

Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa

DEPARTAMENTO DE FÍSICA



INFORME DE PROYECTO TERMINAL II: INVESTIGACIÓN TEÓRICA

*Solución numérica de las ecuaciones cinéticas de mezclas de nanopartículas
tipo pozo cuadrado y nemáticos*

Autores:

Montoya Martín Luis Ricardo

Baza Medina Raquel

Asesor :

Dr. Orlando Guzmán López

Junio 2021

Índice

1. Introducción	4
1.1. Objetivos	5
2. Antecedentes: Análisis de estabilidad lineal	5
3. Marco Teórico	6
3.1. Cristales líquidos	6
3.2. Potencial de Pozo cuadrado	6
3.3. Ecuaciones dinámicas: Modelos A, B y C	7
3.3.1. Modelo A	7
3.3.2. Modelo B	7
3.3.3. Modelo C: nuestro modelo de interés	8
3.4. Solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales	9
3.4.1. Algoritmo de diferencias finitas	9
4. Metodología	10
4.1. Energía libre $f_{s\omega}$ de NP's tipo pozo cuadrado	10
4.1.1. Coeficientes A_1 y A_2	10
4.2. Potencial químico de exceso sobre el gas ideal	11
4.3. Cálculo de ω_{HS}	12
4.4. Adimensionalización	13
4.4.1. Adimensionalización de la ecuación para s	13
4.4.2. Adimensionalización de la segunda ecuación	14
4.5. Método numérico	14
5. Resultados	16
5.1. Comparación al cambiar el $\text{sgn}(r)$	16
5.2. Comparación al variar el alcance del pozo cuadrado	18
5.2.1. Concentración	18
5.2.2. Parámetro de orden	19
5.3. Comparación al cambiar la Temperatura	20
5.4. Comparación al cambiar la longitud de onda de la perturbación	21
5.4.1. Concentración	22

5.4.2. Parámetro de orden	23
5.5. Comparación al cambiar la cantidad adimensional R	24
5.6. Perturbaciones con dos ondas planas senoidales perpendiculares	25
5.6.1. Comparación al cambiar el $\text{sgn}(r)$	25
5.6.2. Comparación al variar el alcance del pozo cuadrado	27
5.6.3. Comparación al cambiar la Temperatura	28
5.6.4. Comparación al cambiar la longitud de onda de la perturbación	29
5.6.5. Comparación al cambiar la cantidad adimensional R	30
6. Conclusiones	32
7. Anexos	33

Agradecimientos

Agradecemos al Dr. Orlando Guzmán López por el apoyo brindado durante el presente proyecto. Gracias a nuestros compañeros Juan, Gael y Erick del área de líquidos por su guía y apoyo. A la UAM Iztapalapa por todos los conocimientos brindados a lo largo de estos años. A nuestros compañeros y amigos de la universidad. A Marco, Lolis, Marco chico, Gaby, Alicia, Sarilla y Toé por su apoyo incondicional y sin dependencia temporal.

Resumen

En el presente trabajo estudiamos las condiciones de segregación y dispersión de nanopartículas modeladas como partículas tipo pozo cuadrado (SW) mezclados con cristal líquido pentilcianobifenil (5CB). Se han resuelto numéricamente las ecuaciones del modelo C con el fin de conocer la evolución de los campos conservado y no conservado (concentración y parámetro de orden). En el área de física de líquidos se han realizado investigaciones modelando nanopartículas como esferas duras, sin embargo, este modelo no considera la fuerza de atracción de corto alcance entre nanopartículas, por ello en esta investigación involucramos la energía asociada al pozo cuadrado (SW). Al resolver la dinámica, hemos observado que los campos siempre se mantienen estables bajo perturbaciones en caso de que las NP's se modelen con un pozo cuadrado de corto alcance. Sería oportuno realizar experimentos con perturbaciones senoidales para así comparar con los resultados simulados.

1. Introducción

Mediante técnicas de análisis de estabilidad lineal, hemos estudiado las condiciones en que un fluido mesogénico en el que se han dispersado nanopartículas (que interactúan mediante el potencial de pozo cuadrado) presenta inestabilidades para perturbaciones tipo onda plana con longitudes de onda específicas y para diversos valores del alcance espacial del potencial. Se confirmó que, de manera similar al caso del potencial de Lennard-Jones, en el modelo C de Halperin y Hohenberg para las ecuaciones cinéticas de evolución del sistema, la contribución volumétrica a la energía libre de las NPs de Lennard-Jones presenta valores negativos del coeficiente (T) en el término cuadrático en la concentración de NPs, lo que provoca inestabilidades para perturbaciones armónicas de cualquier longitud de onda. Este cambio de signo está relacionado directamente con la existencia de la coexistencia líquido-vapor en sistemas de Lennard-Jones y de pozo cuadrado. Ya que en el potencial de Lennard-Jones no es posible alterar independientemente el radio repulsivo y el radio atractivo de las fuerzas de interacción, proponemos en este proyecto sustituir en el modelo C el término cuadrático directamente con la ecuación fundamental para la energía libre de un fluido de pozo cuadrado, con diferentes valores del alcance de las fuerzas atractivas. Aplicando los resultados del análisis de estabilidad lineal para este nuevo modelo, se resolverán numéricamente las ecuaciones diferenciales parciales no-lineales para observar el proceso de separación bajo la influencia de las interacciones atractivas de pozo cuadrado de diversos alcances.

1.1. Objetivos

- Modificar el modelo de energía libre del modelo C para incorporar la energía libre de pozo cuadrado (square well, SW) más allá del término cuadrático en la concentración de NPs
- Analizar cómo cambian las condiciones de estabilidad por efecto de los términos adicionales en la energía libre de SW.
- Resolver numéricamente el sistema de ecuaciones diferenciales parciales no-lineales que se obtendrá del nuevo modelo de energía libre del sistema, para observar el proceso de separación bajo la influencia de las interacciones atractivas SW de diversos alcances.

2. Antecedentes: Análisis de estabilidad lineal

En el proyecto terminal pasado, se hizo un análisis de estabilidad lineal de cristales líquidos nemáticos en presencia de NPs con interacciones de pozo cuadrado de corto alcance. Se estudió la estabilidad del sistema al ser sometido a perturbaciones senoidales a distintos números de onda λ . En análisis lineal se obtuvieron los siguientes resultados:

- Si $\text{sgn}(r) + c_0 > 0$ Los modos normales de cualquier número de onda k serán estables.
- Si $\text{sgn}(r) + c_0 < 0$ Existe una longitud de onda crítica $\lambda_c = \frac{2\pi}{\sqrt{1-c_0}}$ (Asociado al número de onda k por $k = \frac{2\pi}{\lambda}$) tal que perturbaciones en el parámetro de orden s se volverán inestables para perturbaciones con una longitud de onda **mayor** a la longitud de onda crítica λ_c
- La estabilidad en la concentración depende fuertemente del alcance del pozo cuadrado. Tanto es así, que para un pozo con un alcance de $\lambda = 1.1$ se obtuvo estabilidad en el intervalo experimental (298K - 308K) al aplicarse una perturbación de cualquier número de onda k . Mientras que, para un alcance de pozo con una $\lambda \geq 1.2$ solo hay inestabilidad debida a la segregación de nanopartículas en perturbaciones de todas las longitudes de onda en el mismo intervalo de temperatura experimental.

Por consiguiente, será interesante hacer una comparación entre los resultados del analisis en el régimen lineal con los resultados del presente proyecto, los cuales consideran los términos no lineales.

3. Marco Teórico

3.1. Cristales líquidos

Los cristales líquidos son un estado de la materia que posee simultáneamente propiedades de líquidos y sólidos. En los cristales líquidos las moléculas son anisótropas, ordenándose de tal manera que se pueden clasificar con base en ello. Dicha característica es importante pues en el presente trabajo se considerará la fase nemática, tal que, el cristal líquido (CL) se ordena de manera orientacional. Para describir cuantitativamente el grado de orden de un cristal líquido nemático se usará un parámetro de orden conocido como nematización, que queda definido como sigue:

$$S = \frac{1}{2} \langle 3(\hat{k} \cdot \hat{n})(\hat{k} \cdot \hat{n}) - 1 \rangle \quad (1)$$

De otra manera se puede expresar como:

$$S = \frac{3}{2} \langle \cos^2(\theta) - \frac{1}{3} \rangle \quad (2)$$

Donde \hat{k} es un vector unitario cuya orientación está dada por el eje más largo de los mesógenos y \hat{n} es el vector director de la fase y se direcciona a lo largo del eje de orientación privilegiada en el cristal líquido, además, θ , es el ángulo entre los vectores \hat{k} y \hat{n} . Para los posibles valores de S , el caso de la fase isotrópica será $S \approx 0$. Si S es positivo las moléculas tienden a alinearse con su eje director, por otro lado, si S es negativo las moléculas se alinean perpendicularmente al eje director.[7]

3.2. Potencial de Pozo cuadrado

El análisis de estabilidad lineal se llevó a cabo usando la energía libre de un pozo cuadrado (SW), siendo que el pozo cuadrado para partículas esféricas y de diámetro σ que están separadas una distancia r viene dado por:

$$\phi(r) = \begin{cases} \infty & r \leq \sigma \\ -\epsilon & \sigma < r \leq \lambda\sigma, \\ 0 & r > \lambda\sigma \end{cases} \quad (3)$$

Donde ϵ es la profundidad del pozo cuadrado y λ es proporcional a la anchura de la región con energía potencial negativa. [9]

3.3. Ecuaciones dinámicas: Modelos A, B y C

Se estudió la separación de fases de la mezcla de nanopartículas de tipo pozo cuadrado y cristales líquidos. Se hizo uso del **modelo C**, en el cuál se consideran un los modelos A y B acoplados.[5]

- **Modelo A:** Campo no conservado (Parámetro de orden S).
- **Modelo B:** Campo conservado (Densidad de nanopartículas ρ).
- **Modelo C:** Acoplamiento de los modelos A y B.

3.3.1. Modelo A

Para este modelo, se hace un desarrollo en serie de la energía libre del cristal líquido como se presenta a continuación [5]:

$$\mathcal{F}_A[S(\vec{r}, t)] = \int \left(\frac{\kappa(T)}{2} |\nabla S|^2 + \frac{r(T)}{2} S^2 - \frac{w}{3} S^3 + \frac{u}{4} S^4 \right) dV \quad (4)$$

Como hacemos estudio de un sistema bidimensional, el término cúbico en S no contribuye a la energía libre y se toma el caso $w = 0$. En el modelo se propone que la derivada temporal del parámetro de orden sea proporcional a la derivada funcional de la energía libre del sistema con respecto al campo no conservado.[5]

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\Gamma_S \left(\frac{\delta \mathcal{F}_A}{\delta S} \right) = -\Gamma_S [-\kappa \nabla^2 S + rS + uS^3] \quad (5)$$

donde Γ_S es inversamente proporcional al tiempo de relajación del cristal líquido.

