

Estudio por simulación por ordenador de la interfase nemático-vapor para el modelo de Gay-Berne.

Luis F. Rull¹ y José Manuel Romero-Enrique¹

¹ Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear, Universidad de Sevilla, Avenida Reina Mercedes s/n 41012 Sevilla, España

En este trabajo presentamos simulaciones por ordenador de la interfase nemático-vapor en el modelo Gay-Berne, considerando situaciones correspondientes tanto a moléculas prolatas como oblatas (véase Fig. 1). Hemos determinado el anclaje del nemático respecto a la interfase, y lo hemos correlacionado con los parámetros del potencial intermolecular. Por otro lado, hemos evaluado la tensión superficial asociada a esta interfase, encontrando una ley de estados correspondientes para la dependencia de la tensión superficial con la temperatura (véase Fig. 2), tanto para moléculas prolatas como oblatas.

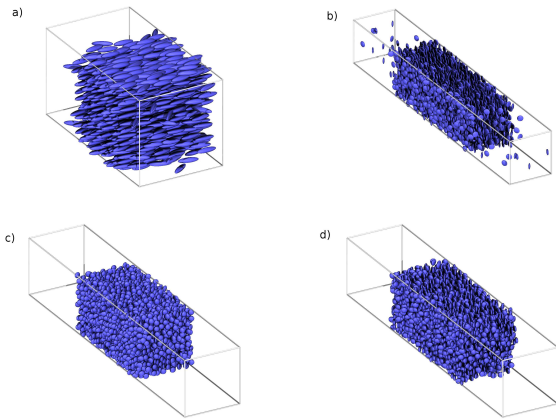


Figure 1: Configuraciones típicas de las simulaciones interfaciales del modelo Gay-Berne con los siguientes parámetros: (a) $\kappa = 4$, $\kappa' = 0.5$, $T^* = 1.20$ y $N = 1372$; (b) $\kappa = 0.3$, $\kappa' = 0.2$, $T^* = 2.50$ y $N = 4116$; (c) $\kappa = 0.5$, $\kappa' = 0.6$, $T^* = 0.40$ y $N = 4116$; y (d) $\kappa = 0.5$, $\kappa' = 1.0$, $T^* = 0.55$ y $N = 4116$.

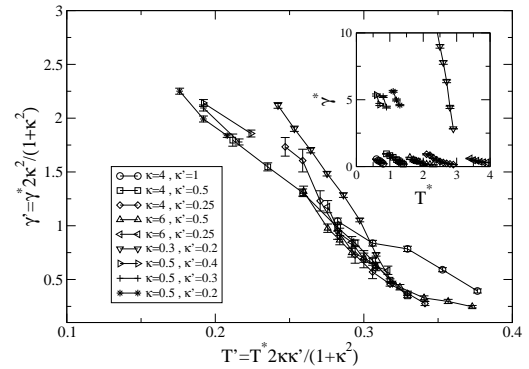


Figure 2: Representación de la tensión superficial nemático-vapor reescalada $\gamma' = 2\kappa^2\gamma^*/(1 + \kappa^2)$ como función de la temperatura reescalada $T' = 2\kappa\kappa'T^*/(1 + \kappa^2)$ en condiciones de anclaje planar: $\kappa = 4$, $\kappa' = 1$ (círculos); $\kappa = 4$, $\kappa' = 0.5$ (cuadrados); $\kappa = 4$, $\kappa' = 0.25$ (rombos); $\kappa = 6$, $\kappa' = 0.5$ (triángulos hacia arriba); $\kappa = 6$, $\kappa' = 0.25$ (triángulos hacia la izquierda); $\kappa = 0.3$, $\kappa' = 0.2$ (triángulos hacia abajo); $\kappa = 0.5$, $\kappa' = 0.4$ (triángulos hacia la derecha); $\kappa = 0.5$, $\kappa' = 0.3$ (cruces) and $\kappa = 0.5$, $\kappa' = 0.2$ (asteriscos). Figura inscrita: Representación de γ^* en función de T^* . El significado de los símbolos es el mismo que en la figura principal.

[1] Luis F. Rull y J. M. Romero-Enrique, Mol. Phys. doi:<http://dx.doi.org/10.1080/00268976.2016.1274437> (2017).