

---

---

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE QUERÉTARO**

**FACULTAD DE INGENIERÍA**

**AUTOENSAMBLADO DE PARTÍCULAS  
CORE-CORONA EN 2 DIMENSIONES CON  
DINÁMICA MOLECULAR**

**T E S I S**

Para obtener el título de:

**Ingeniero Físico**

Presentada por:

**Mariana Guadalupe Posadas Zamarripa**

Directores de Tesis:

**Dra. Beatriz Millán Malo**

**Dr. Saúl Hernández Hernández**

**Querétaro, México**

**Septiembre, 2023**



Dirección General de Bibliotecas y Servicios Digitales  
de Información



Autoensamblado de partículas core-corona en 2  
dimensiones con dinámica molecular

**por**

Mariana Guadalupe Posadas Zamarripa

se distribuye bajo una [Licencia Creative Commons  
Atribución-NoComercial-SinDerivadas 4.0  
Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

**Clave RI:** IGLIN-272175

---

## SINODALES

Dra. Beatriz Marcela Millán Malo

*Universidad Autónoma de Querétaro*

Dr. Saúl Iván Hernández Hernández

*Universidad Autónoma de Querétaro*

Dra. María Lucero Gómez Herrera

*Universidad Autónoma de Querétaro*

Dr. Cristian Felipe Ramírez Gutiérrez

*Universidad Autónoma de Querétaro*



© 2023 - Mariana Guadalupe Posadas Zamarripa

All rights reserved.



*Para las niñas*





# Agradecimientos

Agradezco principalmente a mis papás, por siempre apoyarme y acompañarme, a mi hermana por siempre alentarme en los momentos más complicados y acompañarme en mis momentos más estresantes. A mis amigas, que siempre estuvieron ahí, acompañándome en este proceso y contestando.

A mis asesores, Dra. Beatriz Millán Malo y Dr. Saúl Iván Hernández Hernández por guiarme y apoyarme, durante la realización del proyecto. Especial agradecimiento al Dr. Gabriel Óscar Ibáñez García, por su asesoría en conceptos, planteamiento del problema, códigos, técnicas de visualización, representación, análisis y discusión de resultados, y revisión de tesis. Al Ing. Álvaro Alexis Coreno Cortes por siempre apoyarme, aconsejarme y siempre responder mis preguntas.

Agradezco al proyecto UNAM-DGAPA- IN113523 por la beca recibida y al proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-276 por el tiempo de cómputo. También agradezco a Alejandro de León Cuevas, Alejandro Ávalos Fernández y Luis Alberto Aguilar Bautista del LAVIS-UNAM por su apoyo técnico y tiempo de cómputo. También al proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-087.



# Resumen

Los coloides son mezclas en donde las partículas de una o más sustancias se dispersan en otra sustancia llamada medio continuo. Una propiedad de estos sistemas es su capacidad de autoensamblarse, que se refiere a cuando las partículas o moléculas se ordenan sin necesidad de una intervención externa. Recientemente en varias investigaciones de estos sistemas se han encontrado formaciones cuasicristalinas [1][2][3], en particular el grupo de investigación de Pérez-Lemus usó el potencial de tangente hiperbólica por medio de simulación molecular Monte Carlo para un sistema de dos componentes. En este trabajo de tesis se estudiará el autoensamblado de un sistema coloidal de una sola componente en dos dimensiones con el modelo core-corona con un potencial de tangente hiperbólica únicamente con interacción repulsiva por Dinámica Molecular. Los parámetros del potencial son el tamaño del core, el tamaño de la corona y el valores de la energía  $\epsilon_0$ . Se buscó el tipo de autoensamblado para diferentes densidades, se estudiaron  $\rho = 0.50$  y  $\rho = 0.55$  y desde  $\rho = 0.58$  hasta  $\rho = 0.65$ , con un incremento de 0.01, buscando el equilibrio del sistema a una temperatura de 0.1. Para la caracterización de los autoensamblados se utilizaron patrones de difracción, diagramas de Voronoi, función de distribución radial y factor de estructura con el objetivo de identificar si hubiera sistemas ordenados y en su caso, cuáles son las simetrías rotacionales de estas estructuras. Los resultados encontrados más relevantes fueron diversas estructuras ordenadas y algunas amorfas; en la densidad  $\rho = 0.50$  se encontró una estructura ordenada que presenta stripes con simetría rotacional de orden 2 y gemelamiento; para las densidades de  $\rho = 0.62$  hasta  $\rho = 0.65$ , se encontró que a medida que nos acercábamos a la densidad de  $\rho = 0.64$  se observaban estructuras aperiódicas cada vez mejor definidas lo cual se revela en los patrones de difracción; justo en  $\rho = 0.64$  se encontró un patrón cuasicristalino con simetría 18 y para densidades mayores está simetría desaparece.



# Contents

<b>Agradecimientos</b>	<b>i</b>
<b>Resumen</b>	<b>iii</b>
<b>Contents</b>	<b>v</b>
<b>List of Figures</b>	<b>vii</b>
<b>List of Tables</b>	<b>ix</b>
<b>1 Introducción</b>	<b>1</b>
1.1 Motivación . . . . .	1
1.2 Descripción del Problema . . . . .	1
1.3 Hipótesis . . . . .	2
1.4 Objetivos . . . . .	2
1.4.1 Objetivos Específicos . . . . .	2
1.5 Estructura de Tesis: . . . . .	2
<b>2 Antecedentes</b>	<b>5</b>
2.1 Estructuras Amorfas . . . . .	5
2.2 Cristales . . . . .	5
2.2.1 Red Cristalina . . . . .	6
2.2.2 Simetría de Cristales en 2 Dimensiones . . . . .	7
2.3 Cuasicristales . . . . .	8
2.3.1 Espacio Recíproco . . . . .	8
2.3.2 Teselados de Penrose . . . . .	9
2.3.3 Redes Cuasicristalinas . . . . .	9
2.3.4 Tipos de Cuasicristales . . . . .	10
<b>3 Materia Condensada Blanda</b>	<b>11</b>
3.1 Coloides . . . . .	11
3.1.1 Interacción Coloidal . . . . .	12
3.1.2 Coloides Core-Corona . . . . .	12
3.2 Autoensamblado . . . . .	12

<b>4</b>	<b>Termodinámica</b>	<b>15</b>
4.1	Mecánica Estadística . . . . .	15
4.2	Ensamblés . . . . .	15
4.2.1	Ensamble NVT . . . . .	15
4.2.2	Ensamble NVE . . . . .	16
<b>5</b>	<b>Simulación Molecular</b>	<b>17</b>
5.1	Simulación por Dinámica Molecular . . . . .	17
5.2	Modelos de Grano Grueso . . . . .	17
5.3	Potenciales de Interacción . . . . .	18
5.3.1	Potencial Lennard-Jones . . . . .	18
5.4	Termostato de Nose-Hovert . . . . .	18
5.5	LAMMPS . . . . .	18
5.6	Freud . . . . .	18
5.7	Caracterización . . . . .	18
5.7.1	Patrón de Difracción . . . . .	18
5.7.2	Función de Distribución Radial . . . . .	19
5.7.3	Factor de Estructura . . . . .	19
5.7.4	Diagrama de Voronoi . . . . .	20
<b>6</b>	<b>Metodología</b>	<b>21</b>
6.1	Especificación . . . . .	21
6.2	Diseño . . . . .	21
6.3	Implementación . . . . .	21
6.3.1	Propiedades del Sistema . . . . .	21
6.3.2	Potencial Implementado . . . . .	22
6.3.3	Código . . . . .	23
<b>7</b>	<b>Resultados y Discusión</b>	<b>27</b>
7.1	Primera Exploración . . . . .	28
7.2	Segunda Exploración . . . . .	29
7.2.1	Barrido de Temperaturas . . . . .	30
7.3	Tercera Exploración . . . . .	32
7.4	Última exploración . . . . .	33
7.4.1	Densidad 0.50 . . . . .	34
7.4.2	Densidad 0.55 . . . . .	36
7.4.3	Densidad 0.62 . . . . .	39
7.4.4	Densidad 0.63 . . . . .	41
7.4.5	Densidad 0.64 . . . . .	42
7.4.6	Densidad 0.65 . . . . .	44
<b>8</b>	<b>Conclusión</b>	<b>47</b>
	<b>References</b>	<b>51</b>
.1	Códigos . . . . .	52
.1.1	Código de Simulación en LAMMPS . . . . .	52

# List of Figures

2.1	Sólidos . . . . .	5
2.2	14 Redes de Bravais . . . . .	6
2.3	Simetrías de Cristales [4] . . . . .	7
2.4	Cuasicristal . . . . .	8
2.5	Teselado de Penrose . . . . .	9
3.1	Partícula Core Corona . . . . .	12
5.1	Función de Distribución radial . . . . .	19
5.2	Diagrama de Voronoi . . . . .	20
6.1	Potencial Implementado . . . . .	22
6.2	Curva de Temperatura . . . . .	23
7.1	Patrones de Difracción de $N = 2048$ . . . . .	28
7.3	Patrones de Difracción de Barridos de Temperatura . . . . .	30
7.4	Patrones de Difracción de Barridos de Temperatura . . . . .	31
7.6	Patrones de Difracción . . . . .	32
7.7	Patrones de Difracción de Barridos de Temperatura . . . . .	33
7.9	Caracterización de $\rho = 50$ . . . . .	35
7.10	Diagrama de Voronoi . . . . .	36
7.11	Caracterización de $\rho = 55$ . . . . .	37
7.12	Caracterización de $\rho = 55$ . . . . .	37
7.13	Diagrama de Voronoi . . . . .	38
7.14	Caracterización de $\rho = 62$ . . . . .	39
7.15	Diagrama de Voronoi . . . . .	40
7.16	Caracterización de $\rho = 63$ . . . . .	41
7.17	Diagrama de Voronoi . . . . .	42
7.18	Caracterización de $\rho = 64$ . . . . .	42
7.19	Caracterización de $\rho = 64$ . . . . .	43
7.20	Diagrama de Voronoi . . . . .	43
7.21	Caracterización de $\rho = 65$ . . . . .	44
7.22	Caracterización de $\rho = 65$ . . . . .	44
7.23	Diagrama de Voronoi . . . . .	45