3.3.2. Modelo B

En el presente modelo, se tiene la expresión para la energía libre de las nanopartículas SW análoga a la ecuación (4), la cual se puede escribir como una energía libre aproximada de la forma:

$$\mathcal{F}[\rho(\vec{r}, t)]_B = \int dV f_{sw}(\rho, T) \simeq \int dV \frac{\omega(T)}{2} \rho^2 \quad (6)$$

El término dentro de la integral es la energía por unidad de volumen de un fluido de nanopartículas al que llamaremos f_{sw} ; mientras que $\frac{\omega(T)}{2} \rho^2$ es un término de un desarrollo en serie de Taylor, de la energía f_{sw} , truncado a segundo orden. El modelo B nos dice que la ecuación dinámica para la concentración ρ es:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \left[-\Gamma_c \nabla \left(\frac{\delta \mathcal{F}_B}{\delta \rho} \right) \right] \quad (7)$$

Y tomando en cuenta la forma de \mathcal{F}_B de la ecuación (6) reescribimos (7)

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\nabla \cdot \left[-\Gamma_c \nabla \left(\frac{\partial f_{sw}}{\partial \rho} \right) \right] \\ &= \nabla^2 \Gamma_c \left(\frac{\partial f_{sw}}{\partial \rho} \right)\end{aligned}\tag{8}$$

3.3.3. Modelo C: nuestro modelo de interés

Este modelo considera que nuestro sistema es una mezcla de CL con nanopartículas; así que, la energía libre será la suma de las energías libres de los modelos A y B más un parámetro de acoplamiento [5]:

$$\mathcal{F}_C = \mathcal{F}_A + \mathcal{F}_B + \underbrace{\int dV \frac{\alpha}{2} \rho S^2}_{\text{acoplamiento}}\tag{9}$$

El modelo C es el que es de nuestro interés, ya que deseamos estudiar a la mezcla en su conjunto.

De igual forma que para el modelo A y para el modelo B, en el modelo C se tienen las ecuaciones dinámicas para los campos: no conservado y conservado, S y ρ respectivamente.

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial t} &= -\Gamma_S \left(\frac{\delta \mathcal{F}_C}{\delta S} \right) \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \Gamma_\rho \nabla^2 \left(\frac{\delta \mathcal{F}_C}{\delta \rho} \right)\end{aligned}\tag{10}$$

tomando la ecuación (9) y lo obtenido en (5) y (8) obtenemos una forma más explícita de las ecuaciones dinámicas para el modelo C.

$$\begin{aligned}\frac{\partial S}{\partial t} &= -\Gamma_S [-\kappa \nabla^2 S + rS + uS^3 + \alpha \rho S] \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \Gamma_\rho \nabla^2 \left(\frac{\partial f_{sw}}{\partial \rho} + \frac{\alpha}{2} S^2 \right) = \Gamma_\rho \nabla^2 \left(\omega(T) \rho + \frac{\alpha}{2} S^2 \right)\end{aligned}\tag{11}$$

Justamente estas son las ecuaciones a las cuales les estudiaremos su estabilidad lineal. Para ello, será necesario determinar la expresión $\omega(T)$ que será dada por la forma que tenga la energía libre de las NP's.

3.4. Solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales

Muchas cantidades físicas varían continuamente tanto en el espacio como en el tiempo. Podemos referirnos a estas cantidades como función o campo $U(x, y, t)$. A menudo es necesario solucionar ecuaciones diferenciales parciales para lograr determinar este campo U y muchas de estas no tienen una solución analítica, así que los métodos numéricos juegan un papel importante en la solución. .

3.4.1. Algoritmo de diferencias finitas

El método de diferencias finitas, tal como se detalla más adelante, se basa en la generación de una malla tal que $\Delta r = \frac{r_{max} - r_{min}}{N_r}$, donde, los valores de r_{max} y de r_{min} indican los valores límites superior e inferior del dominio numérico. [2]

Para resolver numéricamente una PDE, se genera una malla (ver figura 1) y se resuelve U en cada uno de los puntos de la malla. El nombre de este método es porque las derivadas se expresan justamente diferencias finitas.

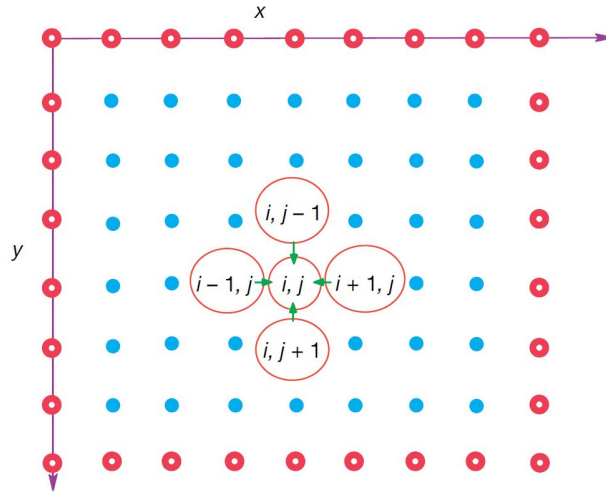


Figura 1

El laplaciano se puede calcular de forma numérica siempre que las condiciones iniciales de U sean dadas y siempre que la malla tenga condiciones a la frontera bien establecidas.

4. Metodología

4.1. Energía libre f_{sw} de NP's tipo pozo cuadrado

Para conocer quién es f_{sw} fue necesario tener a nuestra disposición una expresión de la energía libre para un fluido de nanopartículas, en nuestro caso, modelado con potencial de pozo cuadrado.

La energía libre de Helmholtz (dividida por $Nk_B T$) —que llamaremos a — para un fluido de nanopartículas de tipo pozo cuadrado se puede expresar como una serie de potencias del inverso de la energía térmica $\beta = 1/k_B T$ [9]

$$a = \frac{A^E}{Nk_B T} = \frac{A_0^E}{Nk_B T} + \sum_{n=1}^{\infty} \beta^n A_n \quad (12)$$

Es importante para nosotros determinar la energía a ; puesto que está íntimamente relacionada con la densidad de energía libre f_{sw} :

$$f_{sw} = \frac{Nk_B T a}{V} \quad (13)$$

Para los propósitos de este proyecto, basta con considerar el término de las esferas duras y los primeros dos términos de la suma.

$$a \simeq \frac{A_0^E}{Nk_B T} + \beta A_1 + \beta^2 A_2 \quad (14)$$

El primer término del lado derecho de (14) A_0^E es la energía libre de Helmholtz de las esferas duras, el cuál se obtiene usando la ecuación de estado de Carnahan-Starling [4].

$$\frac{A_0^E}{Nk_B T} = \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1 - \eta)^2} \quad ; \quad \eta = \pi\rho\sigma^3/6 \quad (15)$$

4.1.1. Coeficientes A_1 y A_2

Siendo $A_1^* = A_1/\epsilon$, $A_2^* = A_2/\epsilon^2$ y $\rho^* = \rho\sigma^3$ se presentan las expresiones que nos definen A_1 y A_2 :

Para pozos de potencial con $1.1 \leq \lambda \leq 1.8$ el coeficiente A_1 está dado por la siguiente expresión:

$$A_1^*(\rho^*) = b_0\rho^* + b_1\rho^{*2} + b_2\rho^{*3} \quad (16)$$

Mientras que la forma del coeficiente A_2 dependerá del ancho del pozo de potencial:

$$A_2^*(\rho^*) = \begin{cases} a_0\rho^* + a_1\rho^{*2} + a_2\rho^{*3}; & \lambda = 1.1 \\ g_2\rho^* e^{-h_2\rho^{*2}} + f_2 \tanh(c_2\rho^*); & 1.2 \leq \lambda \leq 1.8 \end{cases} \quad (17)$$

Donde los valores (Ver anexo) $a_0, a_1, a_2, b_0, b_1, b_2, g_2, h_2, f_2$ y c_2 dependen de la anchura del pozo de potencial. Se dispone de los coeficientes A_1 y A_2 para 8 valores distintos de λ , con $1.1 \leq \lambda \leq 1.8$. Así que, hemos determinado totalmente la expresión para a y a su vez, la expresión para f_{sw}

Considerando todas las expresiones enunciadas, las cuales sirven para definir f_{sw} , podemos encontrar $\frac{\partial f_{sw}}{\partial \rho}$.

4.2. Potencial químico de exceso sobre el gas ideal

El potencial químico está dado por la derivada de la energía libre de Helmholtz con respecto a la concentración

$$\mu = \frac{\partial f_{sw}}{\partial \rho} = \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho k_B T a) = k_B T a + \rho k_B T \frac{\partial a}{\partial \rho} \quad (18)$$

Expresamos a usando el cambio de variable con A_1^* y A_2^*

$$\begin{aligned} a &= A_{HS} + \beta A_1 + \beta^2 A_2 \\ a &= A_{HS} + \beta \epsilon A_1^* + (\beta \epsilon)^2 A_2^* \end{aligned} \quad (19)$$

Dicho esto y al sustituir finalmente se obtiene

$$\begin{aligned} \mu &= k_B T \left(a + \rho^* \frac{\partial a}{\partial \rho^*} \right) \\ \mu &= k_B T \left(a + \rho^* \frac{\partial}{\partial \rho^*} (A_{HS} + \beta \epsilon A_1^* + (\beta \epsilon)^2 A_2^*) \right) \end{aligned} \quad (20)$$

Siendo μ la expresión:

$$\mu = k_B T \left(a + \eta \frac{\partial A_{HS}}{\partial \eta} + \beta \epsilon \rho^* \frac{\partial A_1^*}{\partial \rho^*} + (\beta \epsilon)^2 \rho^* \frac{\partial A_2^*}{\partial \rho^*} \right) \quad (21)$$

4.3. Cálculo de ω_{HS}

A partir de la expresión de μ se considerará únicamente A_{HS} , así se podrá escribir:

$$\beta\mu_{HS} = \left(a + \eta \frac{\partial}{\partial \eta} A_{HS} \right) \quad (22)$$

Donde $A_{HS} = \frac{4\eta-3\eta^2}{(1-\eta)^2}$; y calculando la derivada parcial correspondiente al término de esferas duras se tiene

$$\frac{\partial A_{HS}}{\partial \eta} = \frac{2(-\eta+2)}{(1-\eta)^3} \quad (23)$$

Ahora, haciendo las sustituciones que corresponden se obtiene

$$\beta\mu_{HS} = \frac{\eta(-8+9\eta-3\eta^2)}{(-1+\eta)^3} \quad (24)$$

Haciendo una serie de Taylor de orden dos alrededor de la expresión anterior se llega a una nueva expresión que viene dada por

$$\beta\mu_{HS} = 8\eta + 15\eta^2 \quad (25)$$

Además, se sabe que $\omega = \frac{1}{\rho} \frac{\partial f_{s\omega}}{\partial \rho}$ o de forma equivalente $\beta\mu = \omega\rho$ y si consideramos una función lineal se llega a una forma más simple de μ para esferas duras

$$\mu \simeq 8\eta k_B T \quad (26)$$

O análogamente usando las ecuaciones conocidas con anterioridad se puede reescribir como

$$\omega\rho \simeq 8\eta k_B T \quad (27)$$

Donde ω corresponde a esferas duras y viene dada por la expresión:

$$\omega_{HS} = k_B T \left(\frac{4}{3} \pi \sigma^3 \right) \quad (28)$$

4.4. Adimensionalización

Con el fin de reducir el error en la solución numérica, es conveniente hacer el cálculo computacional con ecuaciones adimensionales. Se proponen los siguientes cambios de variable

$$\begin{aligned} R &= \frac{\Gamma_\rho}{\Gamma_s} \frac{\omega_{HS}}{\kappa} & \alpha' &= \frac{\alpha^2}{2u\omega_{HS}} \\ S &= \left(\frac{|r|}{u}\right)^{1/2} s & \rho &= \left(\frac{|r|}{\alpha}\right) c \\ \tau &= \Gamma_s |r| t & x' &= \left(\frac{|r|}{k}\right)^{1/2} x \end{aligned}$$

4.4.1. Adimensionalización de la ecuación para s

partimos de la ecuación:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\Gamma_s [-\kappa \nabla^2 S + rS + uS^3 + \alpha \rho S] \quad (29)$$

usando los cambios de variable, primero en el lado derecho de (29) ($\alpha \rightarrow \alpha'$, $S \rightarrow s$, $\rho \rightarrow c$)

