como en el caso de un esferoide oblato el semi eje en la dirección del eje  $z$  es menor que los otros dos, el CL nemático se orienta en cualquiera de las direcciones sobre el plano  $xy$  (es decir, se produce un rompimiento espontáneo de la simetría). Ver figura 5.15. Este resultado concuerda con el análisis realizado para la gota esferoidal prolata con el mismo anclaje. Cuando el valor de  $\gamma$  es alto, o cercano a la unidad, se tiende a una geometría esférica y se observa la fenomenología exhibida en el trabajo de Moreno-Razo *et al.* [48]. Cuando  $\gamma$  decrece, la longitud del semieje de la gota en el eje  $z$  disminuye, el sistema tiende a un CL cuasi dos-dimensional confinado por una frontera circular [10].

La condición de anclaje planar en la cara interna de la gota esferoidal, oblata y prolata, promueve defectos tipo bipolar donde los sitios de defectos se ubican en la dirección del eje mayor del esferoide donde, además, coincide la dirección del director nemático. Como se mencionó en secciones anteriores, se ha reportado en la literatura de manera teórica y experimental, la existencia de una transición entre la configuración bipolar y radial bajo condiciones muy específicas [67, 80, 20, 79, 57, 73]. Para las gotas esféricas prolatas con anclaje homeotrópico en la superficie interna, se encontró la siguiente fenomenología. Para  $\gamma = 1.25$ , una configuración bipolar de defectos apareció en la dirección del eje mayor del esferoide para altas temperaturas y tuvo una transición a una configuración radial cuando se redujo la temperatura del sistema (ver figuras 5.8d-e) produciéndose dos sitios de defectos en el centro de la gota que bien pueden estar unidos en forma de anillo; la dirección de la normal al plano del anillo es perpendicular a la dirección del eje mayor de la gota.

Cuando el valor de  $\gamma$  aumenta a 2.0, una competencia entre temperatura y la fuerza de anclaje, produce dos líneas de defectos de tipo bipolar, después ocurre la transición a una configuración tipo axial. Los defectos que aparecen en la temperatura más baja, similares al caso de  $\gamma = 1.25$ , son dirigidos a las puntas del prolato mientras que en la parte central de la gota se promueven dos líneas de defectos en la dirección de  $z$ . Conforme el parámetro  $\gamma$  aumenta, envía los defectos a la superficie de la gota, como se mostró en la figura 5.19. Cuando  $\gamma$  disminuye, en el régimen de gotas esféricas oblatas, con anclaje homeotrópico, se observó que ocurre una transición de configuraciones de defectos de bipolar a radial para  $\gamma = 0.8$ , formando un defecto en forma de anillo en el centro de la gota. Este resultado coincide muy bien con el obtenido por Moreno-Razo [48] para el caso esférico (ver figura 5.17).

Cuando  $\gamma$  disminuye más, tal que llega a los valores de 0.5 y 0.25, la geometría promueve la formación de defectos sobre el ecuador de la gota en la superficie de la misma, esto para bajas temperaturas. En este último caso,  $\gamma = 0.25$ , el defecto ecuatorial es precedido por la llamada configuración radial escapada. Esta configuración proviene de la existencia previa de dos defectos tubulares que desaparecen al combinarse conforme la temperatura disminuye (ver figura 5.7).

En todos los casos se presentaron las configuraciones de defectos encontradas, para las simulaciones moleculares de gotas esferoidales cambiando la condición de anclaje, comparándolas con resultados experimentales. Las imágenes de polarizadores cruzados concuerdan bastante bien con los calculados en este trabajo.

# Capítulo 7

## Perspectivas

Las perspectivas que se tienen en consideración para este trabajo son las siguientes.

Desarrollar un código de dinámica molecular utilizando más de una GPU con la finalidad de aumentar el tamaño del sistema, es decir, simular más partículas, así como para obtener resultados en menor tiempo.

Cambiar el modelo de interacción entre partículas del CL y también entre los mesógenos y las partículas que forman parte del confinamiento, esto se puede lograr añadiendo quiralidad al potencial de interacción y agregando más de una especie de partículas.

Rehacer los cálculos mostrados en este trabajo pero para sistemas de mezclas binarias y/o ternarias de partículas tipo GB para las mismas geometrías aquí reportadas, para nuevas geometrías (por ejemplo: toroides, cilindros, planos paralelos, etc.)

Agregar nano-partículas al sistema y estudiar sus efectos debido al confinamiento y a las condiciones de anclaje.

# Capítulo 8

## Apéndices

Durante mis estudios de maestría se publicaron una serie de artículos de investigación en conjunto con mi asesor de tesis y colegas quienes, durante estos años, han servido de guías y mentores en mi formación científica. Este conjunto de colaboraciones finalizaron en publicaciones científicas y en participación en congresos y seminarios, presentando mis trabajos y contribuciones.

### 8.1. Apéndice A: Artículos publicados

**Munguía-Valadez, J.**, Chávez-Rojo, M. A., Sambriski, E. J., and Moreno-Razo, J. A. (2022). The generalized continuous multiple step (GCMS) potential: model systems and benchmarks. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 34(18), 184002.

