



Casa abierta al tiempo
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
DR. JUAN MORALES CORONA
Jefe del Departamento de Física



CdMx a 3 de marzo de 2025.

DR. ROMAN LINARES ROMERO
Presidente del Consejo Divisional de
Ciencias Básicas en Ingeniería
P R E S E N T E.

Después de haber revisado el informe de actividades realizadas por el **Dr. Luis Mier y Terán Casanueva**, durante su periodo sabático, me permito informarle a usted que, a mi juicio, los objetivos se cumplieron de forma satisfactoria.

De esta manera pongo a su consideración que se incluya en la orden del día de la próxima sesión del Consejo Divisional que usted preside la presentación del informe.

Sin más por el momento, quedo a sus órdenes para cualquier duda o aclaración al respecto.


A T E N T A M E N T E
"CASA ABIERTA AL TIEMPO"



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

CONSEJO DIVISIONAL DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERIA

INFORME DE PERÍODO SABÁTICO

DATOS GENERALES

Nombre del profesor: Luis Mier y Terán Casanueva N° empleado: 334
Departamento: Física Área: Física de Líquidos
Teléfono particular: [REDACTED] Extensión UAM-I: [REDACTED] E-mail: [REDACTED]@xanum.uam.mx

DATOS DEL PERÍODO SABÁTICO SOLICITADO

N° meses solicitados: 18 Fecha de inicio: 3 de julio 2013 Fecha de terminación: 2 meses de 2015
Institución donde se realizará: UAM-I
Depto., Laboratorio, etc.: Área de Física de Líquidos
Domicilio de la institución: _____
Teléfono: _____ Fax: _____ E-mail: _____

OBJETIVOS DEL PERÍODO SABÁTICO

Ver informe

METAS ALCANZADAS EN EL PERÍODO SABÁTICO

- | | | |
|---|---|---|
| <input type="checkbox"/> Memorias in extenso en libro de resúmenes* | <input checked="" type="checkbox"/> Artículos de investigación en revista indexada* | <input type="checkbox"/> Presentaciones en congresos |
| <input type="checkbox"/> Libros o capítulos de libros | <input type="checkbox"/> Grado | <input type="checkbox"/> % Avance de estudios de posgrado |
| <input type="checkbox"/> Otros (especifique): _____ | | |

* Indicar en anexo si se trata de trabajo publicado, aceptado o sometido

TIPO DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS DESARROLLADAS

(Indique aquellas relacionadas con las actividades desarrolladas)

- Investigación
- Docencia
- Difusión
- Formación académica
- Formación profesional
- Entrenamiento técnico
- Otros (especifique): _____

RESUMEN DEL PLAN DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS DESARROLLADAS

(El llenado de esta sección no sustituye el informe detallado de actividades)

Se realizaron investigaciones sobre un sistema bidimensional de discos rígidos y su transición hexática. Se utilizó una simulación de computadora en el método de dinámica molecular de 10^7 discos para estudiar la separación de los efectos posicionales y los efectos orientacionales. Se encontró un método que permite dicha separación y se desarrolló una Ecuación de Estado analítica del sistema de discos rígidos.

PARA USO DEL JEFE DE DEPARTAMENTO

Después de haber evaluado el informe detallado de actividades del período sabático del interesado según los lineamientos establecidos para tal efecto; informo al Consejo Divisional que:

- Los objetivos SE cumplieron satisfactoriamente
- Los objetivos SE cumplieron parcialmente
- Los objetivos NO se cumplieron
- NO se cumplió el propósito del sabático



Firma del Jefe de Departamento

28-Feb-2025

Fecha

PARA USO DEL CONSEJO DIVISIONAL

El Consejo Divisional, en su Sesión No. _____ del _____ sobre el Período sabático del interesado acordó que:

- Los objetivos SE cumplieron satisfactoriamente
- Los objetivos SE cumplieron parcialmente
- Los objetivos NO se cumplieron
- NO se cumplió el propósito del sabático

Secretario del Consejo Divisional

*Además de este formato-resumen, el interesado deberá entregar su Informe detallado de actividades junto con la documentación probatoria correspondiente.

Ciudad de México a 27 de febrero de 2025.

Dr, Román Linares Romero
Presidente del Consejo Divisional de Ciencias Básicas e Ingeniería
Presente

Por medio de este conducto me permito enviarte el Informe correspondiente a mi periodo sabático. Dicho periodo inició el día 3 de julio de 2023 y concluyó el día 2 de enero de 2025. Lo anterior para que, de acuerdo con la Legislación Universitaria, lo haga del conocimiento del **Consejo Divisional de CBI.**

Atentamente



Luis Mier y Terán Casanueva
Departamento de Física
Universidad Autónoma Metropolitana,
Unidad Iztapalapa

ccp, Dr. Juan Morales Corona. Jefe del Departamento de Física.
ccp. Dr. José Antonio Moreno.Razo. Jefe del Área de Física de Líquidos

PROGRAMA DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS A DESARROLLAR DURANTE EL PERIODO SABÁTICO

Durante los últimos años se han venido estudiando sistemas en equilibrio compuestos por partículas que interactúan mediante potenciales infinitamente repulsivos en dos y en tres dimensiones. Se conoce bien que estos sistemas, por no tener atracción entre sus partículas, no tienen una transición de fase líquido-vapor. Sin embargo sí tienen transiciones del tipo fluido-sólido de tipo entrópico. Tal es el caso de la transición de fases bidimensional fluido-hexático. Siendo el estado hexático una fase intermedia entre el fluido y el sólido. Dichas fase ha logrado tener una organización orientacional superior a la del líquido.