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial t} &= -\Gamma_s [-\kappa \nabla^2 \left(\left(\frac{|r|}{u}\right)^{1/2} s\right) + r \left(\frac{|r|}{u}\right)^{1/2} s + r \left(\frac{r}{u}\right)^{1/2} s^3 + (2u\omega\alpha')^{1/2} \left(\frac{r}{(2u\omega\alpha')^{1/2}}\right) c \left(\frac{|r|}{u}\right)^{1/2} s] \\ &= -\Gamma_s \left(\frac{|r|}{u}\right)^{1/2} [-\kappa \nabla^2 s + rs + rs^3 + rcs] \end{aligned} \quad (30)$$

Ahora, usando el cambio $x \rightarrow x'$ para cambiar el laplaciano $\nabla^2 \rightarrow \nabla'^2$ y además haciendo los cambios $S \rightarrow s$, $t \rightarrow \tau$ en el lado izquierdo de la ecuación anterior obtenemos:

$$\Gamma_s |r| \left(\frac{|r|}{u}\right)^{1/2} \frac{\partial s}{\partial \tau} = -\Gamma_s \left(\frac{|r|}{u}\right)^{1/2} [-\kappa \frac{|r|}{\kappa} \nabla'^2 s + rs + rs^3 + rcs] \quad (31)$$

Simplificando términos obtenemos **la ecuación adimensional que incluye la derivada de s**

$$\boxed{\frac{\partial s}{\partial \tau} = \nabla'^2 s - \text{sgn}(r)s - s^3 - cs} \quad (32)$$

4.4.2. Adimensionalización de la segunda ecuación

El cambio de la concentración con el tiempo es:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \Gamma_\rho \nabla^2 \left\{ \mu + \frac{\alpha}{2} S^2 \right\} \quad (33)$$

Del lado izquierdo cambiamos las variables $\rho \rightarrow c$ y $t \rightarrow \tau$ mientras que del lado derecho se hacen los cambios $x \rightarrow x'$ y $S \rightarrow s$

$$\Gamma_s |r| \frac{|r|}{\alpha} \frac{\partial c}{\partial \tau} = \Gamma_\rho \frac{|r|}{\kappa} \nabla'^2 \left\{ \mu + \frac{\alpha}{2} \frac{|r|}{u} s^2 \right\} \quad (34)$$

Definimos el potencial químico adimensional $\mu^* = \frac{\mu}{\mu_{hs}} = \frac{\mu}{\omega_{hs}\rho}$ con $\mu_{hs} = \omega_{hs}\rho$

$$\Gamma_s |r| \frac{|r|}{\alpha} \frac{\partial c}{\partial \tau} = \Gamma_\rho \frac{|r|}{\kappa} \nabla'^2 \left\{ \omega_{hs} \frac{|r|}{\alpha} \mu^* c + \frac{\alpha}{2} \frac{|r|}{u} s^2 \right\} \quad (35)$$

Despejando la derivada e incluyendo la variable adimensional R obtenemos la segunda ecuación dinámica adimensional a resolver.

$$\boxed{\frac{\partial c}{\partial \tau} = R \nabla'^2 \{ \mu^* c + \alpha' s^2 \}} \quad (36)$$

4.5. Método numérico

Se resolvieron numéricamente de las ecuaciones (32) y (36) generando una malla bidimensional de de LXL para cada uno de los campos s y c . Se establecieron condiciones periódicas a la frontera. Para esta condición se definió la función *PBC*:

def PBC(Z):

```
# Fill two buffer columns
Z[ 0,:] = Z[-2,:]      # Fill column 0 from column -2
Z[-1,:] = Z[ 1,:]      # Fill column -1 from column 1
# Fill two buffer rows
Z[:, 0] = Z[:, -2]     # fill row 0 from row -2
Z[:, -1] = Z[:, 1]     # fill row -1 from row 1

# Fill four buffer corners
Z[0,0] = Z[-2,-2]
Z[0,-1] = Z[-2, 1]
Z[-1,0] = Z[ 1,-2]
Z[-1,-1] = Z[ 1, 1]

return Z
```

Se impuso como condición inicial una concentración homogénea baja $c = 0.01$ y un parámetro de orden bajo

$s = 0.001$ (cristal isotrópico) en toda la malla. Para calcular el laplaciano numérico se hizo uso de la función `laplacian2D` de diferencias finitas. [10] .

```
def laplacian2D(Z,dx):
    center = Z[1:-1, 1:-1]
    w = Z[0:-2, 1:-1]
    e = Z[2:, 1:-1]
    n = Z[1:-1, 2:]
    s = Z[1:-1, 0:-2]
    ne = Z[2:, 2:]
    nw = Z[0:-2, 2:]
    se = Z[2:, 0:-2]
    sw = Z[0:-2, 0:-2]

    # Weights for the different contributions
    dif2 = (w+e+n+s)/6.0 + (ne+nw+se+sw)/12.0
    dif2 = dif2 - center

    # Scale by grid size squared and return.
    dif2 = dif2/dx**2

    return dif2
```

El paso en el tiempo, se puede aproximar mediante el método de diferencias finitas (diferencias progresivas):

$$\begin{aligned}\frac{\partial s}{\partial t} &\approx \frac{s(t+dt) - s(t)}{dt} \\ \frac{\partial c}{\partial t} &\approx \frac{c(t+dt) - c(t)}{dt}\end{aligned}\tag{37}$$

Aplicando el método a nuestro sistema de interés, se construyó la función que resuelve las EDPs (32) y (36).

```
def solve_dynamics(c, phi, Lambda, T, alphap, s, N, dx, dt, time_step, R, r):
    # For SW:
    auxSW = inlaplacian(c, phi, Lambda, T, alphap, s, N)

    #nabla2_aux almacena laplaciano de aux
    nabla2_aux = laplacian2D(auxSW, dx)
    nabla2_s = laplacian2D(s, dx)

    #par metro de orden y concentracion en el centro
    sc = s[1:-1, 1:-1]
```



```

cc = c[1:-1,1:-1]

#Ecuaciones no lineales , se hace un incremento en el tiempo
s[1:-1,1:-1] = sc + dt * (nabla2_s - r * sc - sc**3 - sc * cc)
c[1:-1,1:-1] = cc + dt * R * nabla2_aux

#se aplican condiciones periodicas en la frontera tanto en s como en c
for x in (s, c):
    PBC(x)

```

Donde la función INLAPLACIAN calcula la cantidad dentro del laplaciano en la ecuación (36)

5. Resultados

Se trabajó con el método de diferencias finitas, donde para obtener el resultado numérico se consideraron parámetros para el pozo cuadrado (SW) llamados λ , distintas temperaturas T , y, condiciones iniciales.

Se realizaron sistemáticamente un total de 288 simulaciones, todas estas con un tamaño de las mallas de $L = 128$. Se variaron los parámetros con los siguientes valores:

- longitud de onda de la perturbación λ : {4,16,32}
- Temperatura: {0.9,1,1.1,2}
- alcance del pozo cuadrado: {1.1,1.2,1.3}
- número adimensional R : {0.5,2}
- signo r : +1,-1

No solo se hicieron perturbaciones senoidales en 1 dimensión, puesto que también se estudió la dinámica de sistemas con perturbaciones en 2D, todo esto con la precaución de que existiera un número entero de longitudes de onda con el fin de mantener válidas las condiciones periódicas a la frontera.

5.1. Comparación al cambiar el $\text{sgn}(r)$

Se seleccionaron perturbaciones con longitudes de onda λ respectivamente, dichas parámetros son: $n = 32$ a la que le corresponde una $\lambda = 4$, $T = 300K$, alcance de SW $\lambda = 1.1$ y $R = 0.5$. En este caso la variable es el valor para $\text{sgn}(r) = 1$ y $\text{sgn}(r) = -1$. En particular los resultados a continuación usan una r o *parámetro de control de temperatura* igual a 1.

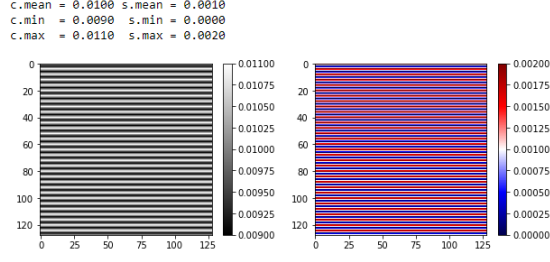


Figura 2: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $sgn(r) = 1$ iniciales.

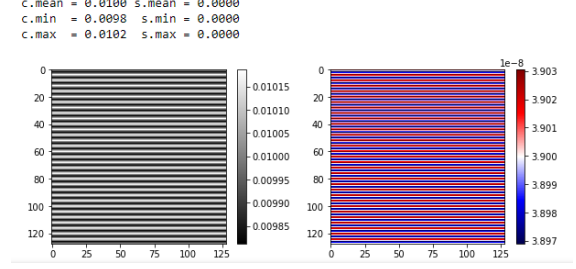


Figura 3: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $sgn(r) = 1$ finales.

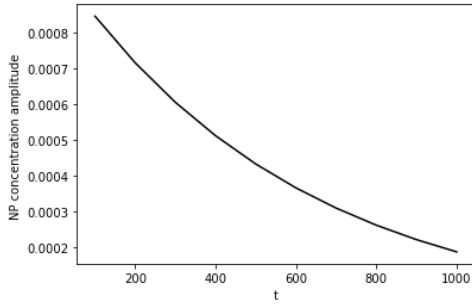


Figura 4: Amplitud de concentración de NP's respecto al tiempo respecto al tiempo.

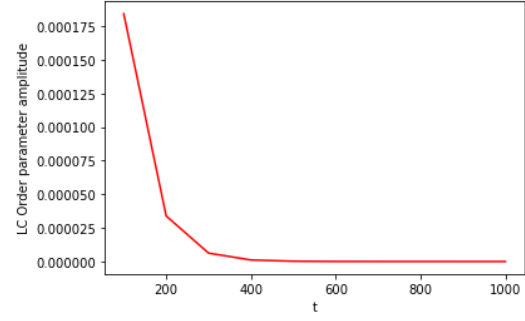


Figura 5: Amplitud del parámetro de orden respecto al tiempo.

Análogamente, para el caso donde r o *parámetro de control de temperatura* igual a -1 . Es importante mencionar que de acuerdo al análisis de estabilidad lineal se espera que la amplitud crezca con el tiempo.

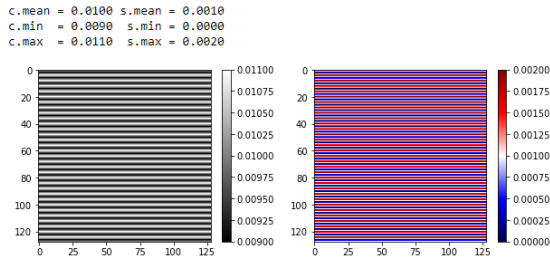


Figura 6: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $sgn(r) = -1$ iniciales.

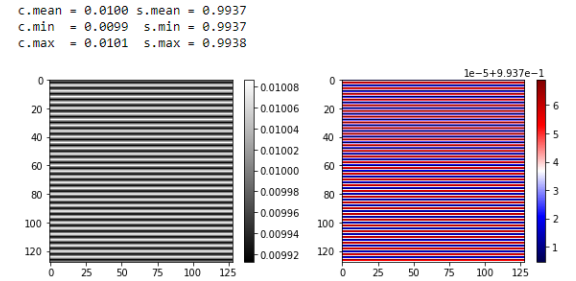


Figura 7: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $sgn(r) = -1$ finales.

