

INFORME DE PROYECTO TERMINAL I: INVESTIGACIÓN TEÓRICA

Extensión del análisis de condiciones de estabilidad lineal de mezclas de esferas duras y nemáticos al caso de mezclas de nanopartículas tipo Lennard-Jones y nemáticos

Juan Manuel Noriega Hernández

Asesor: Dr. Orlando Guzmán López

Introducción

En el presente trabajo estudiamos las condiciones de segregación y dispersión de nanopartículas (NPs), modeladas como partículas de Lennard-Jones, en una mezcla con el cristal líquido pentilcianobifenil (5CB). En el grupo de investigación del Dr. Orlando Guzmán López, asesor del presente trabajo, se han estudiado los casos en estas mezclas, pero modelando las nanopartículas como esferas duras, a las cuales les corresponde la ecuación de estado de Carnahan-Starling. Sin embargo, este modelo no considera la fuerza de atracción entre las nanopartículas, de la cual se ha observado evidencia en un experimento de segregación de nanopartículas suspendidas en 5CB, como fue reportado por Atzin et al. (2018).

Con el contexto anterior, se plantearon los siguientes objetivos para el presente proyecto:

- Extender los modelos dinámicos existentes para mezclas de esferas duras y cristales líquidos a sistemas de nanopartículas tipo Lennard-Jones (LJ) y cristales líquidos (CL),
- Analizar cómo cambian las condiciones de estabilidad lineal por efecto de la atracción entre nanopartículas en el sistema LJ y CL, en particular debido a la presencia de la transición de fase líquido-vapor para las partículas tipo LJ.
- Presentar un informe y una plática que expliquen los conceptos usados y los resultados encontrados.

Debido a que se trata de un sistema fuera del equilibrio, debemos considerar métodos alternativos a los usuales de la termodinámica. En particular, recurrimos

al análisis de estabilidad lineal para analizar las ecuaciones dinámicas que describen la evolución del parámetro de orden y de la concentración.

Para contextualizar el presente trabajo es preciso comenzar describiendo brevemente los elementos constituyentes del sistema estudiado: El cristal líquido y las partículas de Lennard-Jones.

Un cristal líquido es un estado de agregación de la materia que posee simultáneamente algunas propiedades de un líquido y otras de un sólido. En dicha fase, las moléculas dentro del cristal líquido, que son anisótropas, se ordenan de manera tal que se les puede clasificar en función de dicho orden. En el presente trabajo sólo consideraremos la fase nemática, en la cual los mesógenos que conforman al cristal líquido tienen un orden únicamente orientacional. Podemos describir cuantitativamente el grado de orden de un cristal líquido nemático mediante su parámetro de orden, definido de la siguiente manera (para un sistema tridimensional) y que también se conoce como la “nematización”:

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

o bien:

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

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, éste último se direcciona a lo largo del eje de orientación privilegiada del cristal (su eje de simetría). Así, θ , es el ángulo comprendido entre los vectores \hat{k} y \hat{n} . Por otro lado, notemos que S toma valores entre -1/2 y 1. Si la fase es isotrópica, $S \approx 0$; pero si la fase es nemática S es diferente de cero. Más aún, si S es positivo es porque las moléculas tienden a alinear su eje con el director, pero si S es negativo es porque las moléculas tienden a alinear su eje perpendicular al director.

Por su parte, las partículas de Lennard-Jones (LJ) se caracterizan por el potencial de interacción entre un par de ellas:

$$u_{LJ} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (3)$$

donde ε es la magnitud del mínimo del potencial, σ es el diámetro de las partículas y r la distancia entre estas. El potencial de LJ es ampliamente utilizado para la descripción de fluidos simples y sus propiedades termodinámicas han sido largamente estudiadas por medio de simulaciones moleculares.

Metodología

Como mencionamos, deseamos estudiar la separación de fases en una mezcla de nanopartículas, con potenciales de interacción de LJ, y un cristal líquido. Para ello recurrimos al modelo C descrito por Hohenberg y Halperin (1977), en el cual debemos considerar un campo no conservado (modelo A), acoplado a un campo conservado (modelo B). En nuestro caso, el campo no conservado es el parámetro de orden S del cristal líquido y el campo conservado es la densidad de nanopartículas ρ .