Para el estado líquido, es decir un fluido de alta densidad, las ecuaciones integrales de la física de fluidos han podido tener la capacidad de determinar la estructura de fluidos. Sin embargo, el problema de la transición al estado hexático conlleva el tratamiento de estructuras con orientaciones particulares cuyo tratamiento mecánico estadístico requiere de ángulos para el tratamiento de las orientaciones relativas. Esto causa dificultades especiales que llevan a tratamientos teóricos muy complejos.

Durante el periodo sabático solicitado, espero avanzar en la escritura de artículos de investigación en los que se intentan otras aproximaciones para el tratamiento de esos sistemas, particularmente en dos dimensiones. Es posible además proponer ecuaciones de estado aproximadas que incluyan la mencionada transición de fases para representar la energía libre de Helmholtz y la presión en términos de la densidad de esos sistemas.

Adicionalmente, la tesis para la obtención del grado de Maestría de Klaus Peter Grosse lleva a otra línea de trabajo sobre materia activa. La investigación hasta ahora está basada en las colisiones que realiza una partícula activa, que introduce alguna energía al sistema (muy poca de modo que se pueda considerar en un estado de quasi equilibrio), con otras partículas que son pasivas. Desde luego que esto introduce una granularidad al sistema que no estaría presente en el caso de la materia continua. Se trata entonces de estudiar las diferencias entre un caso y el otro.

INFORME PERIODO SABÁTICO

LUIS MIER Y TERÁN CASANUEVA

Durante el periodo sabático realizado del 3 de julio de 2023 al 2 de enero de 2025 continué desarrollando investigaciones sobre el sistema bidimensional de discos duros (HD) en equilibrio, que a densidades altas presenta una transición de fases de primer orden, la conocida transición hexática. Esa transición ha dado lugar a grandes controversias y al obtención del Premio Nobel de Física en 2016 a M. Kosterlitz, D. Thouless y D. Haldane [1-3]

El llamado estado hexático se presenta en sistemas bidimensionales, como en HD y cuasi bidimensionales como en los cristales líquidos. Posee características muy importantes que ayudan a entender la transición del fluido al estado sólido. El hexático es un estado de la materia que tiene propiedades intermedias entre las de un fluido y las de un sólido cristalino. Como los fluidos, tiene una correlación posicional de corto alcance y como los cristales una correlación orientacional de cuasi largo alcance.

Lo anterior da lugar a dos parámetros de orden, el primero transnacional y el segundo orientacional. Es importante mencionar que un disco central puede acomodar, como máximo, a seis discos que serían sus vecinos más cercanos, por lo que microscópicamente el estado hexático tiene simetría hexagonal.

El estado hexático ha sido estudiado ampliamente por Krauth y sus colaboradores quienes desarrollaron un procedimiento de Monte Carlo el EHMC para mostrar mejor el espacio fase del sistema de HD [4-7]. Los resultados de su trabajo son consistentes con la interpretación de la teoría de Kosterlitz, Thouless, Halperin, Nelson y Young (KTHNY) [1-3] que predice la transición de fases como de “dos pasos”. Lo anterior quiere decir que antes de fundirse en un líquido isotrópico, el sólido de HD pasa por el estado hexático.

En el primer artículo del que se informa [8], se discuten los resultados de una simulación de computadora de dinámica molecular (MD) hecha por los autores para tres cantidades de discos en la caja central: $N=4,000$; $100,000$ y $1,000,000$. Los números anteriores fueron elegidos para cubrir

tres órdenes de magnitud distintos, ya que se han discutido mucho los efectos inducidos en los resultados por el tamaño finito del sistema.

En el mismo trabajo [8] se hace la separación de las contribuciones posicionales y las orientaciones y se presentan histogramas de frecuencia del parámetro de orden orientacional calculado mediante los polígonos de Voronoi resultado de las configuraciones creadas en las corridas de DM. Se propone una forma de llegar a la contribución orientacional de la termodinámica del sistema a partir del parámetro de orden orientacional. Lo anterior da lugar a la presencia de una sigmoide del tipo que ocurre en la ecuación de estado (EoS) de van der Waals y que es interpretada como la presencia de una transición de fase de primer orden. En ese caso para una transición líquido-vapor.