Moreno-Razo, J. A., **Munguía-Valadez, J.**, Sambriski, E. J., López-Lemus, J., and Ibarra-Tandi, B. (2023). Shear viscosity coefficient of dilute gases via the ANC2s interaction potential. *Journal of Molecular Liquids*, 383, 122012.

Calderón-Alcaraz, A., **Munguía-Valadez, J.**, Hernández, S. I., Ramírez-Hernández, A., Sambriski, E. J., and Moreno-Razo, J. A. (2021). A bidimensional Gay-Berne calamitic fluid: Structure and phase behavior in bulk and strongly confined systems. *Frontiers in Physics*, 8, 622872.

Ledesma-Durán, A., **Munguía-Valadez, J.**, Moreno-Razo, J. A., Hernández, S. I., and Santamaría-Holek, I. (2021). Entropic effects of interacting particles diffusing on spherical surfaces. *Frontiers in Physics*, 9, 634792.

**Munguía-Valadez, J.**, Ledesma-Durán, A., Moreno-Razo, J. A., and Santamaría-Holek, I. (2023). Adiabatic limit collapse and local interaction effects in non-linear active microrheology molecular simulations of two-dimensional fluids. *Soft Matter*, 19(28), 5288-5299.

de J. Ríos-Roldán, A., **Munguía-Valadez, J. A.**, Sambriski, E. J., and Moreno-Razo, J. A. (2023). Nematic phases from nearly spherical mesogens: applying the approximate non-conformal (ANC) theory. *Molecular Physics*, e2276903.

Mier-y-Terán, L., **Munguía-Valadez, J.**, and Antonio Moreno-Razo, J. (2023). Study of the positional and orientational contributions to the Helmholtz free energy of a finite hard-disk system. A molecular dynamics analysis of its hexatic transition. *Molecular Physics*, e2288702.

Ibarra-Tandi, B., Moreno-Razo, J. A., **Munguía-Valadez, J.**, López-Lemus, J., and Chavez-Rojo, M. A. (2021). Effects of the repulsive and attractive forces on phase equilibrium and critical properties of two-dimensional non-conformal simple fluids. *Journal of Molecular Liquids*, 326, 115234.

## 8.2. Apéndice B: Congresos y seminarios

Presentación del trabajo "Topological defects in spheroidal nematic liquid crystal droplets."<sup>en</sup> el 11th Liquid Matter Conference organizado por The Czech Academy of Sciences, los días del 18-23 de julio del 2021, en la sesión de posters en formato virtual.

Participación en el LXV Congreso Nacional de Física con la plática titulada: "Defectos topológicos de gotas esféricas de cristales líquidos nemáticos" celebrado del 2 al 7 de octubre del 2022 en Zacatecas, Zacatecas, México.

Participación en la Escuela de la RMCB en su edición 2022, que se llevó a cabo del 26 al 28 de octubre de forma virtual.

Presentación del trabajo "Simulaciones moleculares de cristales líquidos."<sup>en</sup> la sesión de posters en la XXIII Escuela Nacional de Biofísica Molecular celebrada del 6 al 9 de diciembre del 2022 de manera virtual en la ciudad de Hermosillo, Sonora, México.

Participación en el LXVI Congreso Nacional de Física con el poster titulado: "Separación de la energía libre de Helmholtz en sus contribuciones posicional y orientacional a la transición hexática de un sistema finito", el día 12 de octubre del 2023 en Morelia, Michoacán, México.

Presentación del trabajo "Cristales líquidos nemáticos confinados en gotas esféricas: un estudio de dinámica molecular."<sup>en</sup> el seminario del posgrado en física de la UAM-I el 17 de octubre del 2023, CDMX, México.

Presentación del trabajo "Cristales líquidos nemáticos confinados en gotas esféricas: un estudio de dinámica molecular."<sup>en</sup> el seminario del área de física de líquidos de la UAM-I el 21 de diciembre del 2023, CDMX, México.

### 8.3. Apéndice C: Unidades reducidas

A continuación se dan a conocer algunas de las unidades reducidas más utilizadas.

Unidades reducidas	
Distancia	$r^* = r/\sigma_0$
Energía	$u^* = u/\varepsilon_0$
Temperatura	$T^* = k_B T/\varepsilon_0$
Densidad	$\rho^* = \rho\sigma_0^3$
Presión	$p^* = p\sigma_0^2/\varepsilon_0$
Tiempo	$\delta t^* = \delta t(\varepsilon_0/m\sigma_0^2)^{1/2}$
Longitud de onda	$\lambda^* = \lambda/\sigma_0$

En todo el trabajo escrito se ha omitido el superíndice (\*) cuando se hace referencia a las unidades reducidas.

### 8.4. Apéndice D: Información complementaria

A continuación se presentan tablas con los parámetros implementados en el cálculo de las texturas de polarizadores cruzados simuladas. En todos los cálculos se mantuvo constante el valor del índice de refracción extraordinario,  $n_e = 1.7$  (tomado de la referencia [19]).

