

Estudio de simulación por ordenador de líquidos iónicos en las cercanías de la transición vítrea

Álvaro Rodríguez-Rivas[†], José Manuel Romero-Enrique[‡] y Luis F. Rull
*Universidad de Sevilla, Dept. de Física Atómica, Molecular y Nuclear,
Avenida Reina Mercedes s/n, 41012, Sevilla, Spain*

Presentamos un trabajo de simulación por ordenador de Dinámica Molecular en el colectivo NPT sobre un modelo simple de líquidos iónicos superenfriados cercanos a la transición vítrea. El líquido iónico se ha modelado de la siguiente forma: los aniones son considerados como esferas blandas cargadas, y los cationes como cadenas completamente flexibles de esferas blandas tangentes, con una carga positiva situada en el centro de uno de los monómeros finales. En este estudio hemos considerado cadenas de hasta 5 monómeros. La transición vítrea se ha caracterizado mediante diferentes propiedades de transporte, tales como los coeficientes de autodifusión y viscosidad^{1,2}, así como las diferentes funciones de correlación temporal asociadas. Asimismo, hemos considerado otras funciones relacionadas con la presencia de dinámica heterogénea³, como son la susceptibilidad dinámica⁴ y el parámetro no-gaussiano⁵. Hemos observado una alta asociación entre monómeros cargados, y cierto grado de segregación entre monómeros cargados y neutros. A cierta presión y temperatura, los tiempos de relajación decrecen cuando se incrementa la longitud de la cadena, indicando una reducción de la temperatura

de transición vítrea a una presión fija. Los resultados del coeficiente de viscosidad sugiere que los líquidos iónicos son generadores de vidrios frágiles.

[†] arodriguezrivas@us.es

[‡] enrome@us.es

¹ M.H. Kowsari, S. Alavi, M. Ashrafizaadeh, y B. Najafi, J. Chem. Phys **130**, 014703 (2009).

² C.E. Resende, y L.C. Gomide, J. Mol. Struct.: TheoChem **847**, 93 (2007).

³ L. Berthier, G. Biroli, J.-P. Bouchaud, y R. L. Jack en *Dynamical Heterogeneities in Glasses, Colloids and Granular Media*. International Series of Monographs on Physics **150** (Oxford University Press, Oxford, 2011); arXiv: 0901.0493, (2010).

⁴ L. Berthier, G. Biroli, J.-P. Bouchaud, L. Cipelletti, D. El Masri, D.L'Hôte, F. Ladieu, y M. Pierno, Science **310**, 1797 (2005).

⁵ S.S. Sarangi, W. Zhao, F. Müller-Plathe, y S. Balasubramanian, Chem. Phys. Chem. **11**, 2001 (2010).