

**Título:** ENTROPY, ORDER AND 2D CONFINEMENT OF HARD PARTICLES

**Nombre:** González Pinto, Miguel

**Universidad:** Universidad Autónoma de Madrid

**Departamento:** Física teórica de la materia condensada

**Fecha de lectura:** 09/05/2017

**Programa de doctorado:** Programa Oficial de Doctorado en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología

**Dirección:**

> **Director:** ENRIQUE VELASCO CARAVACA

> **Codirector:** Yuri Martínez Ratón

**Tribunal:**

> **presidente:** Diego Martín Maza Ozcoidi

> **secretario:** PEDRO TARAZONA LAFARGA

> **vocal:** Paulo Ivo Cortez Teixeira

> **vocal:** MARÍA JOSÉ RUÍZ MONTERO

> **vocal:** JOSÉ ANTONIO CUESTA RUIZ

**Descriptor:**

> FISICA

**El fichero de tesis** no ha sido incorporado al sistema.

**Resumen:** El trabajo tiene como objetivo comprender la compleja fenomenología presente en sistemas bidimensionales de partículas confinadas y que presentan fases de orden de tipo cristal líquido. La tesis está compuesta en líneas generales de dos partes diferenciadas: un estudio teórico de sistemas de partículas duras y un estudio experimental de partículas granulares sometidas a vibración. El enfoque teórico está basado en la teoría del funcional de la densidad (TFD) para partículas duras en la aproximación de orientaciones restringidas (o aproximación de Zwanzig). La TFD ha demostrado ser una teoría que describe muy bien sistemas de partículas densos y altamente estructurados, y son estas características las que buscamos en un marco teórico para estudiar las fases líquido-cristalinas en las que estamos interesados. Para mostrar cuantitativamente cómo funciona la TFD en situaciones de alto confinamiento, hemos incluido una comparación de los resultados obtenidos con dicha teoría con los resultados exactos que se desprenden del método de la matriz de transferencia (MMT) para un sistema de partículas duras cuadradas confinadas en canales estrechos (sólo dos partículas caben en la dirección transversal).

Una vez puesta a prueba la validez de nuestra teoría pasamos a utilizarla en sistemas para los cuales no se pueden obtener resultados exactos. En particular estudiamos las fases líquido-cristalinas que se forman en sistemas de partículas duras rectangulares confinadas en cavidades cuadradas. En función de la relación de aspecto de las partículas, la densidad y el tamaño de la cavidad obtenemos los diagramas de fase del sistema

en los que aparecen diferentes estructuras ordenadas de equilibrio: nemático, columnar, esméctico y cristal. Así mismo comparamos las fases obtenidas con las correspondientes de los sistemas de volumen (bulk) para estudiar la influencia del confinamiento. En un segundo estudio utilizamos el mismo marco teórico para un sistema partículas tridimensionales restringidas a una monocapa. Este sistema puede verse como una mezcla de partículas duras en dos dimensiones en el que las fracciones de las diferentes partículas no están fijadas. En este caso nos centramos en el efecto que tiene la biaxialidad de las partículas en la estabilidad de las diferentes fases ordenadas.

Para finalizar la parte teórica de la tesis presentamos un estudio de la dinámica de formación de fases líquido-cristalinas. Para ello hemos hecho uso de la teoría dinámica del funcional de la densidad, una extensión de la TFD que, bajo algunas aproximaciones, es capaz de caracterizar la evolución de los perfiles de densidad hasta sus estados de equilibrio. En concreto nosotros la hemos aplicado al estudio de formación de estructuras ordenadas en dos situaciones: (i) cuando las fases de volumen son confinadas, y (ii) cuando éstas son perturbadas por la presencia de obstáculos.

La última parte de la tesis está dedicada a un estudio experimental de las propiedades de orden de sistemas granulares de partículas. Para el experimento utilizamos partículas cilíndricas macroscópicas (1 mm de diámetro) que están confinadas en un espacio circular cuasi-bidimensional, es decir, el espacio vertical es tal que puede ser formada una única capa de partículas. Este sistema es vibrado verticalmente y como consecuencia las partículas se mueven presentando una dinámica compleja. Nuestro interés por este tipo de sistemas es que bajo ciertas condiciones éstos se ordenan espontáneamente y presentan numerosas similitudes con los sistemas de partículas de equilibrio, aquellos estudiados de forma teórica en la primera parte de la tesis.