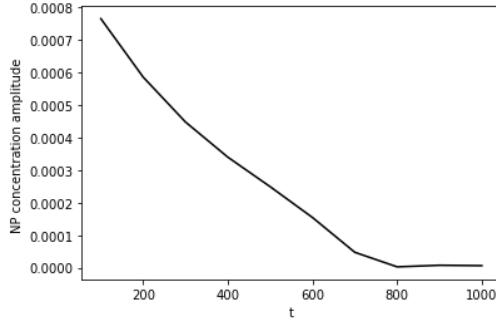


Figura 8: Amplitud de concentración de NP's respecto al tiempo

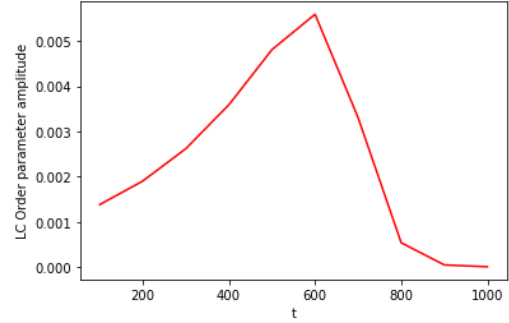


Figura 9: Amplitud del parámetro de orden respecto al tiempo

5.2. Comparación al variar el alcance del pozo cuadrado

Presentamos los resultados de tres simulaciones. Todas tienen una temperatura dentro del rango experimental $T = 300K$, $sgn(r) = -1$, $R = 0.5$. La condición inicial de la concentración es homogénea. $c = 0.001$. En seguida se perturbó al sistema con una onda senoidal con una longitud de onda $\lambda = 4$. Se hicieron 4000 pasos en el tiempo.

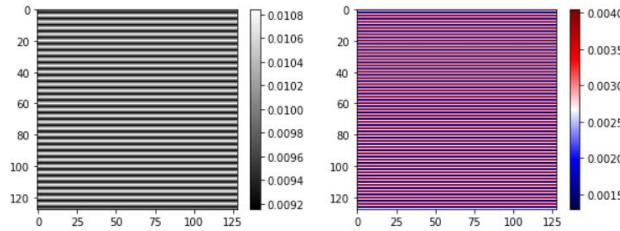
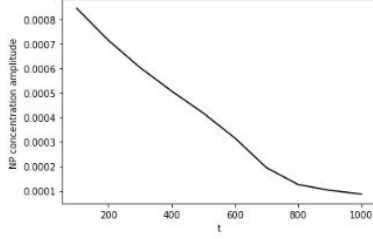


Figura 10: Concentración (escala de grises) y Parámetro de orden (escala de colores) perturbados en el paso $t=0$.

5.2.1. Concentración

- Con alcance de $\lambda = 1.1$ la amplitud de la concentración decreció monótonicamente al transcurrir el tiempo, así que el campo se mantiene estable.
- Con alcance de $\lambda = 1.2$ la amplitud de la concentración aumenta linealmente en los primeros pasos, después intenta estabilizarse pero no lo logra y finalmente el campo se desestabiliza.
- La simulación con un alcance de $\lambda = 1.3$ La amplitud de la concentración crece monótonicamente, así que el sistema es inestable en el campo c .

Figura 11: Evolución de la concentración para distintos alcances del SW



alcance SW $\lambda = 1.1$

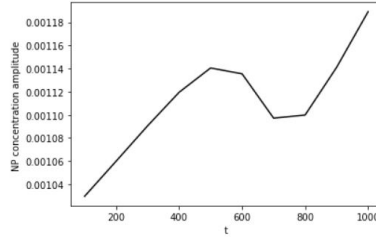


Figura 12: alcance SW $\lambda = 1.2$

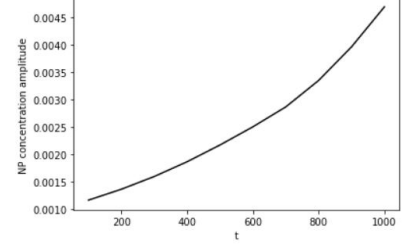
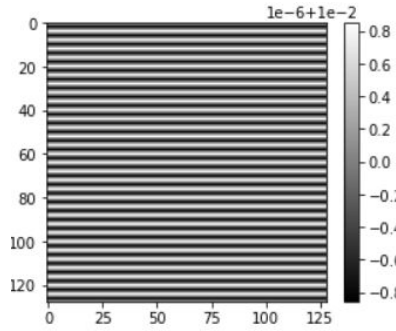
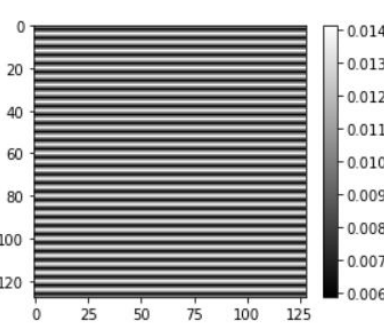


Figura 13: alcance SW $\lambda = 1.3$

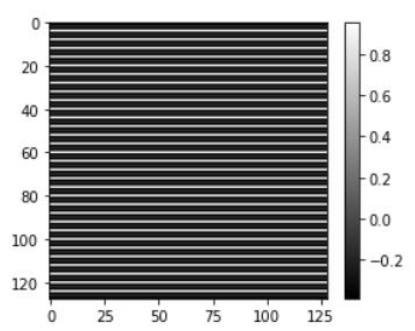
Figura 14: Campo c final



$\lambda = 1.1$



$\lambda = 1.2$



$\lambda = 1.3$

5.2.2. Parámetro de orden

Para los primeros 1000 pasos se obtuvo esencialmente el mismo resultado para los 3 experimentos.

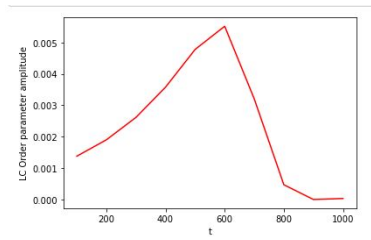


Figura 15: Evolución de s primeros 1000 pasos para los 3 experimentos.

Sin embargo, al dejar pasar el tiempo en el caso con un pozo con $\lambda = 1.1$ el campo no conservado se estabiliza, mientras que con los pozos de $\lambda = 1.2$ y $\lambda = 1.3$ el parámetro de orden pierde la estabilidad.

Figura 16: Evolución del parámetro de orden s para distintos alcances del SW

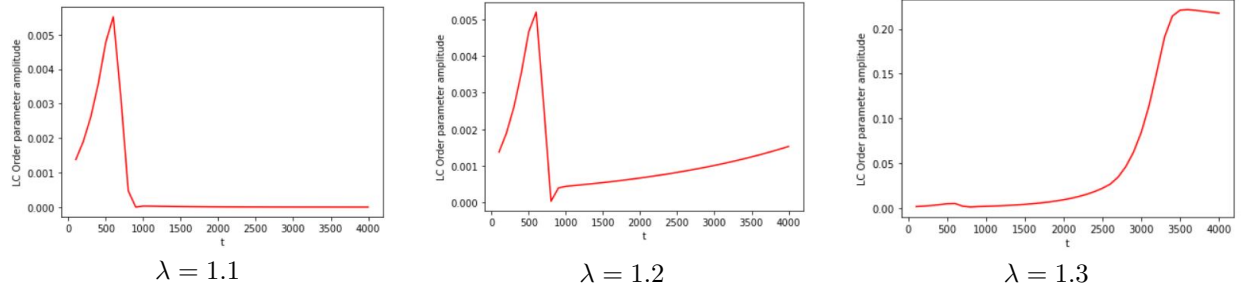
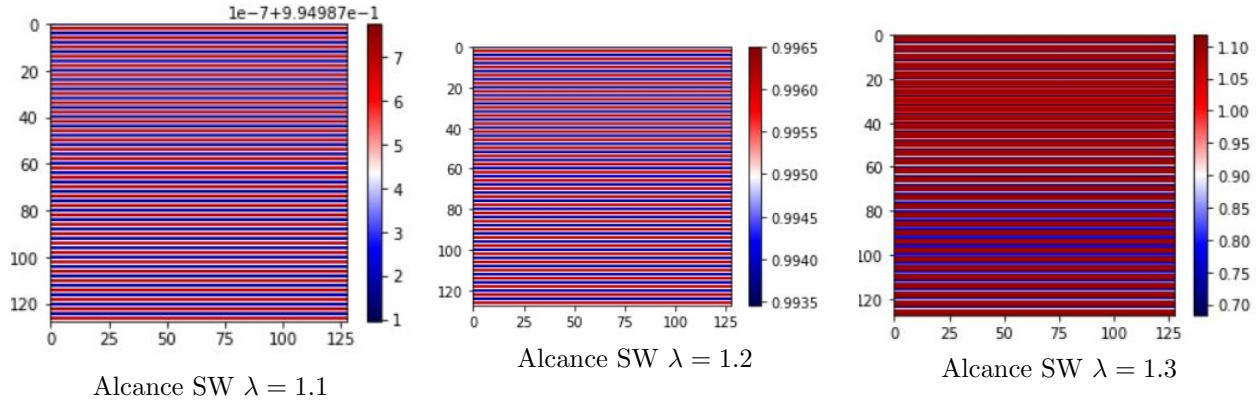


Figura 17: Campo s final



5.3. Comparación al cambiar la Temperatura

Se presentan los resultados correspondientes a la temperatura de 300 K, se consideró el caso de perturbación en una dimensión. Recordando que la temperatura experimental oscila entre 298 K y 308 K se muestran las siguientes gráficas donde $R = 0.5$, $sgn(r) = -1$. Otro parámetro importante a considerar fue un valor de longitud de onda para el pozo cuadrado de $\lambda = 1.1$ y finalmente una $L = 128$ para la malla generada. Se muestra solo el resultado a $T=300K$ pues resultó representativo del resto de temperaturas.

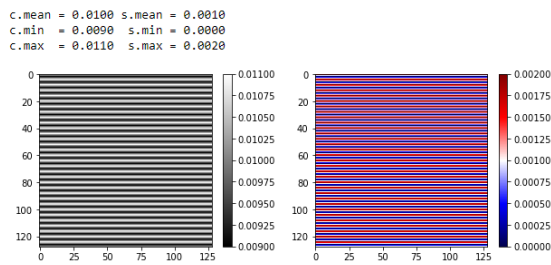


Figura 18: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $T=300K$

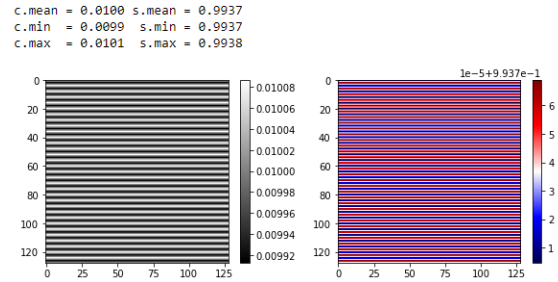


Figura 19: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $T=300K$

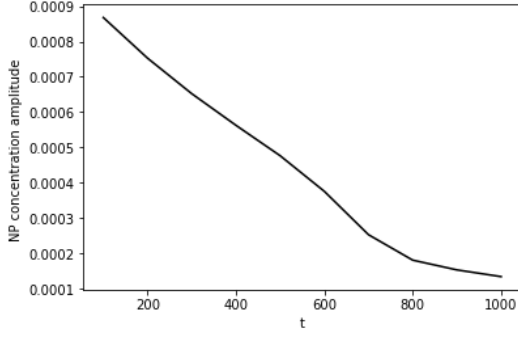


Figura 20: Amplitud de concentración de NP's a 300K

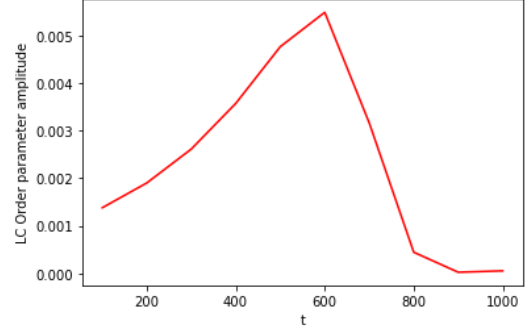


Figura 21: Amplitud del parámetro de orden a 300K

5.4. Comparación al cambiar la longitud de onda de la perturbación

Presentamos los resultados de tres simulaciones con 2000 pasos en el tiempo. Todas tienen una temperatura dentro del rango experimental $T = 300K$, $sgn(r) = -1$, $R = 0.5$. Al primer, segundo y tercer experimento se les aplicó una perturbación de $\lambda = 32, 8, 4$ respectivamente. Se escogió un alcance de pozo $\lambda = 1.1$, para confirmar si realmente esta anchura de pozo mantiene estables a los campos bajo cualquier perturbación.

