

# Transición de vidrio a cristal en esferas duras mediante avalanchas de partículas

P. Montero de Higes<sup>1</sup>, P. Rosales-Pelaez<sup>1</sup>, P. N. Pusey<sup>2</sup>, E. Sanz<sup>1</sup> y Chantal Valeriani<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Química Física I, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, Spain

<sup>2</sup>SUPA, School of Physics and Astronomy, University of Edinburgh, Edinburgh EH9 3FD, United Kingdom

<sup>3</sup>Departamento de Estructura de la Materia, Física Térmica y Electrónica, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, Spain

Un vidrio es un sólido amorfo fuera del equilibrio termodinámico, formado cuando un líquido se subenfía lo suficiente sin que cristalice en el proceso. En este estado no hay difusión y el movimiento de las partículas se limita a distancias que no superan el propio diámetro de éstas. Dada la inestabilidad termodinámica que presenta, un vidrio tratará, no sin dificultades, de minimizar su energía mediante un proceso de cristalización (devitrificación). El sistema más adecuado para estudiar los fundamentos de la devitrificación son las esferas duras.

Es sabido que los vidrios de esferas duras cristalizan mediante avalanchas de partículas [1] y hay indicios de que regiones de bajo orden cristalino o pseudo-cristalino y de baja densidad [2] pueden jugar un papel importante. También se ha avanzado en aspectos técnicos de la simulación de vidrios de esferas duras [3, 4] lo que nos permite acceder a más información relevante en un menor tiempo de computación.

Sin embargo, ni las avalanchas han sido caracterizadas más allá de su cooperatividad, ni su origen está bien definido. Recientemente, hemos observado cómo algunas configuraciones vítreas son mucho más propensas a la cristalización que otras, lo que evidencia un origen estructural. Para comprender qué hace a una configuración propensa a cristalizar se estudia qué fenómenos locales pueden alargar la esperanza de vida de un vidrio o de lo contrario, acortarla. También se busca qué características comparten las configuraciones propensas y en cuáles se diferencian de las no propensas a la cristalización. Entre estas posibles características a estudiar encontramos la rigidez local, la distribución de fuerzas o la actividad local.

Destapando estas incógnitas, podemos entender la devitrificación y aprender a preservar los vidrios por más tiempo, lo que sería de utilidad en muchos ámbitos tecnológicos.

[2] T. Yanagishima, J. Russo, and H. Tanaka, Common mechanism of thermodynamic and mechanical origin for ageing and crystallization of glasses, *Nat. Commun.* **8**, 15954 (2017).

[3] P. Montero de Higes, P. Rosales-Pelaez, C. Valeriani, P. N. Pusey, and E. Sanz, Brownian *versus* Newtonian devitrification of hard-sphere glasses, *Phys. Rev. E* **96**, 020602(R) (2017).

[4] P. Rosales-Pelaez, P. Montero de Higes, E. Sanz, and C. Valeriani, Avalanche mediated devitrification in a glass of pseudo hard-spheres, *J. Stat. Mech.* **2016**, 094005 (2016).

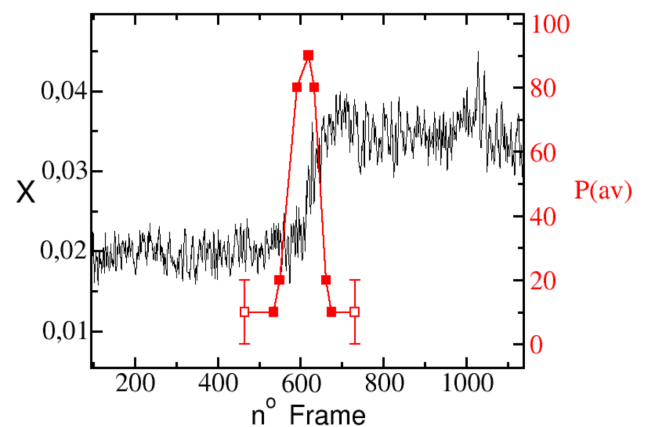


Fig. 1. Cristalinidad del sistema ( $X$ , en negro, escala izquierda) y propensidad de avalancha ( $P(av)$ , en rojo, escala derecha) frente a las correspondientes configuraciones ( $\propto t$ ). Podemos observar un incremento en la cristalinidad que coincide con zonas de mayor propensidad de avalancha lo que sugiere una ruptura de estabilidad mecánica.

[1] E. Sanz, C. Valeriani, E. Zaccarelli, W. C. K. Poon, M. E. Cates, and P. N. Pusey, Avalanches mediate crystallization in a hard-sphere glass, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **111**, 75-80 (2014).