



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ZACATECAS
"Francisco García Salinas"
COORDINACIÓN DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO
29/11/2016



Informes del Investigador: EDUARDO GARCIA SANCHEZ Semestre: 1617snon

Registro: UAZ-2016-37009 Avance 100%

Proyecto

Predicción Teórica de la Coexistencia Vapor-Líquido de los Cristales Líquidos

Informes del proyecto		
Tipo de producción	Título	Fecha
MEMORIAS Y MEMORIAS EN EXTENSO	Predicción Teórica del comportamiento densidad contra temperatura en la transición Isotrópico-Nemático de los Cristales Líquidos 5CB y MBBA	02/10/2016
Tesis de Licenciatura	Simulación de la Coexistencia Vapor-Líquido y de la Presión de Vapor de los Cristales Líquidos 5CB y MBBA	02/12/2016

Registro: UAZ-2016-37138 Avance 50%

Proyecto

Diseño de un software multimedia para niños hipoacúsicos

Aval Consejo de Unidad

Recibido de Investigación y Posgrado

COORDINACIÓN DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ZACATECAS

Informe Final

DATOS GENERALES

DATOS PERSONALES

Nombre del investigador responsable: Dr. Eduardo García Sánchez
Nombre del investigador colaborador: Dr. Luis Humberto Mendoza Huizar
Título del proyecto de investigación: Predicción Teórica de la coexistencia Vapor-Líquido de los Cristales Líquidos
Clave del Proyecto (registro UAZ): UAZ-2016-37009
Fecha de inicio: 10 de Diciembre de 2015
Fecha de término: 10 de Diciembre de 2016
Horas dedicadas al proyecto: 10 horas
Unidad Académica: Unidad Académica de Ingeniería Eléctrica
Periodo del Informe: Junio 2016 – Diciembre 2016
Correo electrónico: eduardogarciasanchez@gmail.com
Grado estimado de avance: 100 %

AVANCE DEL PROYECTO

Acciones realizadas:

- 1.- Durante esta primera etapa se implementó y se aplicó un programa que permite optimizar el funcional de la Energía Libre de Helmholtz para analizar la coexistencia vapor-líquido para analizar el comportamiento experimental presión contra temperatura para el MBBA y 5CB.
- 2.- Se analizo con herramientas computacionales, el cálculo de varias propiedades de los diferentes Cristales Líquidos por los métodos PM3, PM6, DFT y la interacción entre varias moléculas para dichos cristales líquidos.

Resultados obtenidos:

- 3.- En esta etapa se efectuaron las simulaciones para predecir la coexistencia Vapor-Líquido.

Contribución Técnica:

En el presente trabajo se presenta un estudio teórico para predecir el comportamiento experimental presión contra temperatura en la coexistencia vapor-líquido de los Cristales Líquidos 5CB y MBBA. Adicionalmente se presentan los resultados obtenidos para determinar el volumen molecular, la estructura de mínima energía y la densidad electrónica ($0.002 \text{ e} / \text{Å}^3$ y $0.08 \text{ e} / \text{Å}^3$) utilizando métodos semiempíricos PM3, PM6 y Teoría de Funcionales de la Densidad.

Impacto social:

En virtud de que el estudio es meramente teórico, no es posible precisar un beneficio directo para la sociedad, es decir, es solo un planteamiento teórico, pero no es una ley o una técnica estandarizada.

Mecanismo de transferencia:

La realización de este proyecto permitirá aplicar métodos de optimización que permitan reducir de manera significativa el tiempo de cómputo para el cálculo de diagramas de fase teóricos. Dando con esto, una técnica más rápida que permita analizar el comportamiento de los cristales líquidos.

Equipo de trabajo acciones realizadas:

CENTRO UAZ

Unidad Académica de Ingeniería Eléctrica

Unidad Académica de Ingeniería Eléctrica

Unidad Académica de Ingeniería Eléctrica

Unidad Académica de Docencia Superior

Unidad Académica de Docencia Superior

INVESTIGADOR

Dra. Ileri Aydee Sustaita Torres

M.C. José Manuel Cervantes Viramontes

M.I.T.C. Miguel Ángel García Sánchez

Dra. Verónica Torres Cosío

Dra. Sahara Araceli Pereyra López

INSTITUCION

Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo

INVESTIGADOR

Dr. Luis Humberto Mendoza Huizar

PRODUCTOS ACADÉMICOS OBTENIDOS

Se presentó un trabajo en el congreso nacional de física 2016

FORMACIÓN DE RECURSOS HUMANOS

1 tesis de licenciatura terminada

FINANCIAMIENTO EXTERNO

Externo:	\$	0.00
Total:	\$	0.00
Monto ejercido:	\$	0.00
Saldo:	\$	0.00

OBSERVACIONES: En el presente proyecto se tiene un avance del 100 %.

Zacatecas, Zac., a 29 de Noviembre de 2016

Firma de aval del Consejo de Unidad



Dr. Eduardo García Sánchez
Responsable del Proyecto