El modelo A nos dice que podemos hacer un desarrollo en serie de la energía libre del cristal líquido de la siguiente manera:

$$\mathcal{F}_{\mathcal{A}}[S(\mathbf{r}, t)] = \int dV \left\{ \frac{\kappa}{2} |\nabla S|^2 + \frac{r}{2} S^2 - \frac{\omega}{3} S^3 + \frac{u}{4} S^4 \right\} \quad (4)$$

donde κ, r, w y u son, en principio, funciones de la temperatura. Para un sistema bidimensional, el término cúbico en S no contribuye a la energía libre y así podemos tomar el caso $\omega = 0$. En tal caso, la metodología de Hohenberg y Halperin (1977) es proponer 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. Para nuestro sistema, el modelo A da la siguiente ecuación:

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

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

Por otro lado, para el modelo B necesitamos conocer la forma explícita de la energía libre \tilde{a} de un fluido de Lennard-Jones. Para encontrar dicha expresión para \tilde{a} se hizo una búsqueda bibliográfica en la biblioteca virtual de la universidad y encontramos un artículo, de Stephan et al. (2020), que compara varias ecuaciones de estado (EOS) para un fluido de LJ. Stephan et al. proponen una ecuación para \tilde{a} basada en una reparametrización del modelo PC-SAFT. El artículo muestra como la ecuación propuesta se encuentra entre las más robustas en cuanto a su consistencia con los datos de las simulaciones moleculares reportadas entre los artículos analizados.

El modelo para la energía de Helmholtz reducida, $\tilde{a} = A/(N k_B T)$ es:

$$\tilde{a} = \tilde{a}_{id} + \tilde{a}_{ref} + \tilde{a}_{pert} \quad (6)$$

donde \tilde{a}_{id} es la contribución de gas ideal (que no se usa en el modelo B porque ahí la energía libre se desarrolla en serie respecto de la del gas ideal),

$$\tilde{a}_{ref} = \zeta_0^{-1} \left(\frac{3\zeta_1\zeta_2}{1-\zeta_3} + \frac{\zeta_2^3}{\zeta_3(1-\zeta_3)^2} \right). \quad (7)$$

En la expresión anterior, ζ_n está dado por:

$$\zeta_n = \frac{\pi}{6} \rho d(T)^n. \quad (8)$$

La cantidad $d(T)$ corresponde al diámetro efectivo de las partículas. Para un modelo de esferas duras, $d(T)$ es constante, pero en el caso de LJ es función de la temperatura de la siguiente manera:

$$d(T) = 1 - c_1 \exp\left(-\frac{c_2}{T}\right) \quad (9)$$

Además \tilde{a}_{pert} , que representa la contribución de las fuerzas atractivas y por lo tanto es la cantidad central para nuestro trabajo, está dada por:

$$\tilde{a}_{pert} = \frac{-2\pi\rho \sum_{i=0}^N a_i \eta^i}{T} - \frac{\pi\rho \sum_{i=0}^N b_i \eta^i}{T^2} \quad (10)$$

donde $\eta = \zeta_3$ y los coeficientes a_i y b_i se pueden encontrar en el material suplementario del artículo de Stephan et al. (2020).

Una vez tenemos una expresión para la energía libre residual (es decir, el exceso de energía libre respecto a la del gas ideal),

$$\tilde{a}_{res} = \tilde{a}_{ref} + \tilde{a}_{pert}, \quad (11)$$

podemos calcular la energía residual por unidad de volumen como

$$f = k_B T \rho \tilde{a}_{res}. \quad (12)$$

Haciendo un desarrollo en serie de Taylor a segundo orden para f , encontramos que:

$$f(\rho, T) \approx k_B \left[\frac{4}{3} \pi (T d(T))^3 - 3a_0 \right] \frac{\rho^2}{2} + \mathcal{O}(\rho^3), \quad (13)$$

podemos definir una energía libre aproximada \mathcal{F}_B como:

$$\mathcal{F}_B = \int dV \frac{\omega(T)}{2} \rho^2. \quad (14)$$

El modelo B, nos dice que la evolución temporal del sistema estará dada por una ecuación de continuidad:

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right) = -\nabla \cdot \left[-\Gamma_\rho \nabla \left(\frac{\delta \mathcal{F}_B}{\delta \rho} \right) \right] = \Gamma_\rho \nabla^2 \left(\frac{\delta \mathcal{F}_B}{\delta \rho} \right), \quad (15)$$

donde Γ_ρ es inversamente proporcional al tiempo de relajación de las fluctuaciones de la densidad.

Así encontramos que la evolución de la densidad de nanopartículas en el tiempo está dada por:

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right) = \Gamma_B \omega(T) \nabla^2 \rho. \quad (16)$$

Resultados

En el modelo C, redefinimos la energía libre del sistema como la suma de las energías libres en los modelos A y B más un término de acoplamiento de la siguiente manera:

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_A + \mathcal{F}_B + \int dV \frac{\alpha}{2} \rho S^2, \quad (17)$$

de modo que las ecuaciones dinámicas de los campos son:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\Gamma_S \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta S} \right) \quad (18)$$

que podemos reescribir como:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\Gamma_S \left[rS + uS^3 - \kappa \nabla^2 S + \alpha \rho S \right] \quad (19)$$

y

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \Gamma_\rho \nabla^2 \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \rho} \right), \quad (20)$$

esta expresión la podemos reescribir como se muestra en la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \Gamma_\rho \left(\omega(T) \nabla^2 \rho + \frac{\alpha}{2} S^2 \right) \quad (21)$$

Con la intención de adimensionalizar las ecuaciones (19) y (21) proponemos los siguientes cambios de variable:

$$\begin{aligned} R &= \frac{\Gamma_\rho \omega}{\Gamma_S \kappa}, \\ \alpha' &= \frac{\alpha^2}{2u\omega}, \\ S &= \left(\frac{|r|}{u} \right)^{1/2} s, \\ \rho &= \left(\frac{|r|}{\alpha} \right) c, \\ \tau &= \Gamma_S |r| t, \\ \mathbf{x}' &= \left(\frac{|r|}{\kappa} \right)^{1/2} \mathbf{x}. \end{aligned}$$

(22)

Sustituyendo las igualdades de (22) en las ecuaciones (19) y (21) estas se pueden reescribir como se muestra en (23) y (24).

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \nabla^2 s - \text{sgn}(r)s - s^3 - cs \quad (23)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = R\nabla^2(c + \alpha's^2) \quad (24)$$

Deseamos hacer un análisis de estabilidad lineal, para ello haremos un desarrollo en serie de Taylor a primer orden de los términos s y c alrededor de s_0 y c_0 de modo que podemos analizar qué les pasa a los parámetros s y c ante pequeñas perturbaciones Δs y Δc dadas por: $\Delta s = s - s_0$ y $\Delta c = c - c_0$. De modo que las ecuaciones de evolución temporal de las perturbaciones son las siguientes:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Delta s}{\partial t} &= \left(\frac{\partial s}{\partial t} \right) - \left(\frac{\partial s_0}{\partial t} \right) \\ &= \nabla^2 s - rs - s^3 - cs - [\nabla^2 s_0 - rs - s_0^3 - c_0 s_0] \\ &= \nabla^2 (s_0 + \Delta s) - r(s_0 + \Delta s) - c(s_0 + \Delta s) - s_0^3 - 3s_0^2 \Delta s - [\nabla^2 s_0 - rs - s_0^3 - c_0 s_0] \\ &= (\nabla^2 - r - 3s_0^2 - c_0) \Delta s - s_0 \Delta c \end{aligned} \quad (25)$$

y

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Delta c}{\partial t} &= \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) - \left(\frac{\partial c_0}{\partial t} \right) \\ &= R\nabla^2(c + \alpha's^2) - [R\nabla^2(c_0 + \alpha's_0^2)] \\ &= R\nabla^2(c_0 + \Delta c + \alpha'(s_0^2 + 2s_0 \Delta s)) - [R\nabla^2(c_0 + \alpha's_0^2)] \\ &= R\nabla^2(\Delta c + \alpha'(2s_0 \Delta s)) \end{aligned} \quad (26)$$