# List of Tables

2.1	Redes 2 Dimensionales . . . . .	6
-----	---------------------------------	---



---

# Introducción

La simulación molecular y el estudio de los coloides siempre ha estado de la mano, sobre todo cuando las nuevas tecnologías brindan ayuda para hacer mejores aproximaciones teóricas que ayudan a poner guías para aquellos que realizan experimentos. Los coloides core-corona, han sido muy estudiados sobre todo por sus propiedades de autoensamblaje, lo cual les permite obtener estructuras amorfas, cristalinas e incluso estructuras cuasicristalinas. [5] [1]

En este trabajo de tesis exploramos las interacciones de partículas core-corona bajo un potencial de interacción de tangente hiperbólica en dos dimensiones con dinámica molecular; se hizo una variación en las densidades y al igual que una exploración de temperaturas. Los resultados fueron caracterizados al obtener la función de distribución radial, factor de estructura, patrón de difracción y diagrama de Voronoi.

## 1.1 Motivación

El uso de la simulación molecular como instrumento para hacer un pre experimento ha brindado muchas ventajas que permiten realizar exploraciones más extensas en la variación de parámetros como la temperatura y la densidad, es decir, se puede predecir los parámetros o zonas de interés en los cuales es interesante o posible realizar un experimento físico.

Cuando se habla de coloides core-corona, existen muchos estudios en donde, a partir de diferentes técnicas de simulación molecular, Monte Carlo y Dinámica Molecular, se observan diversas fases. [2] [6]

Otra de las principales motivaciones para la realización de este proyecto son los resultados en trabajos ya publicados de Pérez-Lemus y Pattabhiraman, en donde, al hacer exploraciones sobre coloides core-corona, se encontraron fases cuasicristalinas, que es uno de mis temas de interés.

## 1.2 Descripción del Problema

Actualmente se sabe que los sistemas cuasiperiodicos existen en una gran variedad de sistemas físicos, pero no son fácilmente detectables.[7] Experimentalmente muchas veces es complicado detectar este ordenamiento ya que se requieren condiciones ambientales específicas de microscopia

electrónica por ejemplo. Por otro lado, teóricamente se desconoce que tipos de potenciales intermoleculares dan lugar a estos sistemas. Uno de los resultados más interesantes de los autoensamblados de coloides es que en ciertas condiciones de parámetros para un potencial dado se presentan fases cuasicristalinas. Tratar de elucidar el tipo de potencial y los parámetros que dan lugar a un sistema cuasiperiódico es uno de los retos más interesantes que se estudiarán en esta tesis.

### 1.3 Hipótesis

Es posible obtener estructuras ordenadas de un sistema de partículas core-corona de una misma especie en dos dimensiones por dinámica molecular al someterlo a un potencial de tangente hiperbólica puramente repulsivo.

$$U(r) = \epsilon_0 \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} + 0.5 (1 - \tanh(k(r - \lambda))) \right] \quad (1.1)$$

### 1.4 Objetivos

Analizar el autoensamblado de partículas core-corona a través de un modelo de simulación por Dinámica Molecular a partir de un potencial de tangente hiperbólica (soft core soft shoulder) [8], al variar los parámetros de densidad y temperatura para parámetros del potencial fijos.

#### 1.4.1 Objetivos Específicos

1. Determinar los parámetros en el modelo de potencial para la formación de sistemas ordenados con base a los resultados experimentales reportados en la literatura.
2. Desarrollar un algoritmo de simulación de Dinámica Molecular utilizando la librería de Lammmps con el potencial planteado en la hipótesis y haciendo una variación en densidad y temperatura del sistema.
3. Estudiar el tipo de autoensamblado de cada simulación haciendo una caracterización de resultados por medio de la obtención del patrón de difracción, función de distribución radial, factor de estructura y diagrama de Voronoi.
4. Análisis de la formación de estructuras.

### 1.5 Estructura de Tesis:

La tesis se conforma de:

- Capítulo 1, una breve introducción al proyecto.
- Capítulo 2, son los antecedentes, en donde hablamos sobre tipos de estructuras.
- Capítulo 3, un poco de materia condensada blanda.

- Capítulo 4 y 5, sigue siendo parte de la teoría utilizada en el proyecto, donde se habla de la termodinámica y simulación molecular respectivamente.
- Capítulo 6, es la metodología usada en el proyecto.
- Capítulo 7, son los resultados y la discusión de los mismos.
- Capítulo 8, por último, son las conclusiones del proyecto.



---

# Antecedentes

Antes de entrar completamente en tema y hablar de simulaciones moleculares y caracterizaciones, primero, se debe de entender la forma en que la materia se encuentra si bien en este proyecto se tratan coloides, es importante recordar los tipos de ordenamiento de estructuras. Para tener contexto sobre el proyecto, se necesita tener nociones de que son las estructuras amorfas, los cristales y los cuasicristales.

## 2.1 Estructuras Amorfas

Los materiales amorfos, ya sean líquidos o sólidos, son estructuras que carecen de periodicidad, es decir, son estructuras desordenadas. También se puede decir que solo presentan los empaquetamientos que lo hace permanecer unidos, como se muestra en el inciso a de la figura 2.1. Al igual que presenta preferencia, para una distancia interatómica específica. [4] [9]

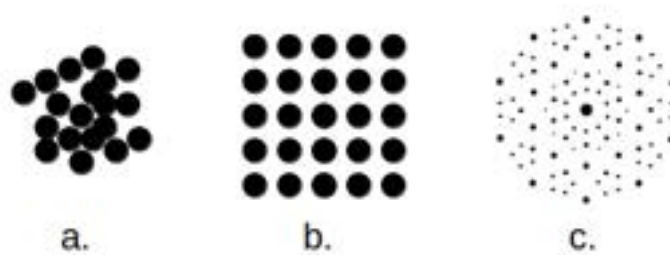


Figure 2.1: Sólidos

## 2.2 Cristales

Un cristal puede ser definido como un sistema sólido ordenado periódicamente en tres dimensiones. Los cristales no necesariamente tienen que estar ordenados atómicamente, sino que sus componentes, ya sean átomos o moléculas, pueden presentar el ordenamiento periódico. Una forma matemática de representar los cristales es por medio de redes periódicas. [10]

### 2.2.1 Red Cristalina

Una red cristalina es un conjunto de puntos o celdas unidad que se repiten con bordes idénticos, a diferencia de los cristales estos pueden ser infinitos. [4]

REDES PLANAS		
Celda	Tipo de Celda	Parámetros de Red
Oblicua	P	$\alpha \beta \gamma$
Rectangular	P,C	$\alpha, \beta, \gamma = 90^\circ$
Cuadrada	P	$\alpha = \beta, \gamma = 90^\circ$
Hexagonal	P	$\alpha = \beta, \gamma = 120^\circ$

Table 2.1: Redes 2 Dimensionales

En dos dimensiones las redes cristalinas que se pueden encontrar son las descritas por la tabla 2.1. En la cual los tipos de celda se refiere a P, primitiva, es decir, que la celda simplemente se conforma con la unión de los vértices; mientras que la C, se refiere a que está centrada en la cara, por lo que se dice que tiene un punto en el centro de la red. [4] [11]

En tres dimensiones, las redes cristalinas son conocidas como las redes de Bravais, dentro de las cuales se encuentran todos los 230 grupos cristalinos. En la figura 2.2 podemos observarlas.

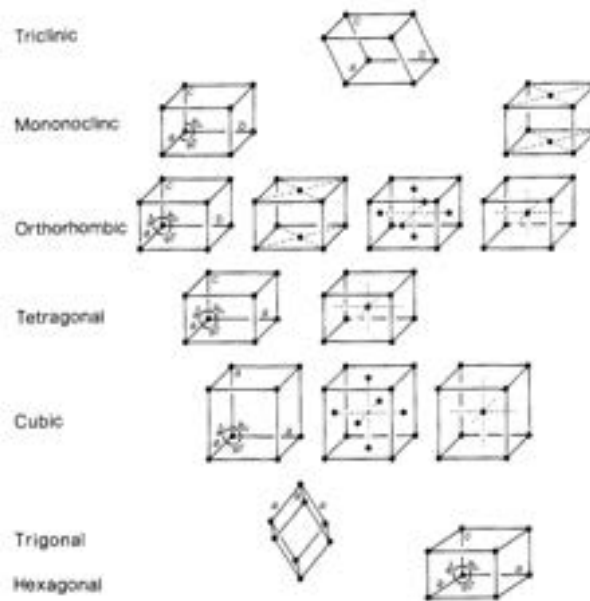


Figure 2.2: 14 Redes de Bravais



### 2.2.2 Simetría de Cristales en 2 Dimensiones

Una de las propiedades que define a los cristales son sus simetrías, es decir, cuentan con cuatro tipos de simetrías básicas, reflexión, rotación, inversión y roto-inversión además de la traslación.