$\gamma$	Anclaje	Temperatura	Plano	$n_o$	$\lambda$
1.25	planar	2.0	xz	1.55.	5.3
2.00	planar	2.0	xz	1.55.	5.3
4.00	planar	2.0	xz	1.55.	5.5
0.80	planar	2.0	yz	1.55.	4.5
0.80	planar	2.0	xy	1.55.	4.5
0.50	planar	2.0	xy	1.40.	3.5
0.50	planar	2.0	yz	1.40.	4.5
0.25	planar	2.0	xz	1.40.	5.5
0.25	planar	2.0	xy	1.35.	5.5
1.25	homeotrópico	8.0	yz	2.00	4.5
2.00	homeotrópico	12.0	xy	1.40	3.5
0.80	homeotrópico	12.0	yz	1.50	4.5

Tabla 8.1: Parámetros para configuraciones bipolares.

Enseguida se presenta una serie de gráficas de la energía potencial por partícula (de los mesógenos de GB) contra algunos últimos pasos de tiempo de simulación en la serie que se considera después de equilibrar el sistema. Los resultados se presentan organizados en los dos tipos de anclaje que se estudiaron: planar y homeotrópico.

$\gamma$	Anclaje	Temperatura	Plano	$n_o$	$\lambda$
1.25	planar	4.0	xy	1.50	33.0
2.00	planar	4.0	xy	1.50	33.0
0.80	homeotrópico	12.0	xy	1.50	17.5
1.25	homeotrópico	2.0	xy	1.35	5.5
0.80	homeotrópico	2.0	xy	1.55	5.5
0.25	homeotrópico	10.0	xy	1.45	5.5
0.25	homeotrópico	8.0	xy	1.50	33.3

Tabla 8.2: Parámetros para configuraciones radiales.

$\gamma$	Anclaje	Temperatura	Plano	$n_o$	$\lambda$
1.25	homeotrópico	2.0	xz	1.35	12.5
2.00	homeotrópico	2.0	xz	1.30	3.0
4.00	homeotrópico	2.0	xy	1.45	19.0
0.80	homeotrópico	2.0	xz	1.29	4.0
0.50	homeotrópico	2.0	xz	1.40	5.5
0.25	homeotrópico	2.0	xz	1.50	5.5

Tabla 8.3: Parámetros para configuraciones axiales.

Luego, se presentan los valores de los semiejes de los esferoides construidos para formar las nanogotas.

$\gamma$	a (nm)	c (nm)
0.25	45.40	11.35
0.50	36.0	18.0
0.80	30.81	24.65
1.25	26.55	33.19
2.00	22.7	45.5
4.00	18.0	72.0

Tabla 8.4: Valores de los semiejes de los esferoides empleados en las simulaciones.

Por último, se presenta una tabla de morfologías a manera de resumen de los resultados de las simulaciones presentadas en este trabajo. Se hace referencia a la fase isótropa (iso) y las regiones de nemático sin defectos ni frustraciones (considerables) es la dirección del campo nemático (nemático).