Figura 22: Concentraciones iniciales para distintas perturbaciones.

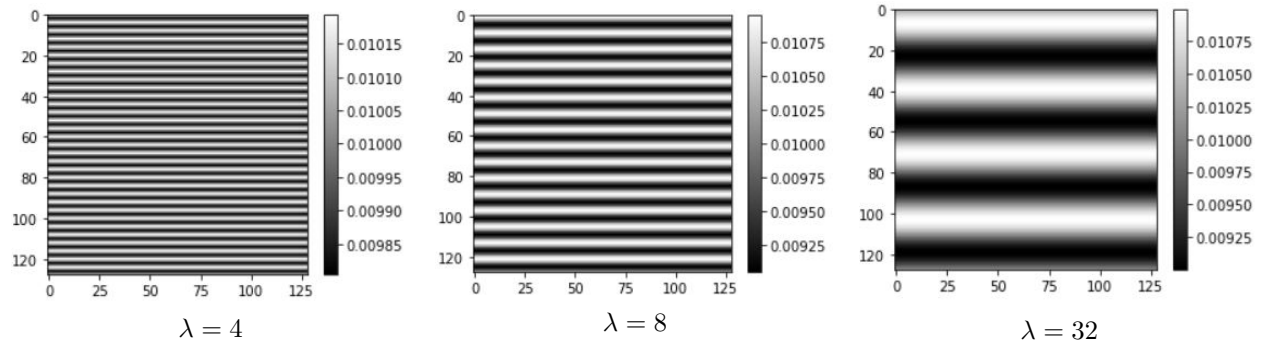
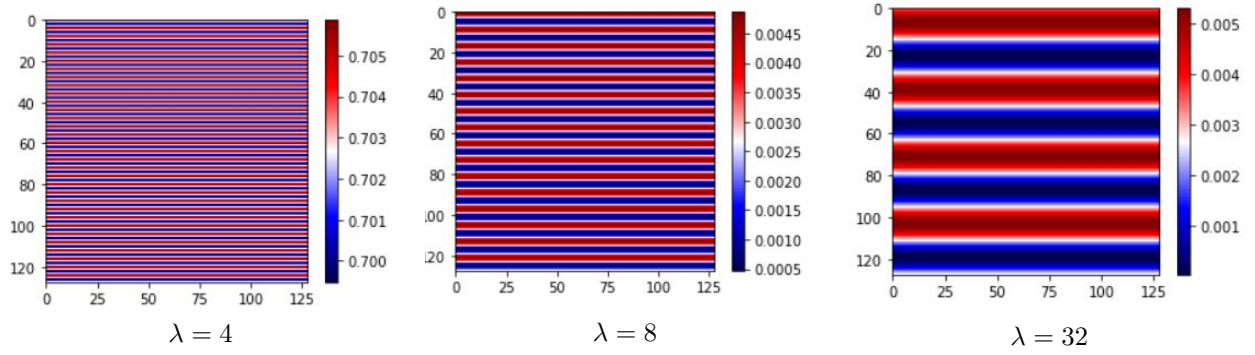


Figura 23: Parámetro de orden s inicial para distintas perturbaciones.



5.4.1. Concentración

- $\lambda = 32$ La concentración parece desestabilizarse, sin embargo, al pasar el tiempo logra bajar la amplitud de la concentración.
- $\lambda = 8$ El comportamiento de los campos se asemeja al caso con $\lambda = 32$ y de igual forma, el sistema logra estabilizarse.
- Los tres sistemas lograron llegar a la estabilidad, se aprecia que para una perturbación con una longitud de onda menor, la estabilidad se alcanza más rápido y la caída en la amplitud del campo c es monotonía.

Figura 24: Evolución de la concentración para distintas perturbaciones.

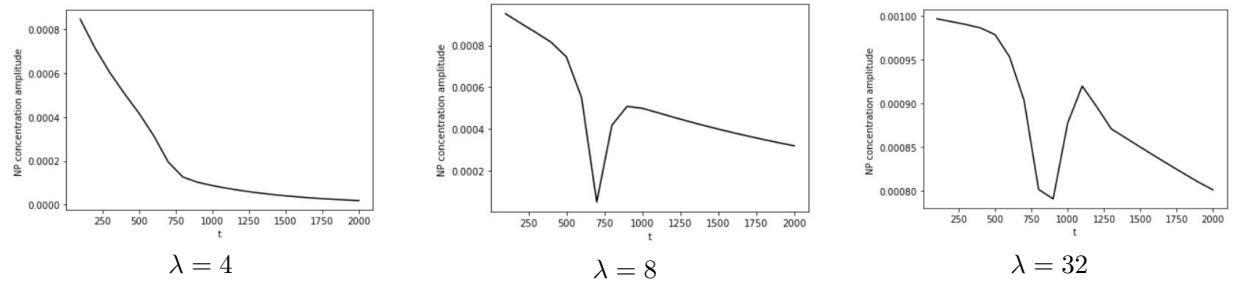
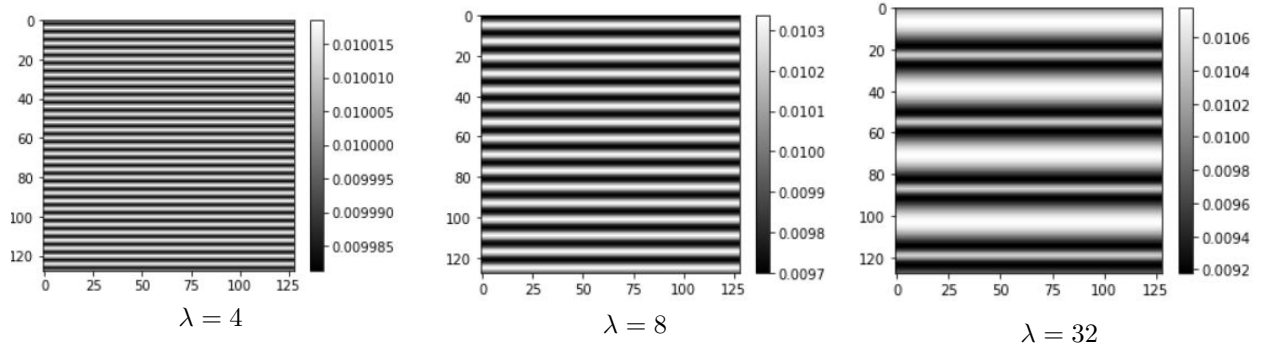


Figura 25: Campo c final para distintas perturbaciones.



5.4.2. Parámetro de orden

El parámetro de orden se estabilizo en todas las longitudes de onda. Recordemos que se usó un pozo cuadrado con alcance de $\lambda = 1.1$

Figura 26: Evolución del parámetro de orden para distintas perturbaciones

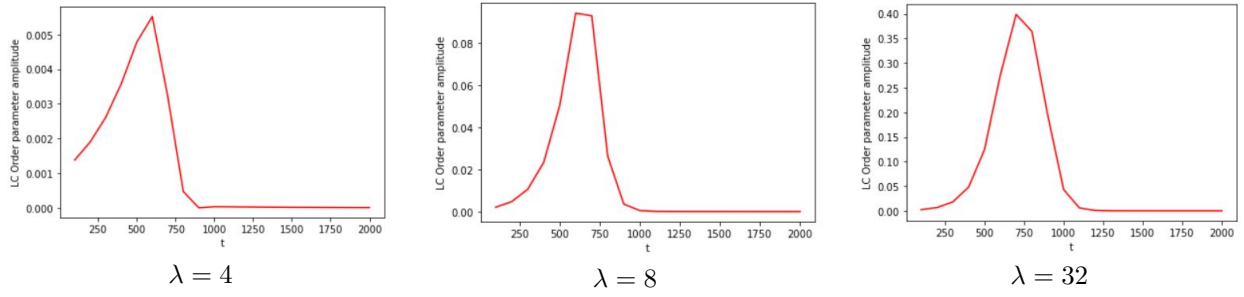
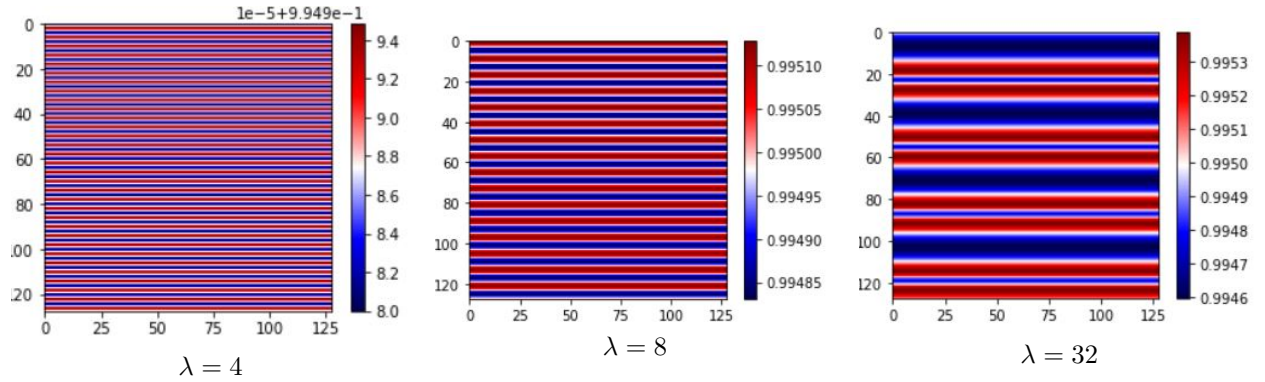


Figura 27: Campo s final para distintas perturbaciones



5.5. Comparación al cambiar la cantidad adimensional R

En los resultados mostrados a continuación se tomará en cuenta como variable la cantidad adimensional R que representa un coeficiente de difusividad, los valores usados para dicha R son $R = 2$ y $R = 0.5$. Los parámetros que no variaron en estos resultados fueron: un alcance para el pozo cuadrado $\lambda = 1.1$, $T = 300K$, $sgn(r) = -1$, y un valor de $L = 128$ para la malla generada.

Los campos de concentración y parámetro de orden iniciales y finales se muestran a continuación.

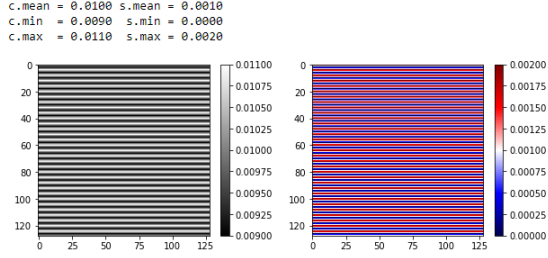


Figura 28: Campos para concentración y parámetro de orden con $R = 2$ iniciales.

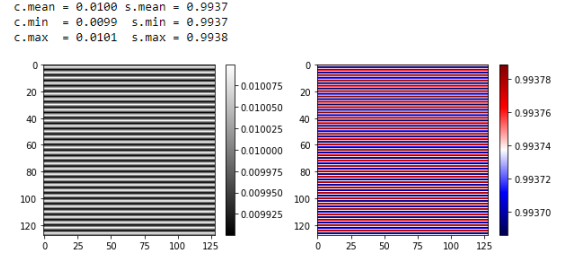


Figura 29: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $R = 2$ finales.