La reflexión, o comúnmente conocida como simetría de espejo, se observa con relación a una línea y para un punto su imagen espejo se encuentra la misma distancia respecto a la línea especular. En dos dimensiones es lo mismo que una rotación de grado 2, ya que hace una vuelta de 180 grados. [4]

Matemáticamente, podemos describir a las rotaciones por medio de las ecuaciones 2.1.

$$M_X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad M_y = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \quad M_z = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

Las simetrías en los cristales dejan en claro que para que coexistan juntas las simetrías de rotación y traslación solo son permitidos ciertos órdenes de rotación, es decir, rotación de grado 1 que es una vuelta completa de 360°, de grado 2, con rotación de 180°; grado 3, con rotación de 120°, grado 4, con 90° y de grado 6, con 60 grados, todas representadas en la imagen 2.3 La rotación de grado 5, no está permitida dentro de la definición de cristal, y durante muchos años de investigación nunca se había encontrado un sólido con esta simetría. Fue hasta 1984 que Schetman encontró un patrón de difracción de electrones con simetría de orden 5 de aleación de Al-Mn; posteriormente se encontraron otras estructuras con simetrías "prohibidas", es decir, con 5, 10, 12, 18 y 20. [10] [4] [11]



Figure 2.3: Simetrías de Cristales [4]

## 2.3 Cuasicristales

Por muchos años se creyó que los cristales con rotaciones e inversiones de grado 5 existirían, lo cual correspondería a un grupo icosaedroal. Sin embargo, desde los años 60, debido al avance tecnológico, se empezaron a estudiar más a fondo los materiales y aquellos encontrados con esta característica eran ignorados por el hecho de cómo se tenían marcadas las características de los cristales.

En diciembre de 1984, en el artículo titulado "Metallic Phase with Long- Range Orientational Order and No Translational Symmetry", Dan Shechtman, demostró un patrón de difracción, el cual era parte de una estructura que contaba con rotaciones de grado 5. Esta, una aleación Al-Mn, la cual después de fundirse, fue enfriada muy rápido. [12]

En la Figura 2. de muestra la estructura de Al-Mn, cuenta con un eje rotacional de orden 5, como el que se muestra en la figura 2.4, además de que podemos notar como van creciendo de esta forma. De los primeros materiales estudiados que formaban parte de los cuasicristales, eran aquellas aleaciones, es decir, creadas de forma artificial. Los únicos reportados que se han estudiado y fueron minerales provenientes del espacio, en meteoritos.[7]

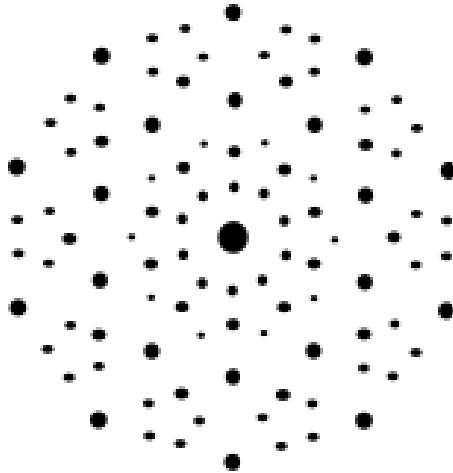


Figure 2.4: Cuasicristal

### 2.3.1 Espacio Recíproco

Cuando se tiene un patrón de difracción aperiódico, como en los cuasicristales, el difractograma en su mayor parte va a consistir en picos de difracción de Bragg, sin embargo para ello se debe de comprender el espacio recíproco, el cual es un precursor para entender los patrones de difracción, tomando la transformada de Fourier de una distribución de red atómica dada por la expresión de la ecuación 6, en donde  $k$  denota los vectores de espacio recíproco, mientras que  $r$  son los vectores

del espacio real. [13]

$$F(x) = \int_V \rho(r) e^{i\kappa \cdot r} dr \quad (2.2)$$

Pero al relacionar la transformada de Fourier con el espacio recíproco, decimos que es como una transformación lineal donde pasamos del vector de espacio real en donde se encuentran los átomos que conforman el sistema cuasicristalino a un correspondiente vector de espacio recíproco. [13]

### 2.3.2 Teselados de Penrose

Los teselados de Penrose, son un conjunto de patrones que se repiten de manera aperiódica sobre el espacio, es decir, no llenan completamente el espacio. Están relacionados con los cuasicristales, ya que se pueden observar ordenamientos de orden 5, correspondientes a un cuasicristal, los cuales se pueden observar en la imagen 2.5. [14] [15]

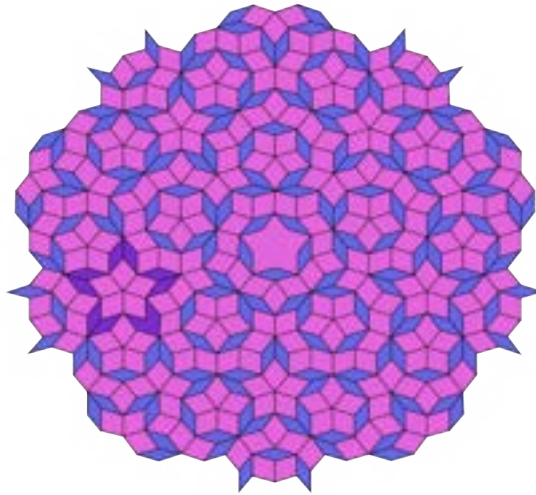


Figure 2.5: Teselado de Penrose

### 2.3.3 Redes Cuasicristalinas

El término fue introducido por A. Mackay en 1982, la red cuasicristalina es descrita como un arreglo de puntos en un espacio recíproco, donde cada punto tiene un índice que lo identifica con respecto a una base de vectores en donde la base dimensional es mayor que la dimensión del espacio real. Partiendo de 4 vectores base localizados en posiciones dentro de una rotación de orden 5, es decir, un arreglo ortogonal. Lo cual nos deja con una matriz espacial  $4 \times 4$ , sin embargo, Mackay se negó a llamar superred o hiperred, porque el término cuasi ya representaba el orden de un cristal en una estructura de más dimensiones. [16]

Una red cuasicristalina no tiene un un mínimo de distancia entre puntos, estas redes tenemos por ejemplo tenemos que para una red decagonal o icosaedral vectores de cinco a seis vectores.[7]

### 2.3.4 Tipos de Cuasicristales

Los cuasicristales icosaedros forman un grupo y los cuasicristales poligonales con simetría de rotación de orden 8, 10, 12. El primero se muestra en la aparición de puntos de difracción nítidos y el segundo en presencia de una simetría rotacional que no corresponde con las de cristales.

1. Los cuasicristales diédricos son periódicos en una dirección, por lo que consisten en una secuencia periódica de cortes con simetría de doce, dieciocho veces. Son cuasi periódicas en dos dimensiones. Hay una dirección periódica perpendicular a las capas cuasi-periódicas. [17]
2. Los cuasicristales icosaédricos, esto es cierto en todas las direcciones del espacio; no hay periodicidad alguna. Son cuasiperiódicas en tres dimensiones. No hay una dirección periódica. La simetría que determina el tipo de cuasicristales se ve por primera vez en su patrón de difracción. [17]

---

# Materia Condensada Blanda

Compuesta por muchos tipos como coloides, macromoléculas, moléculas ensambladas y moléculas ordenadas; la materia condensada blanda está sujeta a cambios y deformaciones en su estructura.

## 3.1 Coloides

Para entender mejor qué son los coloides, es importante retomar que es una solución y una suspensión, ya que se puede decir que los coloides se encuentra en un punto medio entre ambas.

Las soluciones son mezclas homogéneas, es decir, no podemos identificar sus componentes a primera vista, por ejemplo, agua con sal; las suspensiones son mezclas heterogéneas, por ejemplo agua y arena, una propiedad de las mismas, que cuando se deja en reposo una suspensión uno de los componentes de la misma se sedimenta. Entonces los coloides al ser el punto medio entre soluciones y suspensiones poseen características del otro, es decir, los coloides son mezclas heterogéneas, sin embargo, al dejar reposar un coloide no se sedimentará alguno de sus componentes.[18]

En otras palabras, los coloides son partículas dispersas, identificado como la fase dispersa, en un medio continuo, como un fluido. Se puede tomar como ejemplo agua con colorante, en donde las partículas dispersas son los pigmentos de un color y el medio continuo es el agua en que se dispersa. Lo mismo sucede con muchos más ejemplos como la leche, en donde partículas de mantequilla se encuentran en la mezcla.

Los coloides tienen la propiedad de formar estructuras ordenadas cuando las partículas que lo componen tienen características específicas y similar a los sólidos, los coloides cuando están ordenados también pueden ser caracterizados por DRX. [19] [18]

Algunas de las propiedades de los coloides son

1. **Efecto Tyndall**, también conocido como dispersión de Rayleigh, es cuando los haces de luz al chocar con partículas, este las hace visibles, en el caso de los coloides a la fase dispersa, por ejemplo cuando se observa polvo en el aire al prender una linterna. [18] [20]
2. **Movimiento Browniano**, descubierto por Robert Brown en 1827, consiste en los movimientos no lineales, zig-zag o aleatorios, que se presentan en las partículas de la fase dispersa. La

razón de este movimiento es que en cada momento una partícula de la fase dispersa va a estar interactuando con las partículas de la fase continua. [18] [21]

### 3.1.1 Interacción Coloidal

La interacción coloidal efectiva se define como el trabajo de llevar las partículas desde el infinito a una configuración donde las partículas estén separadas por una distancia  $r$ , desde sus centros. [19]

### 3.1.2 Coloides Core-Corona

#### Partículas Core-Corona

Las partículas Core-Corona, como lo dice su nombre, son las partículas que presentan un núcleo, donde su diámetro se representa con  $\sigma$ , en la mayoría de casos, sólido e impenetrable, y una corona, donde su diámetro está en términos de  $\sigma$  multiplicado por una variable  $\lambda$ . Gráficamente, se puede observar en la figura 3.1.