Si aplicamos una transformada de Fourier a estas ecuaciones obtenemos:

$$\frac{\partial \Delta s}{\partial t} = (-k^2 - r - 3s_0^2 - c_0) \Delta s - s_0 \Delta c \quad (27)$$

y

$$\frac{\partial \Delta c}{\partial t} = Rk^2(\Delta c + \alpha'(2s_0\Delta s)) \quad (28)$$

que podemos reescribir en forma matricial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Delta s \\ \Delta c \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -k^2 - r - 3s_0^2 - c_0 & -s_0 \\ -2Rk^2s_0\alpha' & -Rk^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta s \\ \Delta c \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{M} \begin{pmatrix} \Delta s \\ \Delta c \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (29)$$

La solución a este sistema está dada por:

$$\begin{pmatrix} \Delta s \\ \Delta c \end{pmatrix} = A_1 \mathbf{v}_1 e^{\lambda_1(k)t} + A_2 \mathbf{v}_2 e^{\lambda_2(k)t} \quad (30)$$

donde \mathbf{v}_1 y \mathbf{v}_2 son eigenvectores y λ_1 y λ_2 eigenvalores de la matriz \mathbf{M} . Notemos que si $\text{Re}(\lambda_i) > 0$ la amplitud de la perturbación aumenta exponencialmente con el tiempo, por lo que en tal caso la solución es inestable.

Consideremos el caso experimental en el que nos encontramos en una temperatura por encima de la transición de fase y bajamos súbitamente la temperatura del sistema debajo de la temperatura de transición. Esto es equivalente a pasar de un valor de la función de $\text{sgn}(r) = 1$ a $\text{sgn}(r) = -1$. Originalmente el fluido es homogéneo e isótropo, por lo tanto $s_0 = 0$, en este caso la matriz \mathbf{M} es diagonal:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} -k^2 - \text{sgn}(r) - c_0 & 0 \\ 0 & -Rk^2 \end{pmatrix} \quad (31)$$

y sus eigenvalores λ_1 y λ_2 se muestran en las ecuaciones (32) y (33).

$$\lambda_1 = -k^2 - \text{sgn}(r) - c_0 \quad (32)$$

$$\lambda_2 = -R(T)k^2 \quad (33)$$

Notemos que $\lambda_1(k)$ es una parábola cóncava hacia abajo con vértice en $(0, -\text{sgn}(r) - c_0)$. Por esa razón, si $\text{sgn}(r) + c_0 > 0$ el eigenvalor λ_1 sólo toma valores negativos para todo número de onda k y el término $A_1 \mathbf{v}_1 e^{\lambda_1(k)t}$ en la ecuación (30) decae exponencialmente en el tiempo. Esto quiere decir que los modos con cualquier número de onda k son estables.