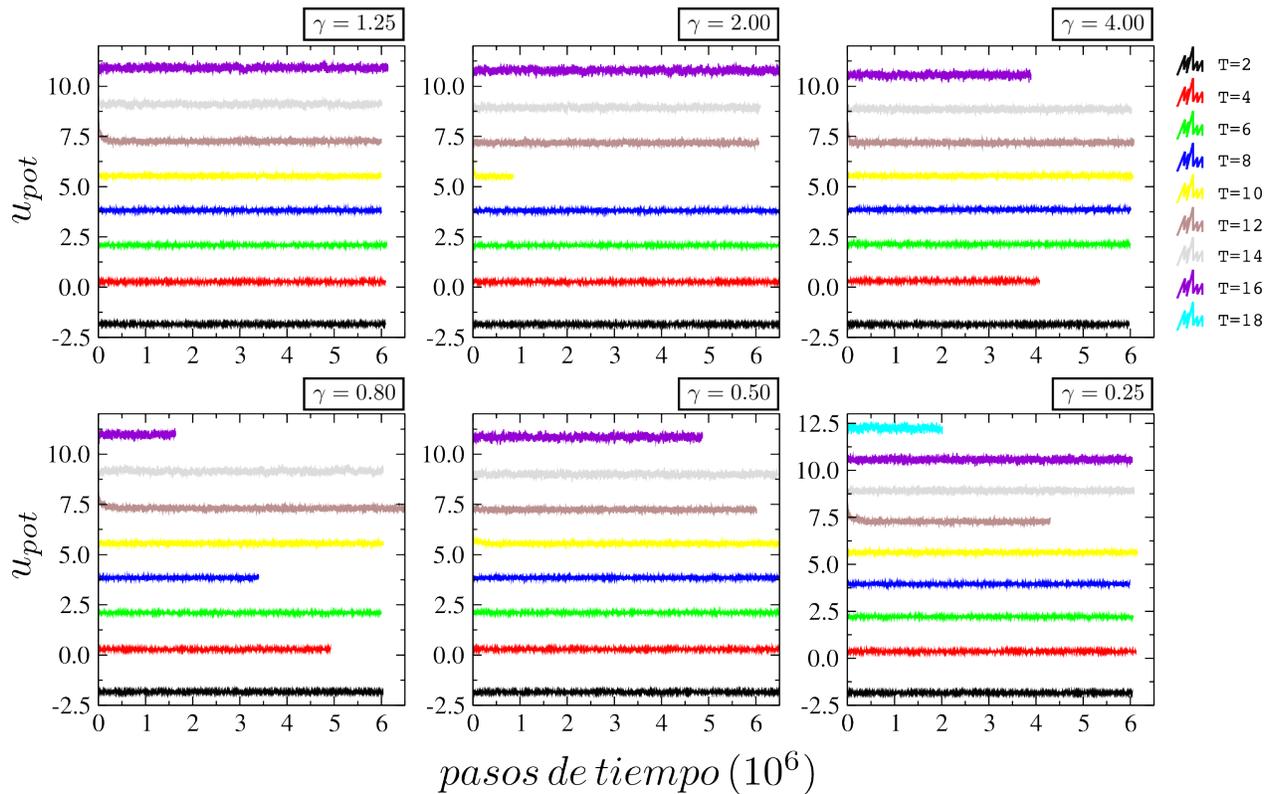


Figura 8.1: Energía potencial de los mesógenos dentro de la nanogota contra algunos últimos pasos de tiempo de simulación. Los valores de la energía presentados pertenecen a los sistemas con anclaje planar.

$\gamma$	Transiciones
0.25	iso $\rightarrow$ bipolar ( $T = 14.0$ )
0.50	iso $\rightarrow$ bipolar ( $T = 12.0$ )
0.80	iso $\rightarrow$ bipolar ( $T = 12.0$ )
1.25	iso $\rightarrow$ bipolar ( $T = 12.0$ )
2.00	iso $\rightarrow$ bipolar ( $T = 14.0$ )
4.00	iso $\rightarrow$ bipolar ( $T = 16.0$ )

Tabla 8.5: Resumen de transiciones morfológicas para las simulaciones con condición de anclaje planar. Se indica la temperatura en la cual se encuentra dicha configuración.

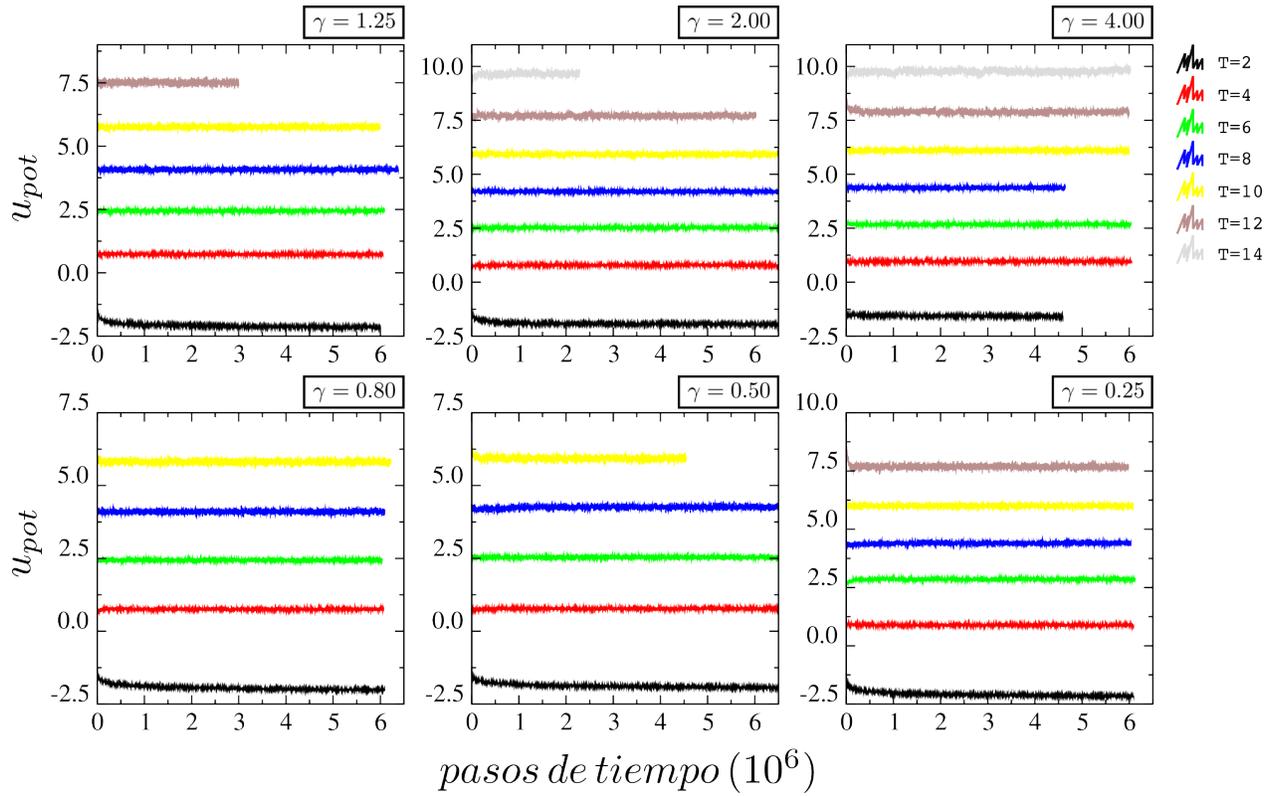


Figura 8.2: Energía potencial de los mesógenos dentro de la nanogota contra algunos últimos pasos de tiempo de simulación. Los valores de la energía presentados pertenecen a los sistemas con anclaje homeotrópico.