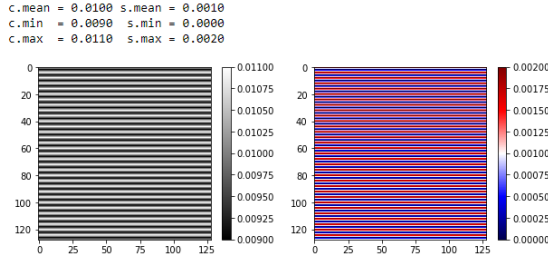


Figura 30: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $R = 0.5$ iniciales.

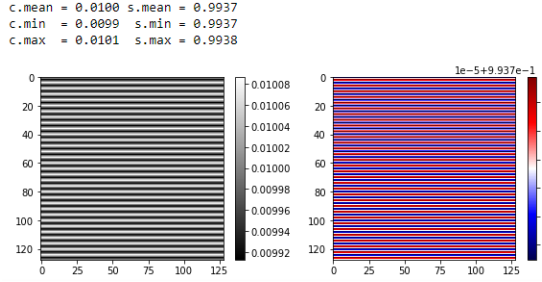


Figura 31: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $R = 0.5$ finales.

Para la amplitud de concentración de nanopartículas y de parámetro de orden se encontró:

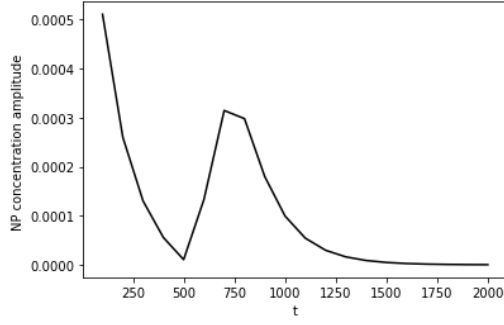


Figura 32: Amplitud de la concentración de nanopartículas para el valor de $R = 2$.

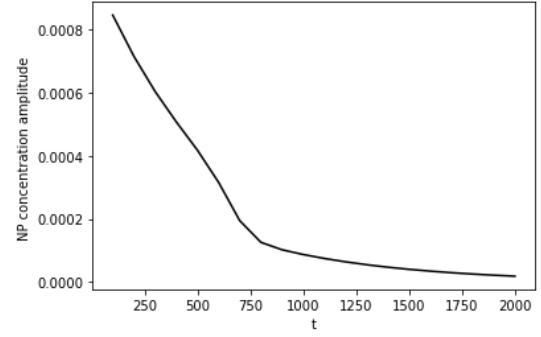


Figura 33: Amplitud de la concentración de nanopartículas para el valor de $R = 0.5$.

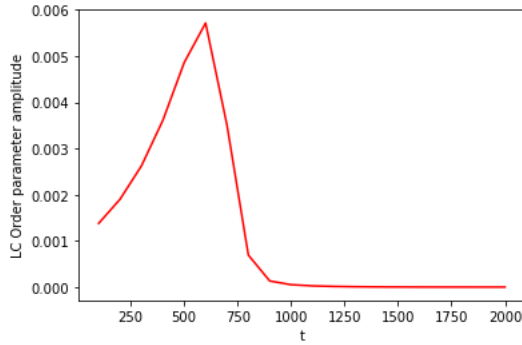


Figura 34: Amplitud del parámetro de orden para el valor de $R = 2$.

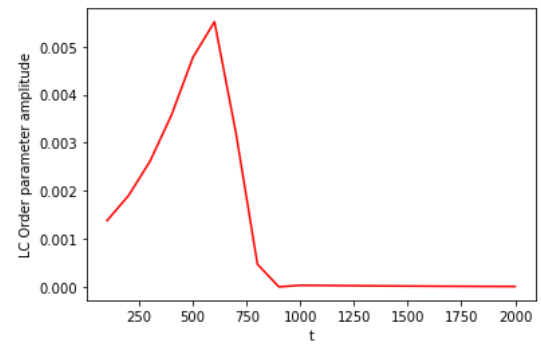


Figura 35: Amplitud del parámetro de orden para el valor de $R = 0.5$.

5.6. Perturbaciones con dos ondas planas senoidales perpendiculares

5.6.1. Comparación al cambiar el $\text{sgn}(r)$

Se seleccionaron perturbaciones con longitudes de onda λ , dichos parámetros son: $n = 32$, $T = 300K$, $\lambda = 1.1$ y $R = 0.5$. En este caso la variable es el valor para $\text{sgn}(r) = 1$ y $\text{sgn}(r) = -1$.

En particular los resultados a continuación usan una r o *parámetro de control de temperatura* igual a 1.

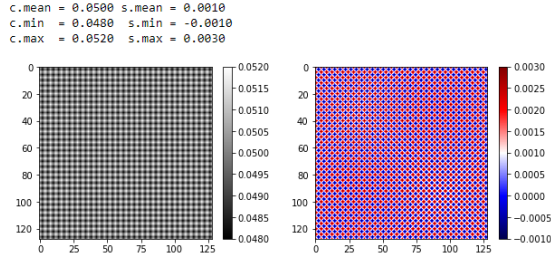


Figura 36: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $sgn(r) = 1$ iniciales.

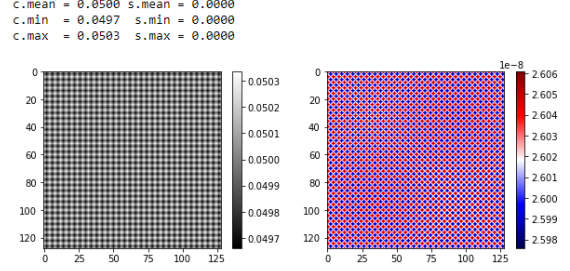


Figura 37: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $sgn(r) = 1$ finales.

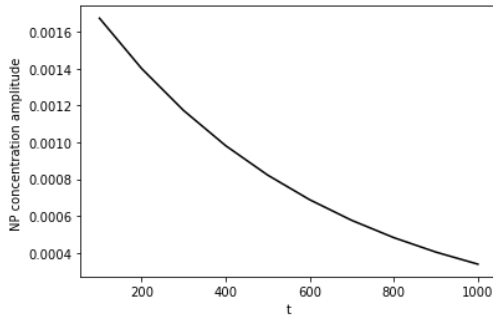


Figura 38: Amplitud de concentración de NP's de orden respecto al tiempo.

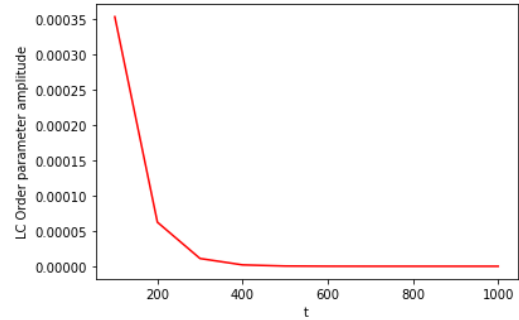


Figura 39: Amplitud del parámetro de orden respecto al tiempo.

Análogamente, para el caso donde r o *parámetro de control de temperatura* igual a -1 se obtuvieron los siguientes resultados. Es importante mencionar que de acuerdo al análisis de estabilidad lineal se espera que la amplitud crezca con el tiempo.

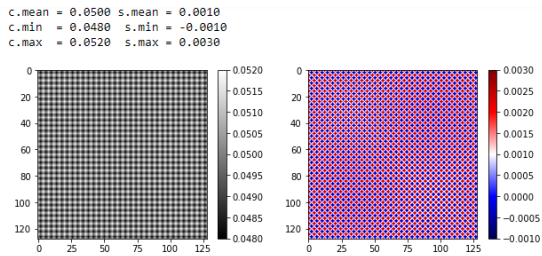


Figura 40: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $sgn(r) = -1$ iniciales.

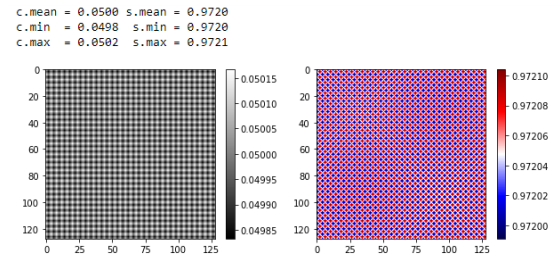


Figura 41: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $sgn(r) = -1$ finales.

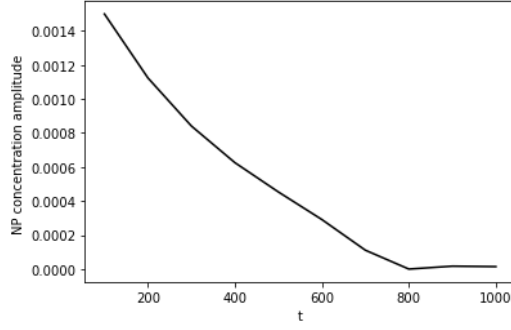


Figura 42: Amplitud de concentración de NP's respecto al tiempo.

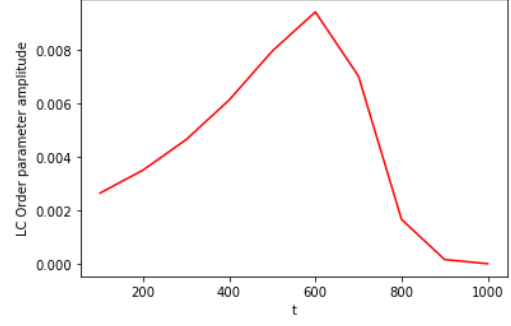


Figura 43: Amplitud del parámetro de orden respecto al tiempo.

5.6.2. Comparación al variar el alcance del pozo cuadrado

Veamos como cambian los resultados con un alcance de SW $\lambda = 1.1$ y $\lambda = 1.3$ al tener fijos $T = 300K$, $R = 0.5$, y ambas perturbaciones con una longitud de onda de $\lambda = 32$

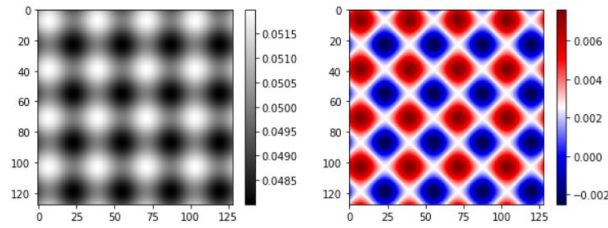
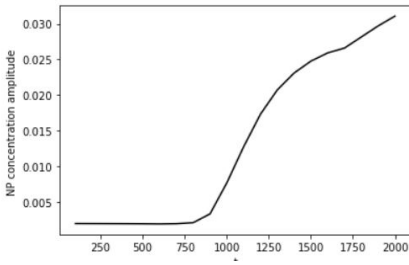
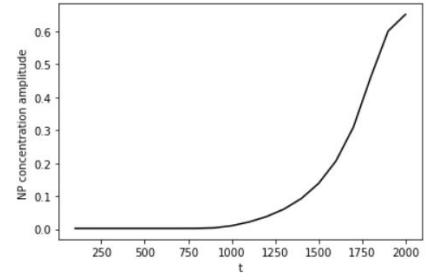


Figura 44: Amplitud de la concentración y del parámetro de orden iniciales con $\lambda = 32$.