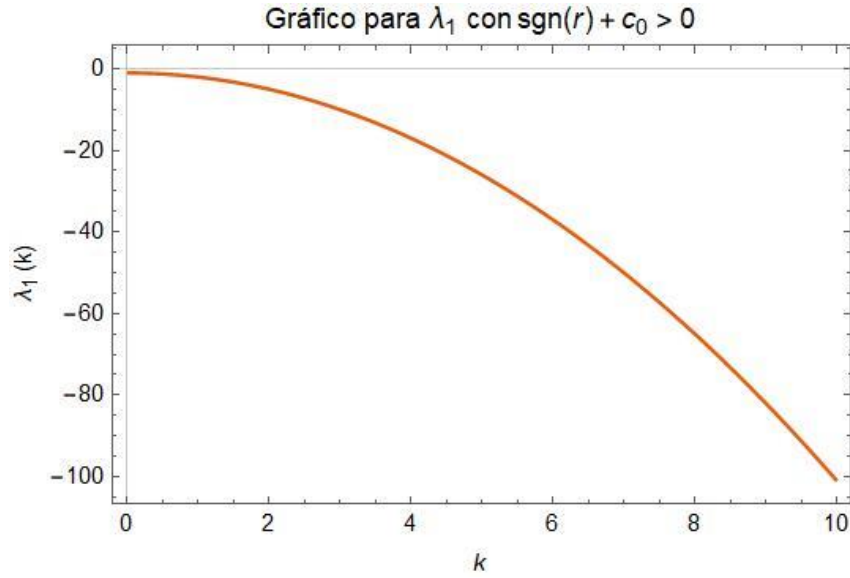


Figura 1: Para valores de $\text{sgn}(r) + c_0 > 0$ sucede que $\lambda_1 < 0$. En este caso todos los modos son estables.

Por otro lado, si $\text{sgn}(r) + c_0 < 0$ el término $A_1 \mathbf{v}_1 e^{\lambda_1(k)t}$ es inestable para números de onda $k < \sqrt{-(\text{sgn}(r) - c_0)}$. Lo anterior se muestra en la Figura 2.

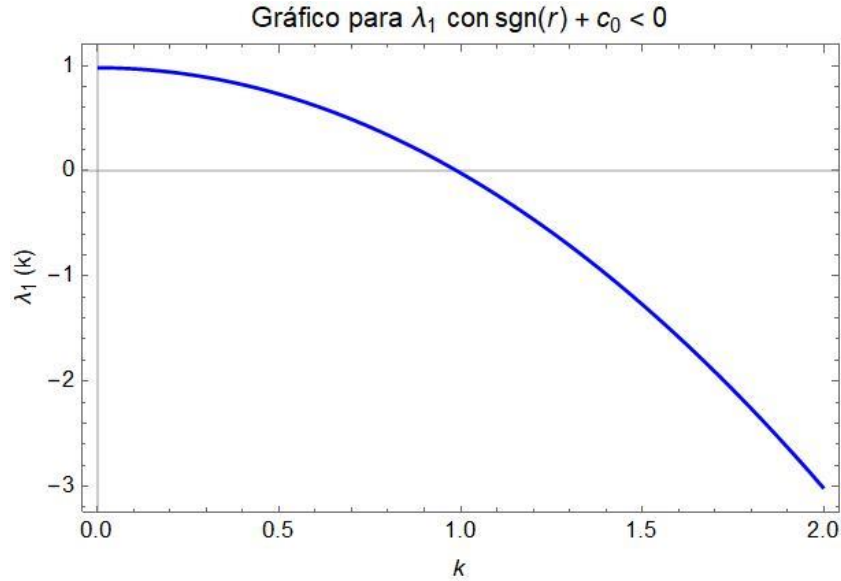


Figura 2: Para valores negativos de $\text{sgn}(r) + c_0$ la perturbación crece exponencialmente si k es lo suficientemente pequeña.

Interpretamos lo anterior de la siguiente manera: ahora las perturbaciones en el parámetro de orden s se vuelven inestables para perturbaciones con una longitud de onda mayores a la longitud de onda crítica λ_c dada por la siguiente expresión:

$$\lambda_{1c} = \frac{2\pi}{\sqrt{1-c_0}}. \quad (34)$$

Analizando al segundo eigenvalor $\lambda_2(k)$, notamos que es una parábola con vértice en el origen y es cóncava hacia abajo si $R(T) > 0$. En ese caso, el término $A_2 \mathbf{v}_2 e^{\lambda_2(k)t}$ de la ecuación (30) decae exponencialmente en el tiempo y todos los modos son estables independientemente de su número de onda k . Antes del presente trabajo, este había sido el único caso estudiado porque para la energía libre de esferas duras $R(T)$ es siempre positivo.

Un descubrimiento importante de este trabajo es que en el caso de Lennard-Jones es necesario examinar el caso $R(T) < 0$, en el que la perturbación crece exponencialmente en el tiempo para todo número de onda k .