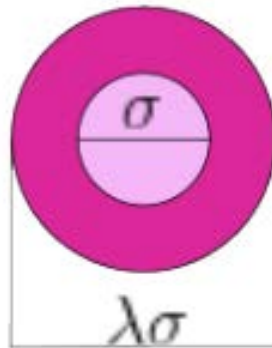


Figure 3.1: Partícula Core Corona

## 3.2 Autoensamblado

El autoensamblado es una propiedad que presentan los coloides en donde tienden a la organización debido a las interacciones entre sí, es decir, sin necesidad de ayuda externa al sistema. El autoensamblado se presenta en tipos, estático y dinámico. [22][23]

1. **Autoensamblado Estático**, se refiere a cuando un sistema está en equilibrio, ya sea local o global, y su energía no se disipa, para este tipo de autoensamblaje se necesita energía y cuando está formado, se encuentra un sistema estable.

2. **Autoensamblado Dinámico**, las interacciones que llevan al autoensamblaje suceden cuando su energía se disipa.

[22]





---

# Termodinámica

## 4.1 Mecánica Estadística

La mecánica estadística es aquella utilizada cuando se trata con diferentes sistemas, independientemente de la fase en la que se encuentra, y su objetivo es describir y predecir las propiedades de los mismos en términos de las partículas que los componen, por tanto, como todos los sistemas obedecen las leyes de la física, a partir de la mecánica estadística se pueden obtener propiedades microscópicas a través del estudio del comportamiento microscópico. [24] [25]

## 4.2 Ensembles

Existen varios tipos de ensembles termodinámicos, el ensemble micro-canónico, donde se mantiene la energía ( $E$ ), el volumen ( $V$ ) y el número de partículas ( $N$ ), como constante. El ensemble canónico, donde además de  $N$  y  $V$ , ahora la temperatura es la que se mantiene constante. También existe el ensemble gran canónico, con variables independientes  $N$ ,  $V$  y el potencial químico; y el ensemble isobárico-isotérmico, donde  $N$ ,  $P$  y  $T$  se mantienen. Para fines de este proyecto se profundizará en el ensemble micro-canónico y ensemble canónico. [24] [25]

### 4.2.1 Ensemble NVT

Los ensembles NVT son ensembles canónicos que por su nombre se refiere a que la temperatura, número de partículas y volumen son constantes. En donde partiendo de la función de partición canónica

$$Z(N, V, T) = \sum \exp^{-\beta E} \quad \text{donde} \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (4.1)$$

De donde la energía libre de Helmholtz se obtiene por medio de la ecuación 4.2

$$F(V, N, T) = -k_B T \ln Z \quad (4.2)$$

Se caracteriza por presentar máxima entropía y mínima energía libre. [26]

### 4.2.2 Ensamble NVE

Un ensamble NVE, por su nombre, se refiere a aquellos en donde la energía, número de partículas y energía se presenta constante. También conocido como el ensamble micro-canónico, el cual se describe como un sistema aislado con paredes adiabáticas. Con una función de partición

$$\Omega(N, V, E) \tag{4.3}$$

La cual podemos escribir como parte de la entropía

$$S(N, V, E) = k_B \ln \Omega(N, V, E) \tag{4.4}$$

[25]

# Simulación Molecular

## 5.1 Simulación por Dinámica Molecular

La simulación por dinámica molecular es un análogo a hacer un experimento en el mundo real, entonces básicamente lo que se hace es estudiar la interacción entre partículas en un sistema, por tanto, también se hacen mediciones y se resuelven ecuaciones de movimiento. [27]

La idea de una simulación de dinámica molecular es que se puede preparar una muestra y elegir un modelo con el que se quiere experimentar, el proceso que se lleva es el siguiente.

1. Tener un sistema de  $N$  partículas e identificar las condiciones iniciales además de las condiciones de frontera.
2. Resolver sus ecuaciones de movimiento de Newton hasta que las propiedades del sistema dejen de cambiar con el tiempo, es decir, hacer que el sistema se encuentre en equilibrio.
3. Realizar la medición, la cual se realiza cuando podemos describir lo observable como una función de la posición y momento de las partículas del sistema.

[28] [29] [27]

## 5.2 Modelos de Grano Grueso

Modelos de grano grueso constan de la simplificación de grados de libertad, es decir, no tomar la representación completa de las moléculas para así tener una representación a grande escala, por tanto, se eliminan variables de acuerdo la escala que prevalece y se ahorra tiempo de cómputo. Es una alternativa utilizada para sistemas muy grandes, una de sus grandes desventajas son la afectación que tiene sobre los resultados a distancias pequeñas, mientras que en distancias mayores se mantiene el resultado.[29] [28]

## 5.3 Potenciales de Interacción

### 5.3.1 Potencial Lennard-Jones

Propuesto por John Lennard-Jones en 1954, su potencial describe la interacción de partículas sujetas a dos fuerzas, la fuerza atractiva o fuerza de Van Der Waals y la fuerza repulsiva, también repulsión de Pauli. Es descrito por la ecuación 5.1, en donde el término elevado a la  $-12$  representa la fuerza repulsiva y el término elevado a la  $-6$  a la fuerza atractiva. Los términos  $\sigma$  y  $\epsilon$ , son la profundidad del potencial y la distancia entre partículas. [28]

$$U(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (5.1)$$

## 5.4 Termostato de Nose-Hovert

El termostato Nose-Hoover, comúnmente utilizado en ensamblajes canónicos, es un método de la dinámica molecular que tiene como objetivo mantener la temperatura en un promedio, dadas por colisiones estocásticas en un baño de calor. Por medio del hamiltoniano de Nose 5.2, el cual está construido de tal forma que  $Q$  es la masa efectiva.

$$H_{\text{Nose}} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \mathcal{U}(\mathbf{r}^N) + \frac{\xi^2 Q}{2} + L \frac{\ln s}{\beta} \quad (5.2)$$

[27]

## 5.5 LAMMPS

Código de uso libre desarrollado por el Departamento de Energía de EUA; LAMMPS es un simulador de dinámica molecular enfocado al modelado de materiales. Las siglas LAMMPS son un acrónimo para "Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator", el cual puede ser traducido como Simulador Masivo en paralelo de Átomos y Moléculas a gran escala. La librería del mismo ya cuenta con potenciales para materiales sólidos y para materia blanda, al igual que para sistemas mesoscópicos. [30]

## 5.6 Freud

Freud es una librería enfocada en el análisis de trayectorias generadas por dinámica molecular o simulaciones Monte Carlo. [31]

## 5.7 Caracterización

### 5.7.1 Patrón de Difracción

Un patrón de difracción es un gráfico que describe un sólido cristalino, el cual recoge los datos de intensidad en función del ángulo de difracción  $2\theta$  obteniéndose una serie de picos. Ahora los datos

se deben de tomar datos cada  $2\theta$ , ya que tienen como base a la ley de Bragg, como se muestra en la ecuación 2. En donde  $d$ , es la distancia interplanar,  $n$  el número de onda tomada en cuenta y  $\lambda$  es la longitud de onda que se está usando, en la mayoría de los casos, como se usa Difracción de Rayos X para obtener el patrón  $\lambda = 1.54$ .

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (5.3)$$

Los datos más importantes obtenidos a partir de un difractograma son la posición de los picos expresada en valores de  $\theta$  o  $2\theta$ , la intensidad de pico que pueden tomar como alturas de los picos o para trabajos de más precisión las áreas. Al pico más intenso se le asigna un valor de 100 y el resto se reescala respecto al más intenso. [11].

### 5.7.2 Función de Distribución Radial

Representada por  $g(r)$ , en simulación molecular se describe a la función de distribución radial como el radio entre el promedio de densidad  $\rho(r)$  a una distancia  $r$  desde cualquier átomo. Para obtenerse se utiliza la ecuación

$$g(\mathbf{r}) = 4\pi r^2 \rho dr \quad (5.4)$$

En otras palabras, es determinar el número de partículas que se encuentran a una distancia  $r + dr$  de una partícula inicial, como se muestra en la figura 5.1. Su inverso es el factor de estructura. [?]

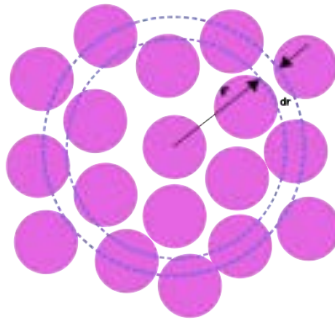


Figure 5.1: Función de Distribución radial

[27]

### 5.7.3 Factor de Estructura

El factor de estructura es la onda dispersada por los átomos de la celda unidad, por lo que se dice que describe como se ordena sistema dado por su coordenada fraccionaria  $(uvw)$  de cada átomo. Para obtener se deben de sumar todas las ondas dispersadas. La onda dispersada puede representarse por

$$Ae^{i\phi} = fe^{2\pi i(hu+kv+lw)} \quad (5.5)$$

En donde  $i$  representa al número imaginario,  $(uvw)$  a las coordenadas fraccionarias y  $(hkl)$  al plano. Entonces, si se toma una celda unidad con  $N$  átomos con coordenadas fraccionarias, entonces se

presenta como una suma el factor de estructura, representado por la ecuación.

$$F_{hkl} = \sum_1^N f e^{2\pi i(hu_N + kv_N + lw_N)} \quad (5.6)$$

Entonces el factor de estructura necesita extensiones sistemáticas, y nos regresa las posiciones de la celda unidad. [?]