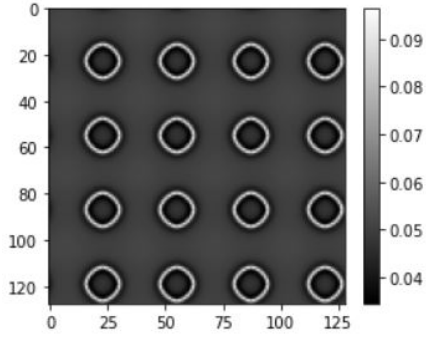


Alcance SW $\lambda = 1.1$

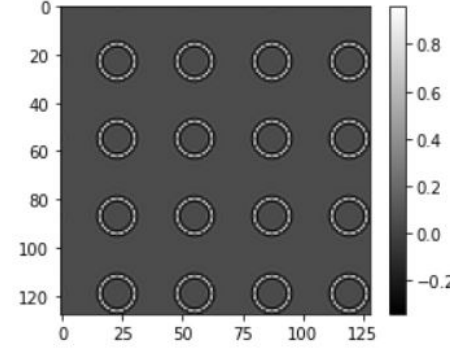


Alcance SW $\lambda = 1.3$

Figura 45: Evolución de la concentración para distintos alcances de SW

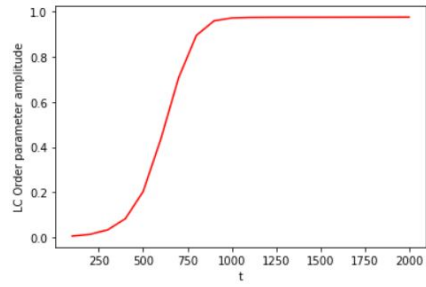


Alcance SW $\lambda = 1.1$

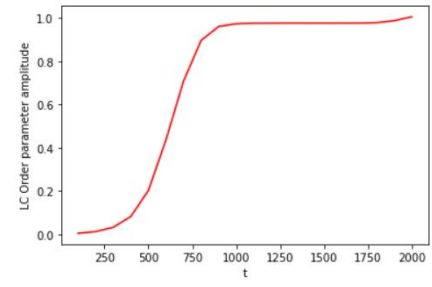


Alcance SW $\lambda = 1.3$

Figura 46: Concentración final con distintos SW

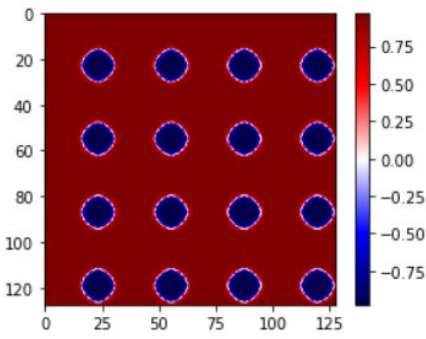


Alcance SW $\lambda = 1.1$

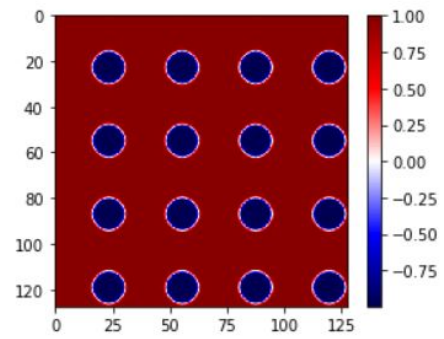


Alcance SW $\lambda = 1.3$

Figura 47: Evolución del parámetro de orden para distintos SW



Alcance SW $\lambda = 1.1$



Alcance SW $\lambda = 1.3$

Figura 48: Parámetro de orden final con distintos SW

5.6.3. Comparación al cambiar la Temperatura

Se presentan los resultados correspondientes a la temperatura 300K, se consideró el caso para dos ondas planas. Recordando que la temperatura experimental oscila entre 298 K y 308 K se muestran las siguientes gráficas donde $R = 0.5$, $sgn(r) = -1$. Otro parámetro importante a considerar fue un valor de longitud de

onda para el pozo cuadrado de $\lambda = 1.1$ y finalmente una $L = 128$ para la malla generada. Se muestran solo resultados a $T=300K$ debido a que es representativo del resto de temperaturas.

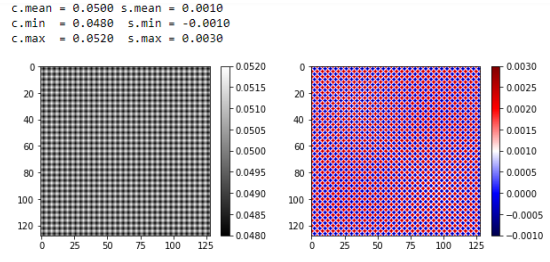


Figura 49: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $T=300$ iniciales.

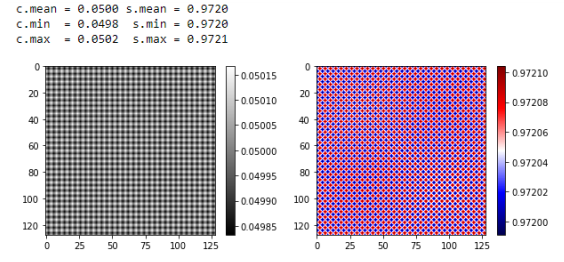


Figura 50: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $T=300K$ finales.

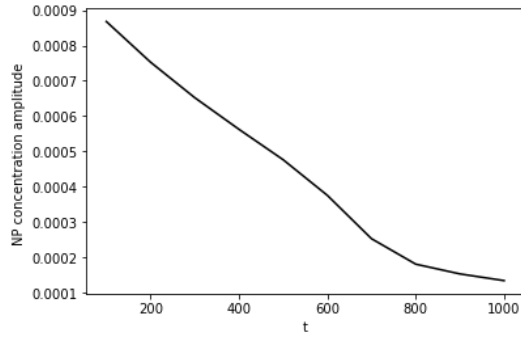


Figura 51: Amplitud de concentración de NP's a 300K.

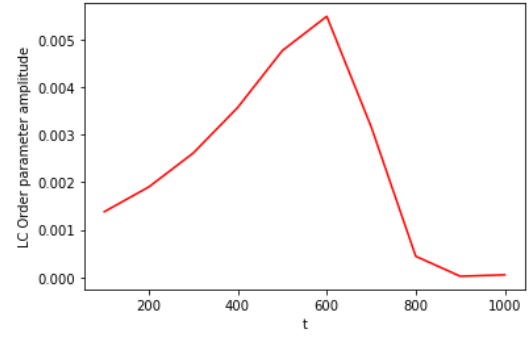


Figura 52: Amplitud del parámetro de orden a 300K.

5.6.4. Comparación al cambiar la longitud de onda de la perturbación

Hagamos una confrontación entre dos experimentos con el mismo alcance SW $\lambda = 1.1$ a Temperatura $T = 300K$ y una $R = 0.5$, pero con diferente perturbación.

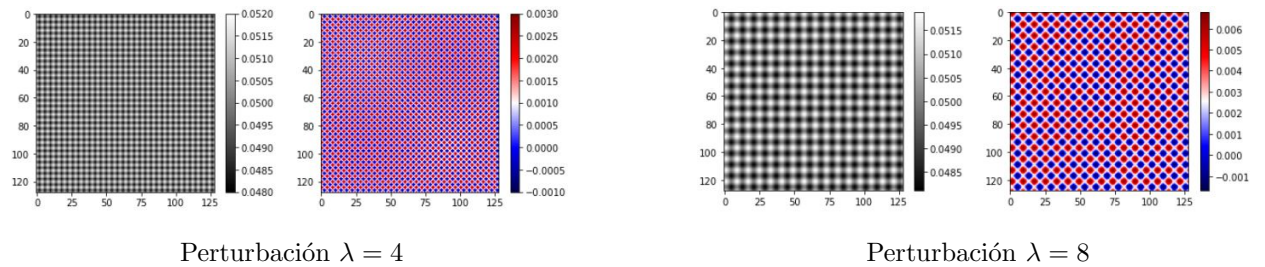
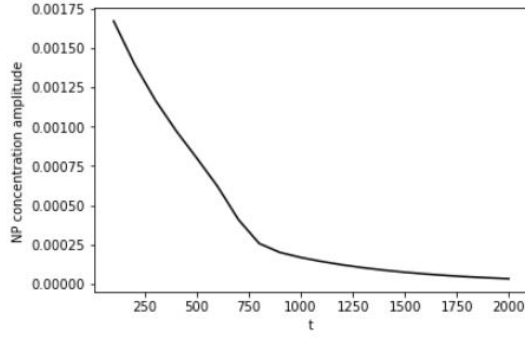
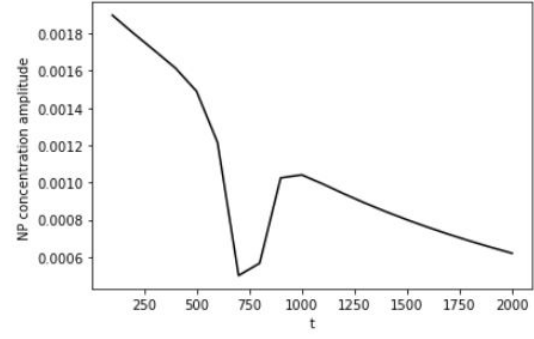


Figura 53: Campos s y c iniciales a diferentes perturbaciones

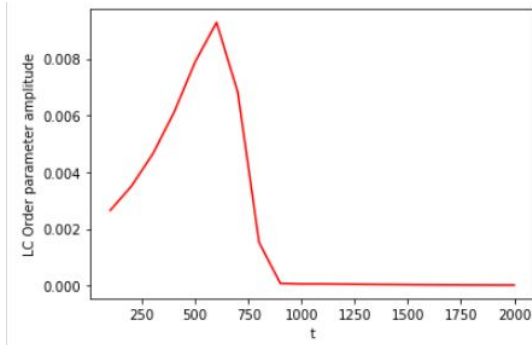


Perturbación $\lambda = 4$

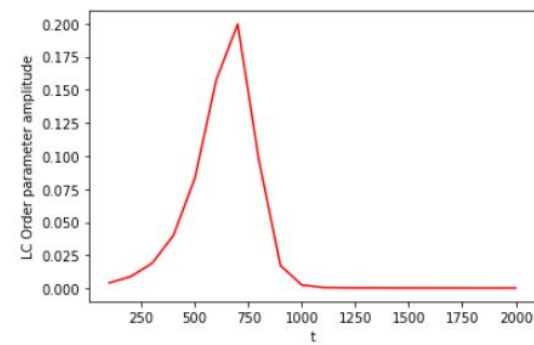


Perturbación $\lambda = 8$

Figura 54: Evolución temporal de la amplitud de la concentración

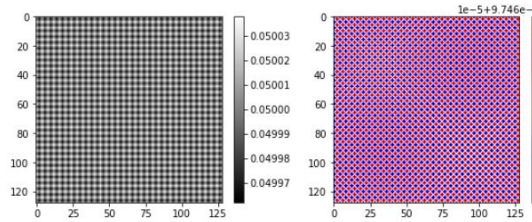


Perturbación $\lambda = 4$

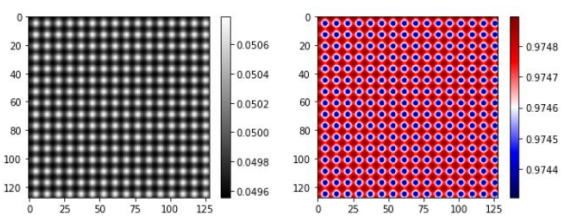


Perturbación $\lambda = 8$

Figura 55: Evolución temporal de la amplitud del parámetro de orden



Perturbación $\lambda = 4$



Perturbación $\lambda = 8$

Figura 56: Campos s y c finales a diferentes perturbaciones

5.6.5. Comparación al cambiar la cantidad adimensional R

En los resultados mostrados a continuación se tomará en cuenta como variable la cantidad adimensional R que representa un coeficiente de difusividad, los valores usados para dicha R son $R = 2$ y $R = 0.5$. Los parámetros que no variaron en estos resultados fueron $n = 32$, para el pozo cuadrado $\lambda = 1.1$, $T = 300K$,

$sgn(r) = -1$, y un valor de $L = 128$ para la malla generada tomando una perturbación de dos ondas planas.