Regresando a la definición de $R = \frac{\Gamma_\rho \omega}{\Gamma_S \kappa}$, comparando las ecuaciones (13) y (14) encontramos que $\omega(T)$ se rige por la siguiente ecuación:

$$\omega(T) = k_B \left[\frac{4}{3} \pi (T d(T)^3 - 3a_0) - \frac{2\pi b_0}{T} \right] \quad (35)$$

cuyo gráfico se muestra a continuación, junto con el del parámetro $\omega(T)$ para el caso de esferas duras.

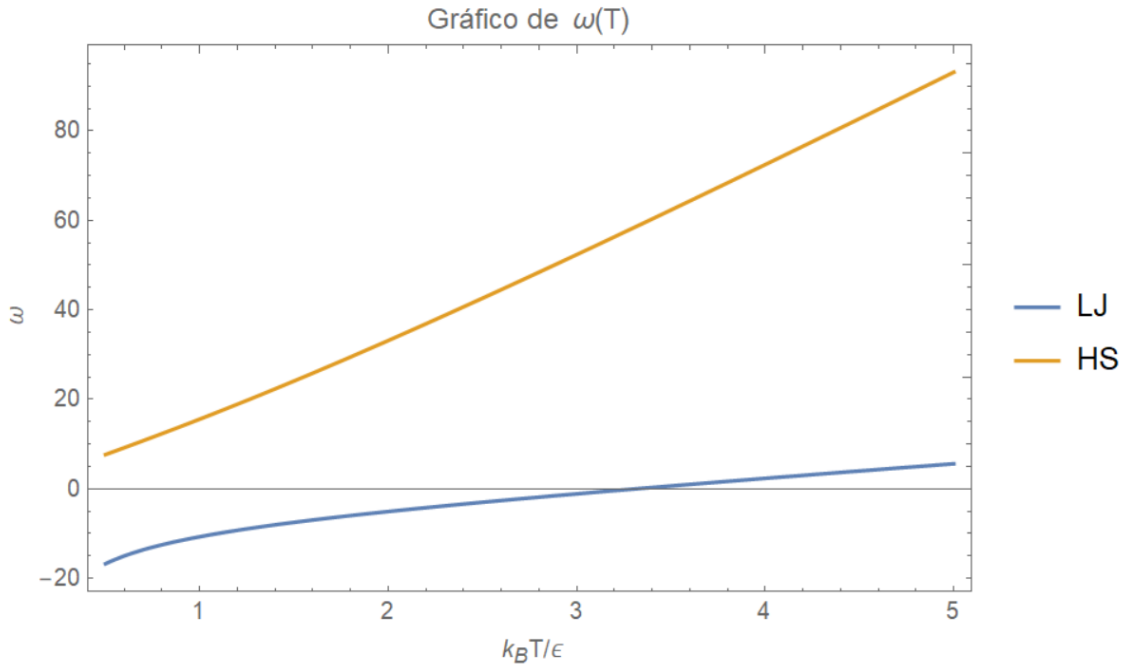


Figura 3: Veamos como para valores de T menores a $T_\omega \approx 3.32$ $\omega(T)$ toma valores negativos, en el caso de esferas duras $\omega(T)$ siempre es positiva.

Del gráfico es evidente que para $T < T_\omega \approx 3.32$, $\omega(T)$ es negativo, y por lo tanto R , también lo es. Este valor de T_ω se corresponde con el de la temperatura de

Boyle para un fluido de LJ reportado por Stephan y Deiters (2020), es decir, es la temperatura para la cual el segundo coeficiente virial de un fluido de Lennard-Jones cambia de signo. Según nuestro modelo de energía libre, las perturbaciones en la concentración de partículas con k arbitraria serán inestables para temperaturas inferiores a la temperatura de Boyle T_ω .

Hemos encontrado una nueva causa de inestabilidad del sistema relacionada con la atracción entre las nanopartículas. Estos efectos han de considerarse toda vez que las energías de atracción entre las nanopartículas se pueden estimar de la temperatura a la que se desensamblan las estructuras que éstas forman. Atzin et al. (2018) reportan que los micro cascarones formados por nanopartículas se desensamblan a una temperatura T_{\max} entre 115 °C y 125 °C, de donde podemos estimar que las energías de interacción entre nanopartículas deben ser del orden de $E = R T_{\max} = 3.22$ kJ/mol. Utilizando este valor para obtener el parámetro $\epsilon = E/N_A$ del potencial de Lennard-Jones, calculamos $T_\omega \approx 1300$ K por lo que bajo las condiciones experimentales el término $\omega(T)$ es negativo.