#### 5.7.4 Diagrama de Voronoi

Nombrado por el matemático ruso Gregory Voronoi, quien lo definió en 1908 para estudiar el caso de un sistema  $n$ -dimensional. [32] A partir de puntos dispersos en un plano, el mismo se divide en polígonos en donde el centro de los polígonos es uno de los puntos dispersos, también se encuentra de forma en que los puntos formen enlaces entre sí. Como se muestra en la imagen 5.2, cada punto se encuentra dentro de una celda, las cuales sus límites son equidistantes entre dos o más puntos. [33]



Figure 5.2: Diagrama de Voronoi

---

# Metodología

## 6.1 Especificación

A specification should tell the reader what the software system is required to do.

## 6.2 Diseño

1. Estudiar la bibliografía, iniciando por todo lo relacionado con cuasicristales, al igual que la metodología referente a dinámica molecular, es decir, todo lo relacionado con Lammmps.
2. Determinar los parámetros que se usarán en el script, es decir, de presión, número de partículas, temperatura, iteraciones, tiempos de relajación que se utilizará durante las simulaciones.
3. Delimitar en que variable se hará un barrido al correr un script.
4. Hacer el script, utilizando Lammmps.
5. Realizar la simulación en tiempos adecuados hasta obtener una estructura cuasicristalina. Repetir hasta obtener los resultados deseados.
6. Extraer los datos, para posteriormente hacer la caracterización de los resultados.
7. Hacer la caracterización de los resultados, obtener el patrón de difracción, función de distribución radial, factor de estructura, diagrama de Voronoi y teselado poligonal.

## 6.3 Implementación

### 6.3.1 Propiedades del Sistema

El sistema utilizado consta de 10,000 partículas distribuidas en una caja, la cual toma un tamaño al hacer el cambio de densidades, las partículas son core-corona y solo se utiliza un tipo de especie, por lo que la interacción entre las partículas es repulsivo.

El tamaño de la partícula se decidió en función a lo ya reportado por [34] y [2] en donde a partir de potenciales similares y constantes diferentes se realizaron autoensamblados de partículas

core-corona en donde se encontraron cuasicristales de grado 12, por lo que al utilizar parámetros similares, se explora y ver que se puede encontrar.

Inicialmente, se realizó un barrido de densidades, con el rango  $0.58 - 0.65$ , primero realizado con 1000 partículas y con 1,000,000, posteriormente se aumentó el número de partículas, 10,000 y el número de pasos, 3,000,000.

También se realizó un barrido de temperaturas, es decir, al partir de una temperatura 1, se hizo un barrido al bajar la temperatura, con el rango de  $0.1 - 0.9$ .

Por último, en un rango de  $0.55 - 0.65$  en las densidades, esto dado que al realizar simulaciones anteriores se podría apreciar resultados interesantes en las densidades, por lo que se decidió aumentar el número de pasos de 52,000,000, para una mejor precisión, del cual se muestran los resultados.

### 6.3.2 Potencial Implementado

El potencial utilizado es conocido como "Soft Core Soft Shoulder", el cual matemáticamente se define con la ecuación 6.1.

$$U(r) = \epsilon_0 \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} + 0.5 (1 - \tanh(k(r - \lambda))) \right] \quad (6.1)$$

En donde los valores de  $\sigma$  y  $\lambda$  representan características de la partícula core-corona,  $\sigma$  es el tamaño del core, en este caso 1 y  $\lambda$  representa la corona, para este potencial es 4. El potencial está basado en el artículo de [3]. Donde uno de los primeros términos asemeja a un potencial de interacción de Lennard-Jones para posteriormente usar una tangente hiperbólica.

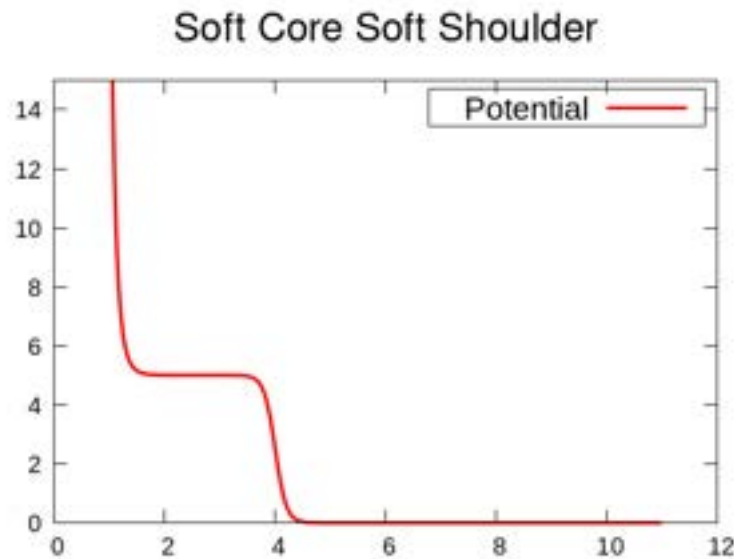


Figure 6.1: Potencial Implementado



### 6.3.3 Código

Después de realizar mucha investigación, la implementación se dio de la siguiente forma.

1. Inicialmente, después de hacer la revisión adecuada de la bibliografía, se decidió el uso de un sistema NVE, es decir, controlar el número de partículas, volumen de la caja y la energía. Inicialmente, el proceso cambiará desde una temperatura inicial hasta una temperatura en donde se equilibrará. En la figura 6.2, se observa como inicialmente se mantiene una temper-

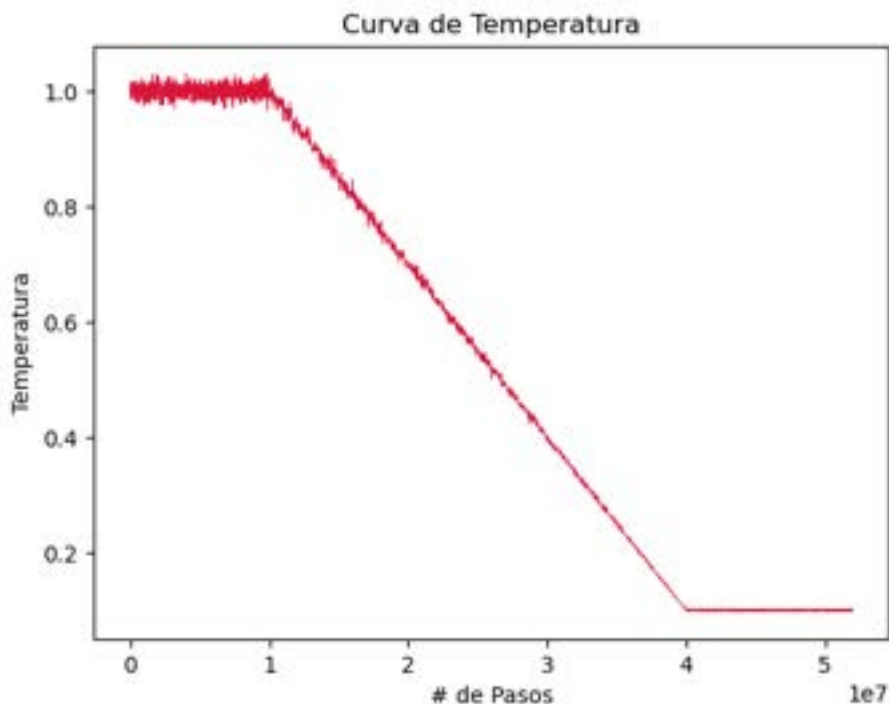


Figure 6.2: Curva de Temperatura

atura cercana a 1, y de ahí se hace una baja de temperatura hasta llegar a la deseada, en este caso y como ejemplo se llega a 0.1.

2. El código, realizado con la extensión de Python, LAMMPS, como parte de su componente principal, se declararon las constantes y limitantes del sistema. Al igual que se hizo referencia al potencial que se utilizó, el cual, al no se parte de los potenciales de la librería, primero se hizo una tabla de datos que lo representa.

Entonces primero se definió esenciales que utiliza LAMMPS para hacer la simulación, la variable  $t$ , donde se refiere a la densidad. La dimensión que utiliza, el tipo de átomos, una malla cuadrada, en donde se encontrarán en un inicio las partículas y las unidades.

Luego se hace la definición de la región, es decir, ahí se define el número de partículas  $N$ , las cuales como parte del proyecto se utilizaron 10000. También se define el tamaño de la caja,

la velocidad de las partículas y por último se hace referencia al archivo que contiene los datos del potencial.

3. Ahora y como parte del proceso del código se hizo de la siguiente forma, para una mejor descripción del proceso que efectuará el código, se dividirá en tres partes.

(a) **Estado Desordenado**

Lo primero que se necesita del proceso es generar un sistema desordenado, esto dentro de una malla cuadrada, el proceso y empezar a estabilizar el mismo, todo durante un millón de pasos. Los datos recopilados como temperatura, energía y presión durante esta fase se obtienen cada 100 pasos.