$\gamma$	Transiciones
0.25	iso $\rightarrow$ radial (2 defectos) ( $T = 12.0$ ) $\rightarrow$ radial-escapada ( $T = 8.0$ ) $\rightarrow$ radial-axial (ecuador) ( $T = 4.0$ )
0.50	iso $\rightarrow$ nemático ( $T = 8.0$ ) $\rightarrow$ radial-axial (ecuador) ( $T = 2.0$ )
0.80	iso $\rightarrow$ bipolar ( $T = 12.0$ ) $\rightarrow$ nemático ( $T = 6.0$ ) $\rightarrow$ radial (anillo) ( $T = 4.0$ )
1.25	iso $\rightarrow$ bipolar ( $T = 12.0$ ) $\rightarrow$ nemático ( $T = 6.0$ ) $\rightarrow$ radial (2 defectos) ( $T = 4.0$ )
2.00	iso $\rightarrow$ bipolar ( $T = 12.0$ ) $\rightarrow$ nemático ( $T = 6.0$ ) $\rightarrow$ axial ( $T = 4.0$ )
4.00	iso $\rightarrow$ bipolar ( $T = 12.0$ ) $\rightarrow$ nemático ( $T = 6.0$ ) $\rightarrow$ radial-axial (ecuador) ( $T = 4.0$ )

Tabla 8.6: Resumen de transiciones morfológicas para las simulaciones con condición de anclaje homeotrópico. Se indica la temperatura en la cual se encuentra dicha configuración.

# Bibliografía

- [1] M Adams. Optical waves in crystals. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 20(11):1294–1294, 1984.
- [2] Michael P Allen, Mark A Warren, Mark R Wilson, Alain Sauron, and William Smith. Molecular dynamics calculation of elastic constants in gay–berne nematic liquid crystals. *The Journal of chemical physics*, 105(7):2850–2858, 1996.
- [3] Denis Andrienko. Introduction to liquid crystals. *Journal of Molecular Liquids*, 267:520–541, 2018.
- [4] Dmytro Antypov and Douglas J Cleaver. The role of attractive interactions in rod–sphere mixtures. *The Journal of chemical physics*, 120(21):10307–10316, 2004.
- [5] MA Bates and GR Luckhurst. Computer simulation studies of anisotropic systems. xxx. the phase behavior and structure of a gay–berne mesogen. *The Journal of chemical physics*, 110(14):7087–7108, 1999.
- [6] FC Bawden and NW Pirie. The relationships between liquid crystalline preparations of cucumber viruses 3 and 4 and strains of tobacco mosaic virus. *British Journal of Experimental Pathology*, 18(4):275, 1937.
- [7] Frederick Charles Bawden and Norman Wingate Pirie. The isolation and some properties of liquid crystalline substances from solanaceous plants infected with three strains of tobacco mosaic virus. *Proceedings of the Royal Society of London. Series B-Biological Sciences*, 123(832):274–320, 1937.
- [8] Bruce J Berne and Philip Pechukas. Gaussian model potentials for molecular interactions. *The Journal of Chemical Physics*, 56(8):4213–4216, 1972.
- [9] Julian T Brown, Michael P Allen, Elvira Martín del Río, and Enrique de Miguel. Effects of elongation on the phase behavior of the gay-berne fluid. *Physical Review E*, 57(6):6685, 1998.
- [10] A. Calderón-Alcaraz, J. Munguía-Valadez, S. I. Hernández, A. Ramírez-Hernández, E. J. Sambriski, and J. A. Moreno-Razo. A bidimensional gay-berne calamitic fluid: Structure and phase behavior in bulk and strongly confined systems. *Frontiers in Physics*, 8, 2021.
- [11] Paul M Chaikin, Tom C Lubensky, and Thomas A Witten. *Principles of condensed matter physics*, volume 10. Cambridge university press Cambridge, 1995.