Un gráfico de la energía libre f , dada por la ecuación (12), nos muestra que por debajo de la temperatura T_ω las partículas pueden disminuir su energía si se juntan entre sí, aumentando su densidad. Esto es lo que provoca la inestabilidad que encontramos con el segundo eigenvalor λ_2 .

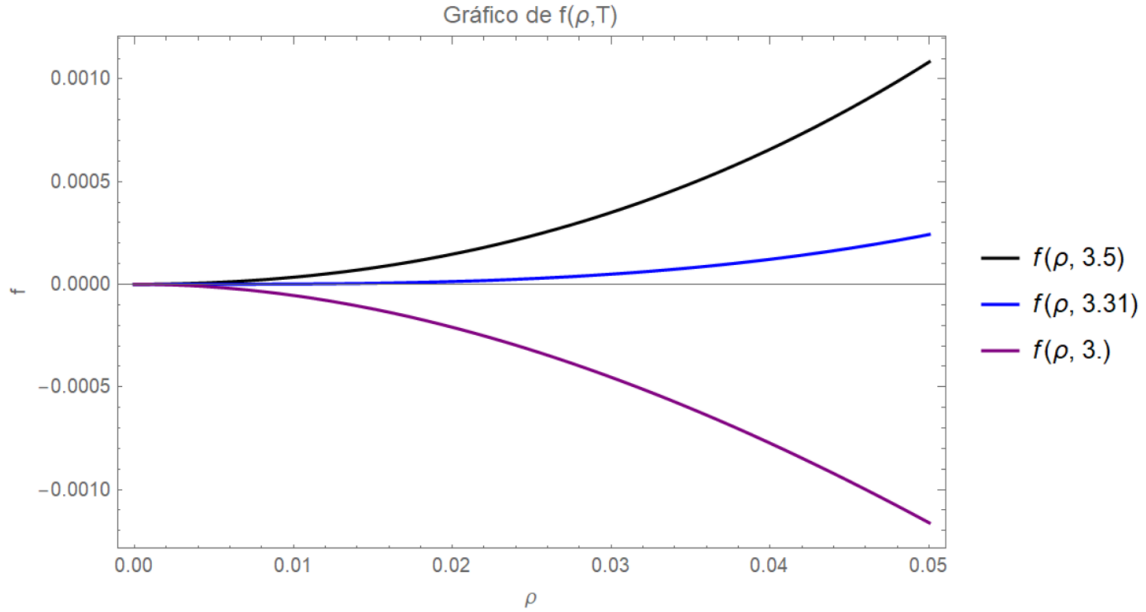


Figura 4: Para temperaturas menores a T_ω f decrece a medida que aumenta la densidad.

Como en los sistemas reales no se observa inestabilidad para perturbaciones con longitudes de onda cortas, necesitamos reconsiderar nuestro modelo de energía libre para las nanopartículas. Para evitar las inestabilidades surgidas en el sistema como resultado de las interacciones de LJ, debemos agregar un término que

penalice energéticamente a las nanopartículas por la generación de superficie que ocurre cuando éstas se agregan. Una forma tentativa de hacerlo es con la ecuación de Cahn-Hilliard:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 (c^3 - c - \gamma \nabla^2 c). \quad (36)$$