(b) **Etapa de Enfriamiento**

Durante esta fase, la temperatura hace un cambio de 1 hasta la deseada, para el proyecto se decidió hacer un barrido desde 0.1 – 0.9, en el cual la simulación hacía el cambio en un millón de pasos y se recuperaba información del proceso cada 10000 pasos.

Partir de este proceso empezamos a obtener información que posteriormente se usará para la caracterización de los resultados.

(c) **Etapa de Equilibración y Caracterización**

Por último, al llegar a la temperatura final se empieza un proceso de estabilización del sistema, donde se mantienen las variables para así recuperar la información final. Al igual que las fases pasadas, el proceso utiliza un millón de pasos.

También durante este proceso se recupera la información necesaria para la caracterización.

La información del patrón de difracción se obtiene de la última configuración del sistema. Para el factor de estructura se obtienen datos cada 1000 pasos, dentro de la etapa de equilibración del sistema.

La función de distribución radial, se obtiene de la última configuración de la simulación. Terminando el proceso, vuelve a empezar para hacer un barrido de densidades, las cuales van de 0.58 – 0.63.

4. Al conseguir los resultados correspondientes de las simulaciones, entonces se comienza con la caracterización. Principalmente con la obtención del patrón de difracción, el cual es el que nos indicaría el tipo de estructura que tiene el sistema.
5. Los códigos utilizados para la obtención del patrón de difracción y el factor de estructura, están basados en la librería Freud de Python, en donde los comandos ya son directos. Entonces, se obtiene el factor de estructura directo, ya que es el que nos permite describir mejor el sistema.
6. Posteriormente, se obtuvo la función de distribución radial, la cual por medio del graficador gnuplot, al igual que por medio de la librería Freud para asegurar que sea correcto, y el archivo de datos recuperado desde la simulación, se pudieron obtener las gráficas.

7. El ambiente visual se dio por medio de ovito, utilizando los archivos **cluster.data**, los cuales son una captura de datos de la última configuración de la simulación.
8. Por último, se obtuvo el diagrama de Voronoi, el cual se realiza por medio del software ovito.



# Resultados y Discusión

Dentro del proyecto se realizaron varias simulaciones, iniciando con exploraciones generales con pocas partículas y pocos pasos para empezar a denotar zonas de interés; una vez encontradas regiones con estructuras ordenadas, se siguió con simulaciones con mayor número de partículas y mayor número de pasos para así encontrar mejores resultados. En las siguientes secciones se mostrará a detalle lo obtenido.

## 7.1 Primera Exploración

Iniciamos una exploración con 300,000 pasos, 100,000 para cada etapa de la simulación, en donde se utilizaron 2048 partículas. Se hizo un barrido de densidades de 0.5 a 0.65, en donde los resultados que más destacaron fueron 0.5, 0.55, 0.63, y 0.64; sin embargo, no se desecharon las demás densidades, puesto que es muy poco tiempo para que se formen estructuras.

Se tomaron en cuenta las densidades con resultados más interesantes, los cuales, volvemos a realizar de nuevo pero con diferentes parámetros. Entonces, a medida que el valor de la densidad está cerca a 0.50, el patrón de difracción indica que se forman redes cuadradas, así las cercanas a la densidad 0.60 muestran que forman un ordenamiento hexagonal.

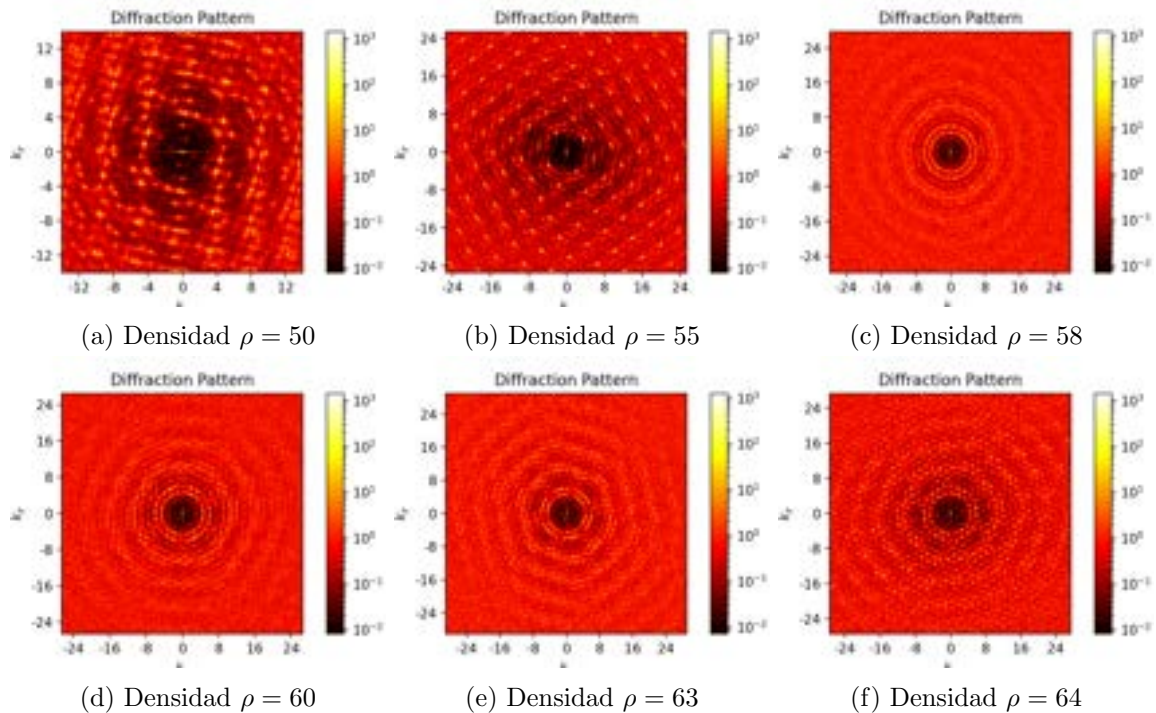
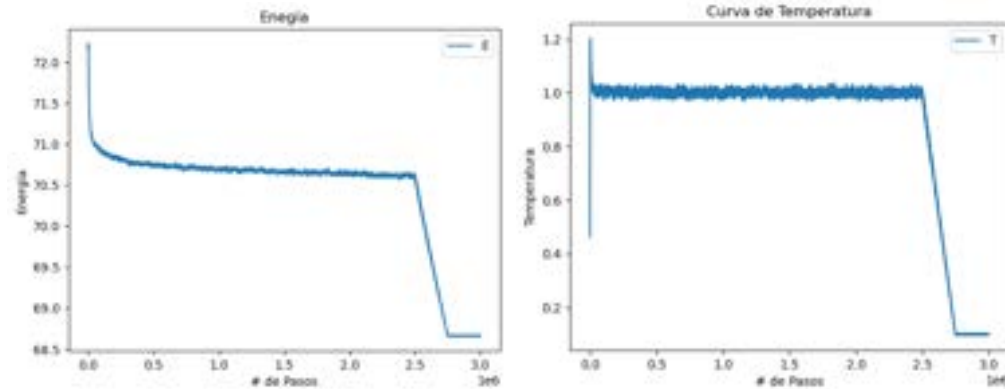


Figure 7.1: Patrones de Difracción de  $N = 2048$

## 7.2 Segunda Exploración

Para la segunda exploración se aumentó el número de partículas a 10,000, al igual que el número de pasos en donde tomamos 3 millones de pasos. De igual forma utilizando haciendo una baja de temperatura de 1 a 0.1.



(a) Energía del Sistema

(b) Curva de Temperatura

Además de que podemos notar como tanto el patrón de difracción y la rdf no muestra picos tan definidos.

Otra manera de comprobar que la estructura no está ordenada del todo, o en su caso no hubo suficiente tiempo de relajación para que los resultados sean confiables, es revisar el factor de estructura, el cual entre picos menos definidos, se dice que el ordenamiento es menor o es más cercano a un material amorfo.

### 7.2.1 Barrido de Temperaturas

Adicional a la exploración ya mencionada, también se realizó un barrido de temperaturas, en donde la simulación se hizo de la siguiente manera, en lugar de bajar la temperatura de 1 a 0.1, se hizo hasta 0.2,0.3 y así hasta 0.9, esto para remarcar la importancia del enfriamiento al tratar de encontrar estructuras ordenadas.

Esto también es muy notorio en los patrones de difracción, ya que a medida que el enfriamiento es menor, los patrones cada vez son menos definidos, es decir, sus picos no son tan intensos, lo que no da a entender que hubo menor ordenamiento.

Por ejemplo, tomando la densidad 0.63, se observa en la imagen como los patrones se pueden observar picos intensos; sin embargo, el ruido es predominante en la segunda circunferencias del patrón, en la figura 7.3 se puede observar como los picos interiores del patrón de difracción están más dispersados, sobre todo es observable en el segundo círculo.

Podemos hacer la misma comparación, ahora con la densidad de 0.60, ahora que igual, hay que considerar que con solo 3 millones de pasos no se puede conseguir de forma segura un patrón de difracción muy definido.

