

Simulación del diagrama de fases y autoensamblado de partículas coloidales anisótropas

Eva G Noya, Günther Doppelbauer, Emanuela Bianchi, Gerhard Kahl
Instituto de Química Física Rocasolano, CSIC, Madrid, España
TU Wien, Wiedner Hauptstrasse 8-10/136, 1040, Wien, Austria

En los últimos años se han producido grandes avances en la ciencia de coloides que han permitido la síntesis de partículas coloidales anisótropas con un elevado control tanto en la forma de las partículas como en el potencial de interacción¹. Estos experimentos abren la posibilidad de fabricar materiales que se autoensamblan diseñando partículas con interacciones específicas que formen la estructura deseada. Sin embargo para ello es necesario conocer el comportamiento de fase en función de la anisotropía de las interacciones, para lo cual la simulación molecular se perfila como una herramienta de gran utilidad. Con este objetivo hemos abordado el estudio del diagrama de fases de un modelo sencillo de partículas coloidales esféricas decoradas con cuatro sitios de interacción atractivos cuya disposición viene determinada por un parámetro que nos permite ir de una geometría tetráedrica alargada a una más achatada²⁻⁴. El diagrama de fases de este sistema se ha calculado utilizando una combinación de varios métodos. Primero realizamos una

búsqueda de las estructuras cristalinas más estables a $T=0$ con un algoritmo de optimización y posteriormente calculamos el diagrama de fases a temperatura finita mediante el cálculo de energías libres de dichas estructuras. Siguiendo este procedimiento hemos identificado una gran variedad de estructuras sólidas e investigado su estabilidad dependiendo de la geometría de los sitios atractivos en la superficie de las partículas^{4,7}.

¹ A.B. Pawar, I. Kretzschmar, *Macromol. Rapid Commun.* **31**, 150 (2010).

² J.P.K.Doye et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 2197 (2007).

³ E.G. Noya, C. Vega, J.P.K. Doye y A.A. Louis, *J. Chem. Phys.* **132**, 234511 (2010).

⁴ G. Doppelbauer, E.G. Noya, E. Bianchi, y G. Kahl, enviado (2012).

⁵ G. Doppelbauer, E.G. Noya, E. Bianchi, y G. Kahl, *J. Phys.: Condens. Matt.* (2012).