- [12] Chuqiao Chen, Viviana Palacio-Betancur, Sepideh Norouzi, Pablo F Zubieta-Rico, Nina Chang, Monirosadat Sadati, Stuart J Rowan, and Juan J de Pablo. Lcpom: Precise reconstruction of polarized optical microscopy images of liquid crystals. *Chemistry of Materials*, 36(7):3081–3091, 2024.
- [13] Douglas J Cleaver, Christopher M Care, Michael P Allen, and Maureen P Neal. Extension and generalization of the gay-berne potential. *Physical Review E*, 54(1):559, 1996.
- [14] A de J. Ríos-Roldán, JA Munguía-Valadez, EJ Sambriski, and JA Moreno-Razo. Nematic phases from nearly spherical mesogens: applying the approximate non-conformal (anc) theory. *Molecular Physics*, page e2276903, 2023.
- [15] Enrique de Miguel, Elvira Martín del Río, and Felipe J Blas. Stability of smectic phases in the gay-berne model. *The Journal of chemical physics*, 121(22):11183–11194, 2004.
- [16] Enrique De Miguel, Luis F Rull, Manoj K Chalam, and Keith E Gubbins. Liquid crystal phase diagram of the gay-berne fluid. *Molecular Physics*, 74(2):405–424, 1991.
- [17] Enrique de Miguel, Luis F Rull, Manoj K Chalam, Keith E Gubbins, and Frank Van Swol. Location of the isotropic-nematic transition in the gay-berne model. *Molecular physics*, 72(3):593–605, 1991.
- [18] Fernando del Río, J Eloy Ramos, and Ian A McLure. Nonconformal potentials and second virial coefficients in molecular fluids. 1. theory. *The Journal of Physical Chemistry B*, 102(51):10568–10575, 1998.
- [19] Paul S Drzaic. Liquid crystal dispersions. 1995.
- [20] Alexander V. Dubtsov, Sergey V. Pasechnik, Dina V. Shmeliova, Ayvr Sh. Saidgaziev, Ekaterina Gongadze, Aleš Iglič, and Samo Kralj. Liquid crystalline droplets in aqueous environments: electrostatic effects. *Soft Matter*, 14:9619–9630, 2018.
- [21] Jesús Eloy Ramos\*. Viscosity and thermal conductivity from non-conformal potentials. i theory and application to noble gases. *Molecular Physics*, 103(17):2323–2334, 2005.
- [22] M Fuentes-Herrera, JA Moreno-Razo, O Guzmán, J López-Lemus, and B Ibarra-Tandi. Separating the effects of repulsive and attractive forces on the phase diagram, interfacial, and critical properties of simple fluids. *The Journal of Chemical Physics*, 144(21), 2016.
- [23] JG Gay and BJ Berne. Modification of the overlap potential to mimic a linear site-site potential. *The Journal of Chemical Physics*, 74(6):3316–3319, 1981.
- [24] William Gropp, Ewing Lusk, and Anthony Skjellum. *Using MPI: portable parallel programming with the message-passing interface*, volume 1. MIT press, 1999.
- [25] Norman Holt Hartshorne. The microscopy of liquid crystals. (*No Title*), 1974.

- [26] Siegfried Hess. Constraints in molecular dynamics, nonequilibrium processes in fluids via computer simulations. In *Computational Physics: Selected Methods Simple Exercises Serious Applications*, pages 268–293. Springer, 1996.
- [27] Siegfried Hess and Bin Su. Pressure and isotropic-nematic transition temperature of model liquid crystals. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 54(10-11):559–569, 1999.
- [28] William G Hoover. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Physical review A*, 31(3):1695, 1985.
- [29] Yucheng Hu, Yang Qu, and Pingwen Zhang. On the disclination lines of nematic liquid crystals. *Communications in Computational Physics*, 19(2):354–379, 2016.
- [30] B Ibarra-Tandi, JA Moreno-Razo, J Munguía-Valadez, J López-Lemus, and MA Chavez-Rojo. Effects of the repulsive and attractive forces on phase equilibrium and critical properties of two-dimensional non-conformal simple fluids. *Journal of Molecular Liquids*, 326:115234, 2021.
- [31] Jaroslav M Ilnytskyi and Mark R Wilson. A domain decomposition molecular dynamics program for the simulation of flexible molecules of spherically-symmetrical and nonspherical sites. ii. extension to nvt and npt ensembles. *Computer physics communications*, 148(1):43–58, 2002.
- [32] Blandine Jerome. Surface effects and anchoring in liquid crystals. *Reports on progress in physics*, 54(3):391, 1991.
- [33] Iam-Choon Khoo. *Liquid crystals*. John Wiley & Sons, 2022.
- [34] Taro Kihara. The second virial coefficient of non-spherical molecules. *Journal of the Physical Society of Japan*, 6(5):289–296, 1951.
- [35] Taro Kihara. On isihara-hayashida’s theory of the second virial coefficient for rigid convex molecules. *Journal of the Physical Society of Japan*, 8(5):686–687, 1953.
- [36] Taro Kihara. Virial coefficients and models of molecules in gases. *Reviews of modern physics*, 25(4):831, 1953.
- [37] Taro Kihara. Intermolecular forces and equation of state of gases. *Advances in chemical physics*, pages 267–307, 1957.
- [38] Taro Kihara. Convex molecules in gaseous and crystalline states. *Advances in Chemical Physics*, pages 147–188, 1963.
- [39] GR Luckhurst and Silvano Romano. Computer simulation studies of anisotropic systems iv. the effect of translational freedom. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 373(1752):111–130, 1980.
- [40] GR Luckhurst and PSJ Simmonds. Computer simulation studies of anisotropic systems: Xxi. parametrization of the gay-berne potential for model mesogens. *Molecular Physics*, 80(2):233–252, 1993.