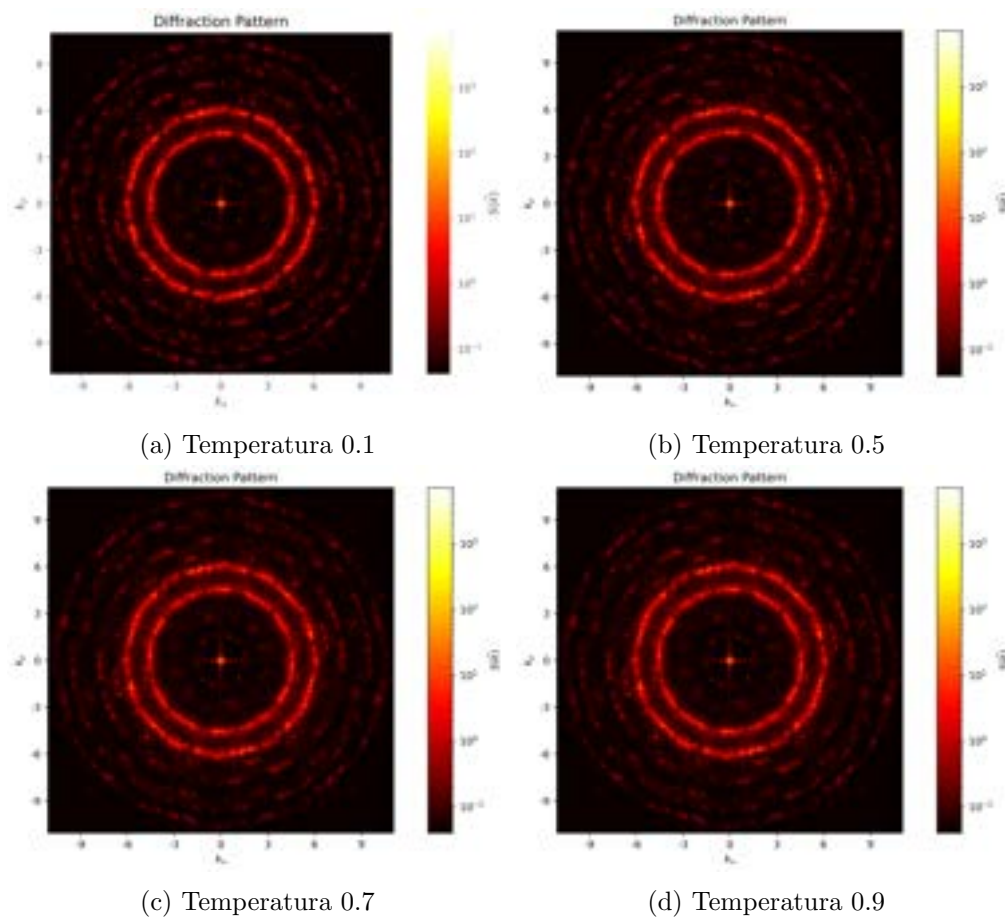


Figure 7.3: Patrones de Difracción de Barridos de Temperatura



Ocurre de la misma manera tomando otras densidades, por ejemplo en la imagen 7.7, existe la misma situación, se observan picos que son más intensos que los demás pero con mucha distorsión.

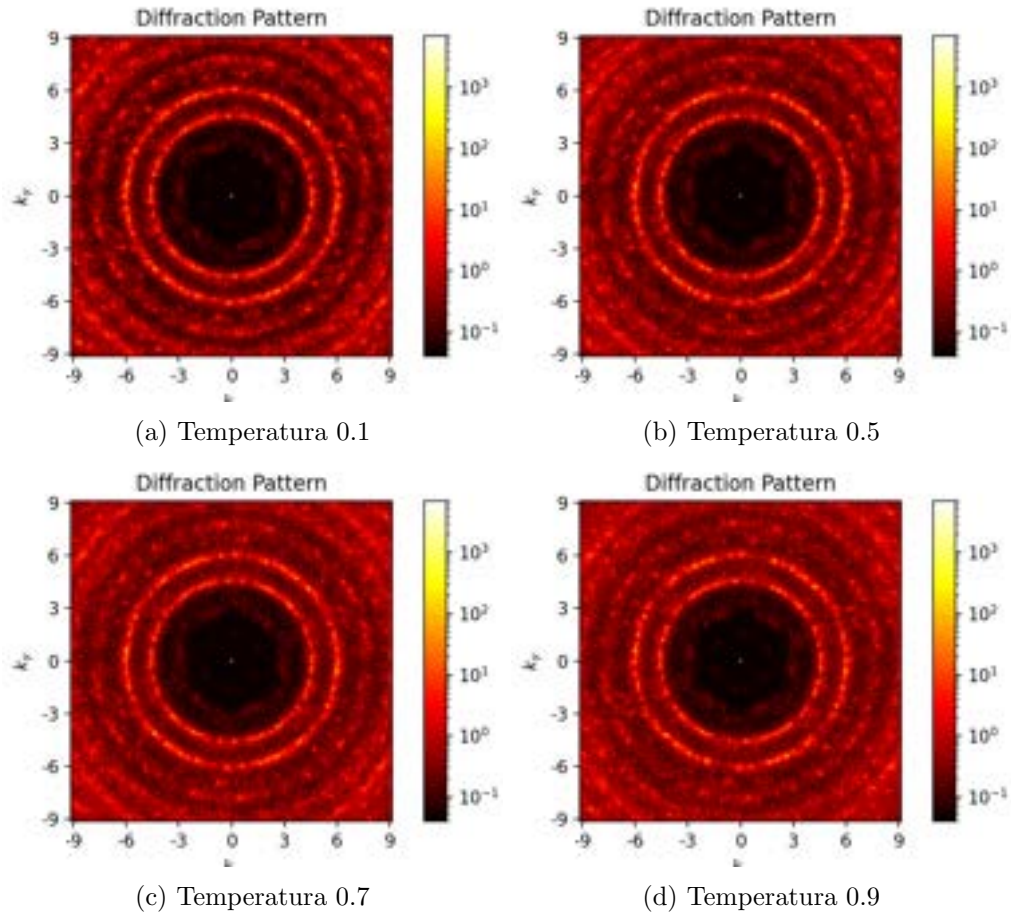
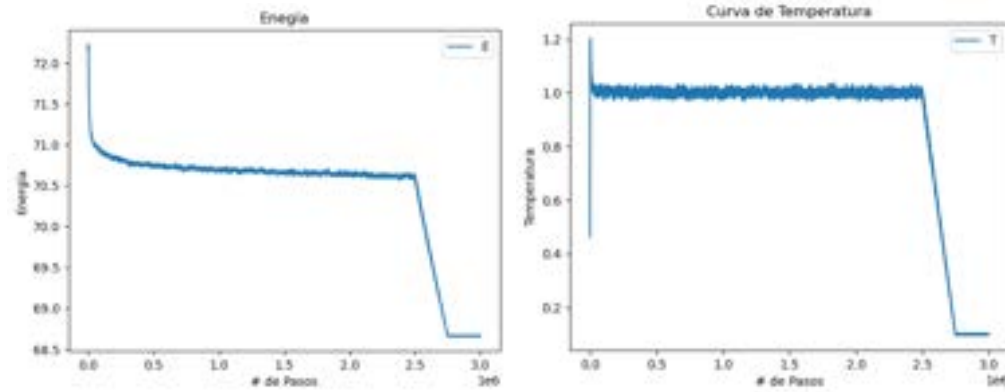


Figure 7.4: Patrones de Difracción de Barridos de Temperatura

### 7.3 Tercera Exploración

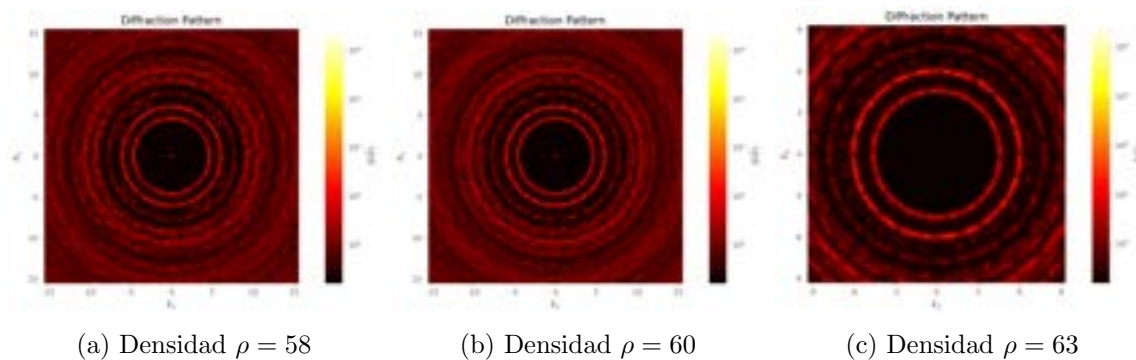
Para la tercera exploración se decidió hacer un aumento en el número de partículas, aumentamos el número a 40,000 al igual que número de pasos a 3 millones, en donde se encontraron los siguientes resultados.



(a) Energía del Sistema

(b) Curva de Temperatura

Como se muestra en la imagen 7.6, podemos observar como se llevó a cabo el mismo proceso que en las simulaciones anteriores pero con mayor número de pasos. Importante recalcar que el número de partículas es proporcional al número de pasos, a esta razón el aumento de los mismos. Los patrones de difracción, si bien son visibles y se encuentran estructuras ordenadas, no podemos decir del todo que son los mejores.



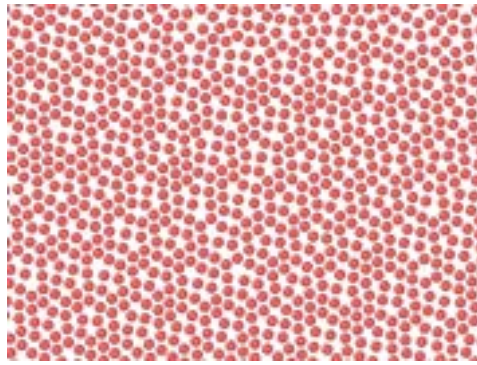
(a) Densidad  $\rho = 58$

(b) Densidad  $\rho = 60$

(c) Densidad  $\rho = 63$

Figure 7.6: Patrones de Difracción

Uno de los principales inconvenientes de trabajar con un número alto de partículas fue a la hora de la visualización, ya que muchas veces el número de partículas era demasiado alto como para que Ovito la mostrará y se pudiera hacer un análisis más detallado.