Los campos de concentración y parámetro de orden inicial y final para $R=2$ se muestran a continuación.

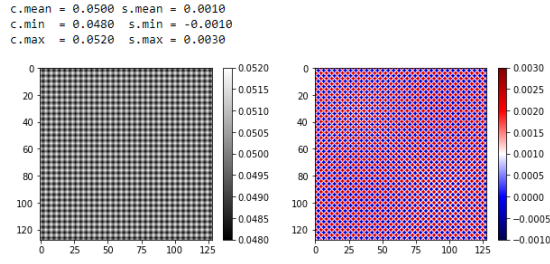


Figura 57: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $R = 2$ iniciales.

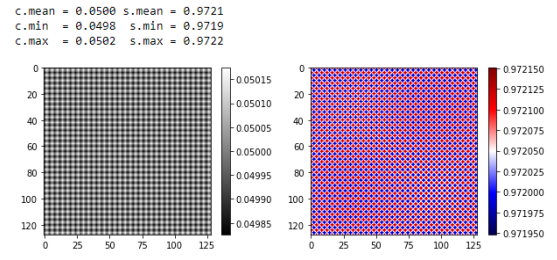


Figura 58: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $R = 2$ finales.

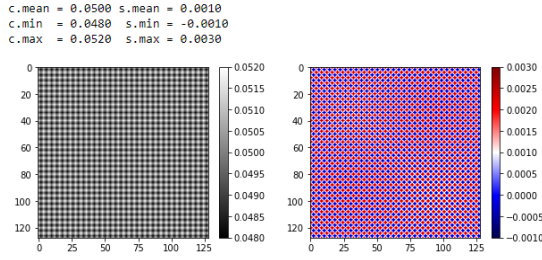


Figura 59: Campos para concentración (escala de grises) y parámetro de orden (escala de colores) con $R = 0.5$ iniciales.

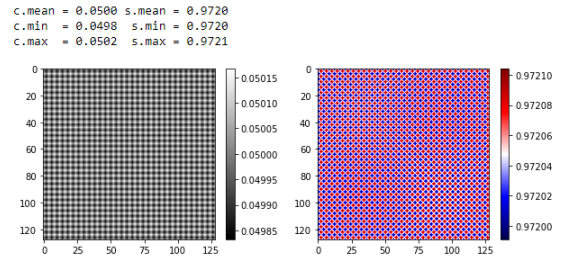


Figura 60: Campos para concentración y parámetro de orden con $R = 0.5$ finales.

Para la amplitud de concentración de nanopartículas y del parámetro de orden se encontró:

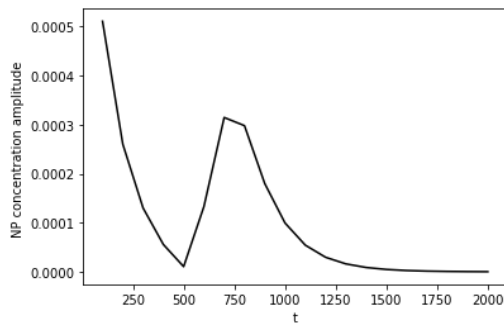


Figura 61: Amplitud de la concentración de nanopartículas para el valor de $R = 2$.

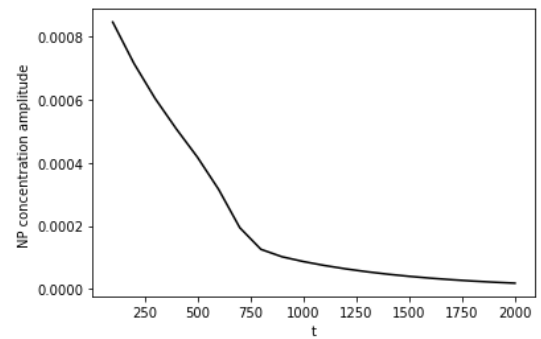


Figura 62: Amplitud de la concentración de nanopartículas para el valor de $R = 0.5$.

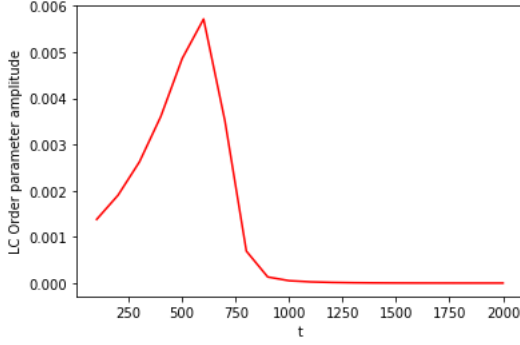


Figura 63: Amplitud del parámetro de orden para el valor de $R = 2$.

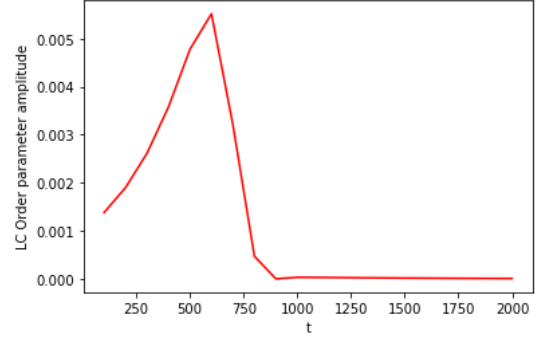


Figura 64: Amplitud del parámetro de orden para el valor de $R = 0.5$.

6. Conclusiones

Se encontró que para el $sgn(r) = 1$ tanto la amplitud de la concentración de nanopartículas como la amplitud del parámetro de orden tienden a la estabilidad para el caso en una y dos dimensiones. De forma similar, cuando se tiene el caso $sgn(r) = -1$ la amplitud de la concentración de nanopartículas tiende a ser estable, pero, a diferencia del caso $sgn(r) = 1$, se encontró que el parámetro de orden incrementa en el tiempo hasta encontrar un máximo aproximadamente en $t = 600$ para posteriormente descender hasta llegar a ser estable.

Tal como se predijo en el análisis lineal, la estabilidad estará influida por el alcance del pozo cuadrado, tanto así que para el intervalo de temperaturas experimental, la solución numérica de las EDP's nos dice que los campos conservado y no conservado se mantendrán estables únicamente cuando el alcance del pozo sea de $\lambda = 1.1$. Cabe destacar que aunque la temperatura sea relativamente alta (308K), un sistema con NP's alcance de pozo de $\lambda = 1.2$ no fue capaz de estabilizarse. Sería necesaria una temperatura aún mayor y fuera del intervalo experimental.

Al usar una temperatura dentro del intervalo experimental así como temperaturas más bajas y más altas del intervalo mencionado se encontró que tanto la amplitud de concentración de nanopartículas como la amplitud del parámetro de orden se vuelven estables conforme el tiempo incrementa. En los casos de 270K, 300K, 330K y 600K las gráficas obtenidas por medio de la solución numérica no cambian en el caso de una dimensión y de dos dimensiones. Esto ocurre siempre y cuando el alcance del pozo cuadrado sea pequeño.

Para perturbaciones en una dimensión, Si se toma una longitud de onda de perturbación muy grande el sistema tiende a desestabilizarse, sin embargo, si el alcance del pozo es muy pequeño ($\lambda = 1.1$), tarde o temprano la estabilidad se alcanzará. En cambio, para perturbaciones en dos dimensiones, sí será relevante la longitud de la perturbación, ya que para una perturbación con λ grandes (por ejemplo $\lambda = 32$) el sistema

no estabiliza incluso con un SW pequeño.

Al analizar los resultados al comparar la cantidad adimensional R , se encontró que para la amplitud de concentración de nanopartículas existe un comportamiento que tiende a la estabilidad en ambos casos, pero, para la $R = 0.5$ no se encuentra el mismo comportamiento de concentración respecto al tiempo pues cuando la $R = 2$ se obtuvo que la concentración disminuye para luego incrementar a un máximo y finalmente descender hacía una curva estable, esto ocurre para una y dos perturbaciones. Ahora, para el caso de la amplitud del parámetro de orden se encontró que no hay diferencias significativas en las gráficas del comportamiento de dicho parámetro en el tiempo y en ambos casos se muestra que tiende a encontrarse estabilidad para este parámetro después de haber encontrado un máximo luego de determinado tiempo.

7. Anexos

λ	b0	b1	b2	g2	h2	f2	c2
1.1	-0.74484	-0.382173	-1.63313	0	0	0	0
1.2	-1.51817	-1.58568	-1.40168	-0.754123	1.54113	0	0
1.3	-2.40494	-3.04343	-0.16285	-0.400299	4.81518	-0.221092	3.42486
1.4	-3.46854	-4.36238	1.46006	-0.311957	9.62637	-0.275382	4.80383
1.5	-4.74229	-5.34853	3.10155	-0.301985	12.7536	-0.305239	6.10676
1.6	-6.24987	-5.88535	4.48369	-0.242938	10.8684	-0.333435	7.67705
1.7	-8.01193	-5.8906	5.34814	-0.310091	16.5368	-0.376464	8.31355
1.8	-10.0523	-5.27555	5.38749	0.385677	1.98941	-0.539128	8.40071

Tabla 1. Valores de los parámetros que definen a la energía libre por partícula, tomados de Sastre (2018) [9]

Nota: para el caso de $\lambda = 1.1$ se tienen los valores $a_0 = -0.315714$; $a_1 = -0.405783$ y $a_2 = 0.4394$.

Referencias

- [1] Atzin, N., Guzmán, O., Gutiérrez, O. (2018). *Free-energy model for nanoparticles self-assembly by liquid crystal sorting*. Physical Review. (97), 1-7. DOI: 10.1103/PhysRevE.97.062704
- [2] Áviles, I., Estrada, G., González, J.A. and Guzmán, F.S. (2017). *Pseudospectral vs finite differences Methods in Numerical Relativity*. Revista Mexicana de Física.
- [3] Cross, M., y Greenside, H. (2009). *Pattern formation and dynamics in nonequilibrium systems*. Cambridge, UK: Cambridge University Press.
- [4] Hansen, J.P., McDonald, I. R. (2013). *Theory of Simple Liquids*. California: Academic Press.
- [5] Hohenberg, P.C. y Halperin, B. I. (1977) *Theory of dynamic critical phenomena*. Rev. Mod. Phys. (49), 435-479. DOI: 10.1103/RevModPhys.49.435
- [6] Noriega, J. (2020). *Extensión del análisis de condiciones de estabilidad lineal de mezclas de esferas duras y nemáticas al caso de mezclas de nanopartículas tipo Lennard-Jones y nemáticos* (Informe de proyecto terminal I de licenciatura). Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa: Ciudad de México.
- [7] Oswald, P. and Pieranski, P. (2005). *Nematic and cholestreric liquid crytals: Concepts and physical properties illustrated by experiments*. London: CRC Press.
- [8] Rodarte, A., Gosh, S. and Hirst, L. (2013). *Quantum dot liquid crystal composite materials: Self-assembly driven by liquid crystal phase transition templating*. Journal of Materials Chemistry. (1), 5527–5532. DOI: 10.1039/C3TC31043D
- [9] Sastre, F., Moreno-Hilario, E., Sotelo-Serna, G. and Gil-Villegas, A. (2018). *Microcanonical ensemble computer simulation of the high-temperature expansion coefficients of the Helmholtz free-energy of an square-well fluid*. Molecular Physics. 116(3), 1-20. DOI: 10.1080/00268976.2017.1392051
- [10] Sumesh, P., Santosh A. (2012) *Isotropic discrete Laplacian operators from lattice hydrodynamics*. Journal of Computational Physics.