- [41] Alexey V Lyulin, Muataz S Al-Barwani, Michael P Allen, Mark R Wilson, Igor Neelov, and Nicholas K Allsopp. Molecular dynamics simulation of main chain liquid crystalline polymers. *Macromolecules*, 31(14):4626–4634, 1998.
- [42] C. Mauguin. Crystalline substrates. *C.R. Acad. Sci. Paris*, 156:1246–7, 1913.
- [43] Ian A McLure, J Eloy Ramos, and Fernando del Río. Accurate effective potentials and virial coefficients in real fluids. 1. pure noble gases and their mixtures. *The Journal of Physical Chemistry B*, 103(33):7019–7030, 1999.
- [44] Charles N Melton, Sheida T Riahinasab, Amir Keshavarz, Benjamin J Stokes, and Linda S Hirst. Phase transition-driven nanoparticle assembly in liquid crystal droplets. *Nanomaterials*, 8(3):146, 2018.
- [45] Daniel S Miller, Xiaoguang Wang, and Nicholas L Abbott. Design of functional materials based on liquid crystalline droplets. *Chemistry of Materials*, 26(1):496–506, 2014.
- [46] Michel Mitov. Liquid-crystal science from 1888 to 1922: Building a revolution. *ChemPhysChem*, 15(7):1245–1250, 2014.
- [47] JA Moreno-Razo, J Munguía-Valadez, EJ Sambriski, J López-Lemus, and B Ibarra-Tandi. Shear viscosity coefficient of dilute gases via the anc2s interaction potential. *Journal of Molecular Liquids*, 383:122012, 2023.
- [48] JA Moreno-Razo, EJ Sambriski, NL Abbott, JP Hernández-Ortiz, and JJ De Pablo. Liquid-crystal-mediated self-assembly at nanodroplet interfaces. *Nature*, 485(7396):86–89, 2012.
- [49] Maureen P Neal, Andrew J Parker, and Martin Grayson. Computer simulation of liquid crystalline molecular asymmetry and its link to molecular design. *Molecular Crystals and Liquid Crystals Science and Technology. Section A. Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 364(1):313–322, 2001.
- [50] MP Neal, MD De Luca, and CM Care. Molecular dynamics simulations of calamitic and discotic liquid crystals using a hybrid gay-berne luckhurst romano potential. *Molecular Simulation*, 14(4-5):245–258, 1995.
- [51] Shuichi Nosé. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods. *The Journal of chemical physics*, 81(1):511–519, 1984.
- [52] Renate Ondris-Crawford, Evan P Boyko, Brian G Wagner, John H Erdmann, Slobodan Žumer, and J William Doane. Microscope textures of nematic droplets in polymer dispersed liquid crystals. *Journal of applied physics*, 69(9):6380–6386, 1991.
- [53] Peter Pacheco. Parallel programming with mpi. morgan kau man, san francisco. CA, October, 1996.

- [54] Daniel A Paterson, Xiaoxue Du, Peng Bao, Adele A Parry, Sally A Peyman, Jonathan AT Sandoe, Stephen D Evans, Dan Luo, Richard J Bushby, J Cliff Jones, et al. Chiral nematic liquid crystal droplets as a basis for sensor systems. *Molecular Systems Design & Engineering*, 7(6):607–621, 2022.
- [55] Karthik Peddireddy, Simon Čopar, Khoa V Le, Igor Muševič, Christian Bahr, and Venkata SR Jampani. Self-shaping liquid crystal droplets by balancing bulk elasticity and interfacial tension. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 118(14):e2011174118, 2021.
- [56] EL Pollock and BJ Alder. Static dielectric properties of stockmayer fluids. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 102(1):1–21, 1980.
- [57] OO Prishchepa, AV Shabanov, and V Ya Zyryanov. Director configurations in nematic droplets with inhomogeneous boundary conditions. *Physical Review E*, 72(3):031712, 2005.
- [58] Gabriele Raabe. Molecular simulation studies on thermophysical properties. *Springer2017*, 2017.
- [59] J Eloy Ramos, Fernando del Río, and Ian A McLure. Nonconformal potentials and second virial coefficients in molecular fluids. ii. applications to nonspherical molecules. *The Journal of Physical Chemistry B*, 102(51):10576–10585, 1998.
- [60] J Eloy Ramos, Fernando Del Río, and Ian A McLure. Accurate effective potentials and virial coefficients in real fluids. part iii. alkanes and perfluoroalkanes. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2(12):2731–2741, 2000.
- [61] J Eloy Ramos, Fernando Del Río, and Ian A McLure. Accurate effective potentials and virial coefficients in real fluids part iv. heterodiatomic and polyatomic substances with permanent multipoles and their mixtures with noble gases. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 3(13):2634–2643, 2001.
- [62] Friedrich Reinitzer. Contributions to the knowledge of cholesterol. *Liquid Crystals*, 5(1):7–18, 1989.
- [63] Fernando Del Rio, Benjamín Ibarra, and LUIS MIER Y TERÁN. A model for viscosity coefficients of gases with potentials differing in form. *Molecular Physics*, 101(19):2997–3007, 2003.
- [64] Conmar Robinson. Liquid-crystalline structures in polypeptide solutions. *Tetrahedron*, 13(1-3):219–234, 1961.
- [65] Conmar Robinson, JC Ward, and RB Beevers. Liquid crystalline structure in polypeptide solutions. part 2. *Discussions of the Faraday Society*, 25:29–42, 1958.
- [66] Jake Shechter, Noe Atzin, Ali Mozaffari, Rui Zhang, Ye Zhou, Benjamin Strain, Linda M Oster, Juan J De Pablo, and Jennifer L Ross. Direct observation of liquid crystal droplet configurational transitions using optical tweezers. *Langmuir*, 36(25):7074–7082, 2020.