Esta ecuación describe la descomposición espinodal de una mezcla binaria. Sin embargo, su intervalo de validez es cerca de la densidad crítica del sistema y debido a que las condiciones experimentales consideradas están cerca de $\rho = 0$, nosotros no podemos usar la ecuación de Cahn-Hilliard (pues nos encontramos lejos de la densidad crítica). No obstante, podemos añadir a nuestro modelo un término de gradiente cuadrado de la densidad, como el que se utiliza en la ecuación de Cahn-Hilliard, para considerar los efectos de la tensión superficial sobre el sistema. Dicho término es el que corresponde a $-\gamma \nabla^4 c$. Cuando agregamos este término a la ecuación (28) el eigenvalor λ_2 se transforma en:

$$\lambda_2 = -Rk^2 - \gamma k^4. \quad (37)$$

Como vemos ahora, para los valores de R negativos que generan inestabilidades en el sistema, podemos definir una longitud de onda crítica λ_{2c}

$$\lambda_{2c} = 2\pi \sqrt{\frac{\gamma}{|R|}}, \quad (38)$$

tal que todas las perturbaciones con longitudes de onda menores a ese valor decaen. Como se observa en la ecuación anterior, a medida que el parámetro γ aumenta, el sistema se vuelve estable ante perturbaciones con longitudes de onda cada vez mayores, o de manera equivalente a números de onda k menores.

Conclusiones

A manera de síntesis, podemos decir que se ha realizado la extensión del análisis de condiciones de estabilidad lineal de una mezcla de esferas duras y nemáticos al caso de nanopartículas de LJ y nemáticos. Se han alcanzado los objetivos planteados al principio del presente documento y además se ha extendido el análisis inicialmente planteado al añadir a las ecuaciones dinámicas un término análogo al de tensión superficial de la ecuación de Cahn-Hilliard, para plantear una solución a la inestabilidad del sistema descrita en los párrafos precedentes.

Los resultados aquí planteados tienen un alcance limitado, debido a la linealización de las ecuaciones de evolución temporal del sistema. Sin embargo, son importantes porque abren un camino para plantear la solución numérica de las ecuaciones dinámicas no lineales del sistema. Por tanto, hemos propuesto seguir ese camino en un Proyecto Terminal II, como continuación del presente trabajo, con el fin de estudiar de manera más robusta el comportamiento del sistema.

Bibliografía

1. Atzin, N., Guzmán, O., Gutiérrez, O., Hirst, L. S., & Ghosh, S. (2018). Free-energy model for nanoparticle self-assembly by liquid crystal sorting. *Physical Review E*, 97(6). Doi:10.1103/physreve.97.062704
2. Cross, M., & Greenside, H. (2009). *Pattern formation and dynamics in nonequilibrium systems*. Cambridge, UK: Cambridge University Press.
3. Elder, K. R., Morin, B., Grant, M., & Desai, R. C. (1991). Late-time theory for the effects of a conserved field on the kinetics of an order-disorder transition. *Physical Review B*, 44(13), 6673-6688. Doi:10.1103/physrevb.44.6673
4. Hohenberg, P. C., & Halperin, B. I. (1977). Theory of dynamic critical phenomena. *Reviews of Modern Physics*, 49(3), 435-479. Doi:10.1103/revmodphys.49.435
5. Rodarte, A. L., Cao, B. H., Panesar, H., Pandolfi, R. J., Quint, M., Edwards, L., . . . Hirst, L. S. (2015). Self-assembled nanoparticle micro-shells templated by liquid crystal sorting. *Soft Matter*, 11(9), 1701-1707. doi:10.1039/c4sm02326a
6. Oswald, P., & Pieranski, P. (2005). *Nematic and cholestreric liquid crystals: Concepts and physical properties illustrated by experiments*. Boca Raton, London: CRC Press.
7. Stamatoiu, O., Mirzaei, J., Feng, X., & Hegmann, T. (2012). Nanoparticles in Liquid Crystals and Liquid Crystalline Nanoparticles. In 1041543717 796908907 C. Tschierske & 1041543718 796908907 T. Bellini (Authors), *Liquid crystals materials design and self-assembly* (pp. 331-394). Berlin: Springer.
8. Stephan, S., Staubach, J., & Hasse, H. (2020). Review and comparison of equations of state for the Lennard-Jones fluid. *Fluid Phase Equilibria*, 523, 112772. Doi:10.1016/j.fluid.2020.112772



Juan Manuel Noriega Hernández



Vo. Bo. Dr. Orlando Guzmán López