Un resultado importante consiste en que los resultados de MD muestran un ordenamiento microscópico paulatino a una densidad menor que la correspondiente al inicio de la transición de fase fluido-hexático. Es decir, el sistema de HD a una densidad un poco más baja, comienza a presentar regiones microscópicas anisotrópicas. Eso quiere decir que la transición de fases hexática no es totalmente abrupta sino que se va preparando desde antes a una densidad más baja.

En el mismo trabajo [8] se utiliza la contribución orientacional de la presión del sistema para ver cuatro regímenes con efectos del ordenamiento que ocurre antes de llegar a las densidades del sólido. Para hacer esto, se requiere una aproximación suficientemente precisa para representar la EoS de un fluido isotrópico. En nuestro caso, se utilizaron los coeficientes viriales de una expresión cerrada, obtenida mediante un procedimiento similar al usado por Carnahan-Starling que ha sido truncada a veinte coeficientes. Esta expresión, válida únicamente para un fluido isotrópico, permite medir las desviaciones debidas al ordenamiento orientacional del sistema de HD, pues toma en cuenta los resultados de la simulación, incluyendo la contribución orientacional a las propiedades termodinámicas. Así, los valores obtenidos dan lugar a la aproximación CS2D.

La EoS de un fluido isotrópico puede ser interpretada de dos formas: mientras la EoS del fluido isotrópico coincida con los datos de simulación,

podemos afirmar que en esas densidades el fluido "real" es isotrópico, cuando los datos del fluido isotrópico dejen de coincidir con los datos de simulación, es que el fluido "real" presenta anisotropías y la expresión anterior será considerada únicamente como una continuación analítica útil para el cálculo de los efectos orientacionales.

En el segundo trabajo publicado se analizan, además de la aproximación CS2D, los resultados de tres expresiones conocidas que tienen la forma de los llamados aproximantes de Padé y que expresan, cada una de manera aproximada, la EoS de un sistema isotrópico de HD. Las tres aproximaciones fueron propuestas a lo largo del tiempo. Esas expresiones se deben a D. Henderson, J. R. Solana, y a H. Liu- Se puede ver que las tres aproximaciones de Padé dan resultados parecidos a los de CS2D y la región de ordenamiento previo no desaparece. El trabajo termina proponiendo una forma, que basada en el método seguido para la obtención de la ecuación de Carnahan-Starling del fluido isotrópico minimiza la separación entre la ecuación virial truncada y los datos de simulación obtenidos por la DM. Los valores obtenidos dan lugar a la aproximación CS2DP.

En la tercera parte del trabajo, se desarrollaron expresiones analíticas para la EoS y la energía libre de Helmholtz del sistema de HD, incluyendo los efectos orientacionales causantes de la transición hexática. Esas expresiones analíticas está basadas en los trabajos anteriores, específicamente toman la expresión CS2DP del fluido isotrópico y las cuatro rectas mencionadas antes para construir las expresiones CS2DO que ya incluyen los efectos orientaciones descritos antes. Esta parte del trabajo ha sido sometida a publicación en la revista Molecular Physics [10]. En este momento se encuentra en el proceso de revisión para su posible publicación.

Referencias

[1] J.M. Kosterlitz and D.J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. 6 (7), 1181 (1973). doi:10.1088/0022-3719/6/7/010

[2] B.I. Halperin and D.R. Nelson, Phys. Rev. Lett. 41 (2), 121 (1978). doi:10.1103/PhysRevLett.41.121

[3] D.R. Nelson and B.I. Halperin, Phys. Rev. B 19 (5), 2457 (1979). doi:10.1103/PhysRevB.19.2457
[10] A.P. Young, Phys. Rev. B 19 (4), 1855 (1979). doi:10.1103/PhysRevB.19.1855

[4] E.P. Bernard, W. Krauth and D.B. Wilson, Phys. Rev. E 80 (5), 056704 (2009). doi:10.1103/PhysRevE.80.056704

[5] E.P. Bernard and W. Krauth, Phys. Rev. Lett. 107 (15), 155704 (2011). doi:10.1103/PhysRevLett.107.155704

[6] S.C. Kapfer and W. Krauth, Phys. Rev. Lett. 114 (3), 035702 (2015). doi:10.1103/PhysRevLett.114.035702

[7] Y. Nishikawa, W. Krauth and A.C. Maggs, Phys. Rev. E 108 (2), 10143 (2023). doi:10.1103/PhysRevE.108.024103

[8] Luis Mier-y-Terán, J. Munguía-Valadez & J. Antonio Moreno-Razo (05 Dec 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, DOI: 10.1080/00268976.2023.2288702

To link to this article: <https://doi.org/10.1080/00268976.2023.2288702>

[9] Luis Mier-y-Terán (26 Jun 2024): On the equation of state of the hard disk system: the fluid-hexatic phase transition, Molecular Physics, DOI: 10.1080/00268976.2024.2368147

To link to this article: <https://doi.org/10.1080/00268976.2024.2368147>

[10] Luis Mier-y-Terán. Analytical expressions for the Equation of State and Helmholtz Free Energy of a fluid of Hard Disks: the hexatic phase transition. Submitted to Molecular Physics (2025).