- [67] Jake Shechter, Noe Atzin, Ali Mozaffari, Rui Zhang, Ye Zhou, Benjamin Strain, Linda M. Oster, Juan J. de Pablo, and Jennifer L. Ross. Direct observation of liquid crystal droplet configurational transitions using optical tweezers. *Langmuir*, 36(25):7074–7082, 2020.
- [68] B Smit, CP Williams, EM Hendriks, and SW De Leeuw. Vapour-liquid equilibria for stockmayer fluids. *Molecular Physics*, 68(3):765–769, 1989.
- [69] Michael J Stephen and Joseph P Straley. Physics of liquid crystals. *Reviews of Modern Physics*, 46(4):617, 1974.
- [70] Mark J Stevens and Gary S Grest. Phase coexistence of a stockmayer fluid in an applied field. *Physical Review E*, 51(6):5976, 1995.
- [71] William C Swope, Hans C Andersen, Peter H Berens, and Kent R Wilson. A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters. *The Journal of chemical physics*, 76(1):637–649, 1982.
- [72] Donald B Taber, Jeffrey A Davis, Lewis A Holloway, and Ora Almagor. Optically controlled fabry-perot interferometer using a liquid crystal light valve. *Applied optics*, 29(17):2623–2631, 1990.
- [73] V. Tomar, S. I. Hernández, N. L. Abbott, J. P. Hernández-Ortiz, and J. J. de Pablo. Morphological transitions in liquid crystal nanodroplets. *Soft Matter*, 8:8679–8689, 2012.
- [74] VN Tsvetkov. Motion of anisotropic liquids in rotating magnetic field. *Zh Eksp Teor Fiz*, 9:603–615, 1939.
- [75] Moisés Alberto Valdés-Pech, Leticia Larios-López, Rosa Julia Rodríguez-González, Isaura Felix-Serrano, Nayely Trejo-Carbajal, and Dámaso Navarro-Rodríguez. Semi-fluorinated p-terphenyl liquid crystals. *Journal of Fluorine Chemistry*, 218:42–50, 2019.
- [76] ME Van Leeuwen. Deviation from corresponding-states behaviour for polar fluids. *Molecular Physics*, 82(2):383–392, 1994.
- [77] Jonathan K Whitmer, Xiaoguang Wang, Frederic Mondiot, Daniel S Miller, Nicholas L Abbott, and Juan J de Pablo. Nematic-field-driven positioning of particles in liquid crystal droplets. *Physical review letters*, 111(22):227801, 2013.
- [78] F Xu, H-S Kitzerow, and PP Crooker. Electric-field effects on nematic droplets with negative dielectric anisotropy. *Physical Review A*, 46(10):6535, 1992.
- [79] Bin Yan, Jie He, Xin Du, Kai Zhang, Shoulian Wang, Cuihong Pan, and Yinghan Wang. Control of liquid crystal droplet configuration in polymer dispersed liquid crystal with macro-iniferter polystyrene. *Liquid Crystals*, 36(9):933–938, 2009.
- [80] Jianhua Zou and Jiyu Fang. Director configuration of liquid-crystal droplets encapsulated by polyelectrolytes. *Langmuir*, 26(10):7025–7028, 2010.
- [81] Slobodan Žumer and Samo Kralj. Influence of  $k_{24}$  on the structure of nematic liquid crystal droplets. *Liquid Crystals*, 12(4):613–624, 1992.



Simulaciones computacionales de gotas esféricas de cristales líquidos nemáticos.

En la Ciudad de México, se presentaron a las 10:00 horas del día 23 del mes de julio del año 2024 en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

DR. VICTOR MANUEL ROMERO ROCHIN  
DR. JOSE ANTONIO MORENO RAZO  
DR. ORLANDO GUZMAN LOPEZ

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el ultimo, se reunieron para proceder al Examen de Grado cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

DE: JORGE AMAURI MUNGUIA VALADEZ

y de acuerdo con el artículo 78 fracción III del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

*Aprobar*

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó al interesado el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.



JORGE AMAURI MUNGUIA VALADEZ  
ALUMNO

REVISÓ

MTRA. ROSALIA SERRANO DE LA PAZ  
DIRECTORA DE SISTEMAS ESCOLARES

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI

*Roman Linares Romero*  
DR. ROMAN LINARES ROMERO

PRESIDENTE

DR. VICTOR MANUEL ROMERO ROCHIN

VOCAL

*J Antonio Moreno*  
DR. JOSE ANTONIO MORENO RAZO

SECRETARIO

DR. ORLANDO GUZMAN LOPEZ