

Estudio por simulación del diagrama de fases del modelo de solapamiento gaussiano

R. Marguta^{1*}, E. Martín del Río² y E. de Miguel¹

(1) Dto. de Física Aplicada, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Huelva, 21071 Huelva

(2) Dto. de Ingeniería Eléctrica y Térmica, Escuela Politécnica Superior, Universidad de Huelva, 21819 Huelva

El modelo de solapamiento gaussiano repulsivo (HGO)^{1,2} constituye una base adecuada para el estudio de cristales líquidos nemáticos. Aunque se han estudiado detalladamente las fases isotrópica (*I*) y nemática (*N*) de dicho modelo, poco se sabe de las fases sólidas. En este trabajo completamos el diagrama de fases del modelo HGO incluyendo las fases sólidas además de las fases fluidas.

Este análisis implica la utilización de diversas técnicas de simulación para el cálculo de energías libres: integración termodinámica [utilizando como estados de referencia el gas ideal (fases fluidas) o el cristal de Einstein (fases cristalinas)], integración paramétrica e integración Gibbs-Duhem.

Solo se consideran moléculas prolatas. Para valores pequeños de la elongación molecular, κ , se tiene la secuencia isotrópico-plástico-cristal cuando se comprime el sistema. A medida que aumenta κ desaparece la fase plástica (*P*) y finalmente aparece la fase nemática entre el fluido isotrópico y el cristal (*Cr*). Los dos puntos triples presentes en el diagrama de fases (*I-P-Cr* e *I-N-Cr*) son determinados con exactitud.

* ramona.georgeta@uhu.es

¹ E.de Miguel y E. Martín del Río, J. Chem. Phys., **115**, 9072 (2001)

² E.de Miguel y E. Martín del Río, J. Chem. Phys., **118**, 1852 (2003)