

SIMULACIONES COMPUTACIONALES EN MODELOS EN RETÍCULO DE LÍQUIDOS SOBREENFRIADOS CON FENOMENOLOGÍA VÍTREA

Alejandro Seif y Tomas S. Grigera

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata
Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, Diag. 113 y 64, c.c. 16, suc.4 1900, La Plata, Argentina.
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Argentina.
seifalejandro@inifta.unlp.edu.ar

PALABRAS CLAVE: Montecarlo, Transición Vítrea

Un líquido sobreenfriado [1] es un material en estado líquido a pesar de estar debajo de la temperatura de fusión. Si seguimos bajando su temperatura, nos acercamos al estado vítreo: su viscosidad se vuelve muy alta

al punto de poder ser considerado un sólido amorfo (distinto del cristal).

Los fenómenos cooperativos (de muchas partículas) son relativamente independientes de los detalles del material y junto con el envejecimiento, son una marca distintiva de la transición vítrea.

Estudiar la física compleja de las transiciones vítreas no sólo significa construir los conceptos teóricos y matemáticos, sino desarrollar las técnicas numéricas capaces de capturar los mecanismos relevantes durante la transición, alcanzándolos a mínimo y óptimo costo computacionales, así como las escalas temporales y espaciales en que aparecen.

Mediante simulaciones computacionales de dos modelos en el retículo, escritas por miembros del grupo usando C++/Fortran95, nos interesa estudiar estos fenómenos. Nuestra herramienta de trabajo son las simulaciones Montecarlo, más precisamente utilizando la técnica Montecarlo Cinético (KMC). KMC nos permite investigar procesos que requerirían tiempos muy largos con técnicas convencionales, puesto que el tiempo aumenta proporcionalmente a lo bloqueado que está el sistema en su actual configuración.

Estudiando los modelos propuestos por [2] y [3] fuimos capaces de observar la presencia del fenómeno de envejecimiento cualitativamente. Si bien los sistemas simulados exhiben tiempos de relajación que crecen exponencialmente al aumentar la densidad (como esperábamos), los exponentes de envejecimiento que determinamos resultan ser del orden 0.4-0.8 mientras que la teoría predice un comportamiento que tiende a 1 en la proximidad a la transición vítrea.

Creemos que estos resultados nos están conduciendo a la respuesta de la pregunta: "Si existe, ¿cuál es el espacio de parámetros en que estos modelos de líquidos sobreenfriados presentan un comportamiento vítreo como el de los ya estudiados (y medidos experimentalmente) en la literatura?".

REFERENCIAS.

- [1] A. Cavagna, "Supercooled Liquids for Pedestrians", *Phys. Rep.* 476, **2009**, 51-124.
- [2] M. Pica Ciamarra, M. Tarzia, A. de Candia, A. Coniglio, "Lattice Glass models with no tendency to crystallize", *Phys. Rev. E* 67, **2003**, 057105.
- [3] G. Biroli, M. Mezzard, "Lattice Glass Models", *Phys Rev Lett* 88, **2002**, 025501.