(a) Configuración Final



(b) Zoom Configuración Final

Figure 7.7: Patrones de Difracción de Barridos de Temperatura

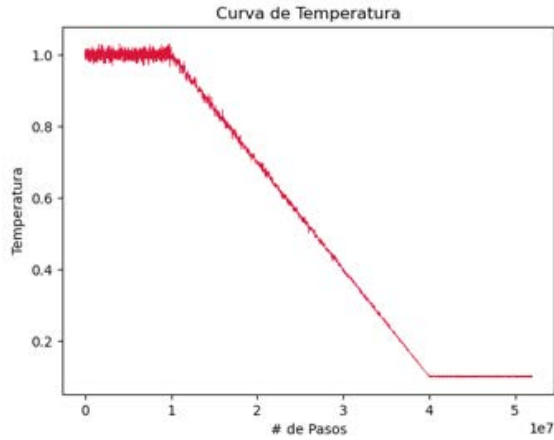
## 7.4 Última exploración

Por último de las exploraciones anteriores, tomamos las densidades que más nos llamaron la atención, 0.5, 0.55, 0.63, 0.64 y decidimos retomar un número de partículas de 10,000 con una diferencia de que se tomó un número de pasos significativamente mayor que el de la segunda exploración, el cual fue el siguiente

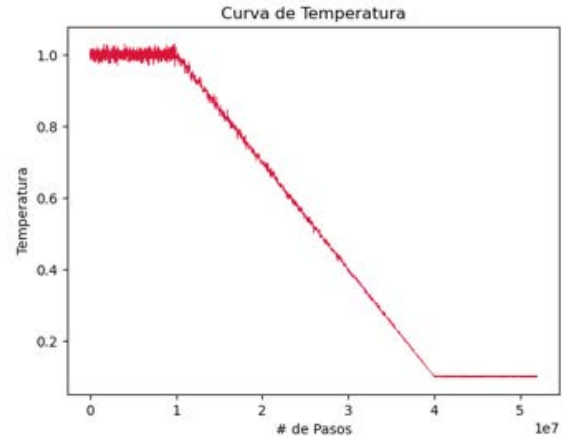
1. Inicialmente, se tomaron 10,000,000 para calentar el sistema a 1, recordemos que se utilizan unidades ( $lj$ ), de igual manera que en las simulaciones pasadas se inicia a partir de una red cuadrada y se calienta el sistema en **NVE**.
2. Posteriormente, se utilizan 30,000,000 para hacer el enfriado del sistema, pasando de 1 a 0.1 con un  $\Delta_t = 0.1$ .
3. Por último, para el tiempo de relajación del sistema se dejó a 12,000,000, considerando que es un tiempo adecuado para el sistema.

Es decir, de forma gráfica la simulación se vería de la siguiente manera 7.8a y 7.8b, donde se pueden observar las distintas partes que componen el proceso de autoensamblado del sistema.

Para los resultados de la última exploración, se van a mostrar en por cada densidad que fue estudiada a detalle, donde por completo se presentarán, la última configuración, patrón de difracción, función de distribución, factor de estructura y diagrama de Voronoi. Al igual que algunas comparaciones entre densidades, las cuales ayudaron a llegar a las conclusiones. También con comparaciones con otros trabajos.



(a) Curva de Temperatura



(b) Energía del Sistema

#### 7.4.1 Densidad 0.50

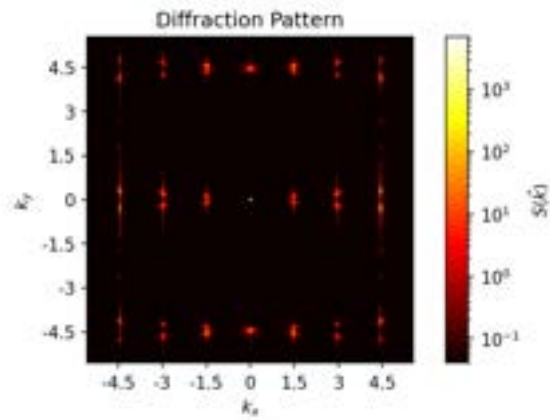
Tomando la densidad de 0.50, los resultados que se presentan son los siguientes, empezando por la configuración final, en donde se pueden observar stripes conformadas por tres átomos, debemos de recordar que este tipo de arreglo es común en el autoensamblado de partículas core-corona. [35]

Con un patrón de difracción que pertenece a un cristal de grado 2, ya que se presenta una red cuadrada en él. En la figura 7.9a se puede observar como se forma un cuadrado, aquí se muestra inclinado, sin embargo, los picos más intensos son los que marcan la estructura.

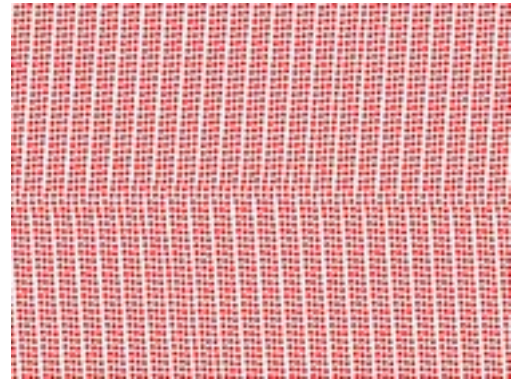
También los resultados muestra una propiedad que se presentan en el crecimiento cristalino, que es el gemelamiento, en donde 7.9b se puede observar como en el centro hay una línea horizontal de donde crecen a ángulos similares las demás partículas, se puede explicar que la línea en el centro funciona como un espejo. [10]

Ahora, al continuar la caracterización, también se obtuvieron los diagramas de Voronoi, en donde de la misma forma que su acomodo de partículas podemos observar una estructura acomodada en stripes.

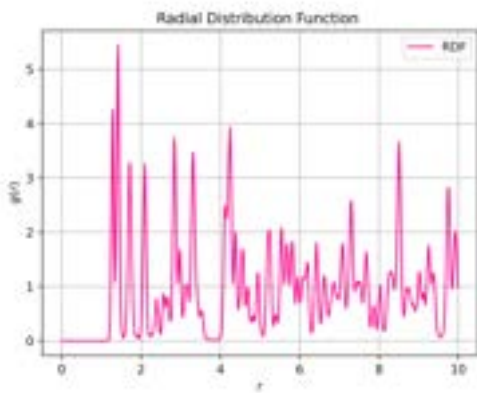
El diagrama de Voronoi de la imagen 7.10 muestra formas cuadradas, algunas más regulares que otras, esto siendo defectos que normalmente se encuentran en sistemas sólidos cristalinos. Ahora también se encuentran figuras triangulares, las cuales junto a los cuadrados se repiten por el espacio de la misma forma en la que las stripes de la última configuración se comportan, por lo que podemos asociarlas.



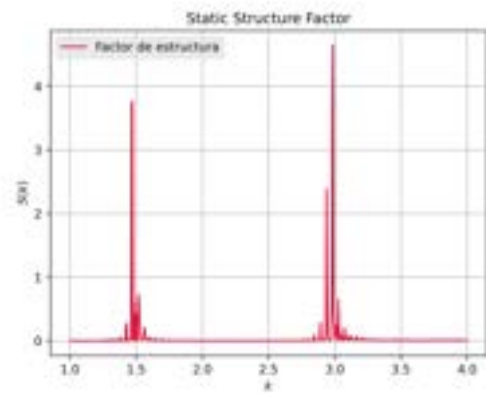
(a) Patrón de Difracción



(b) Configuración Final



(c) Función de Distribución Radial



(d) Factor de Estructura

Figure 7.9: Caracterización de  $\rho = 50$

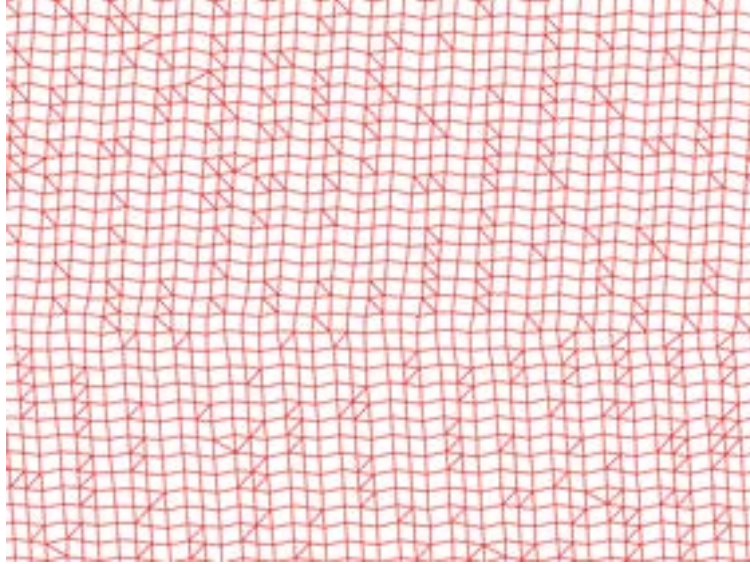


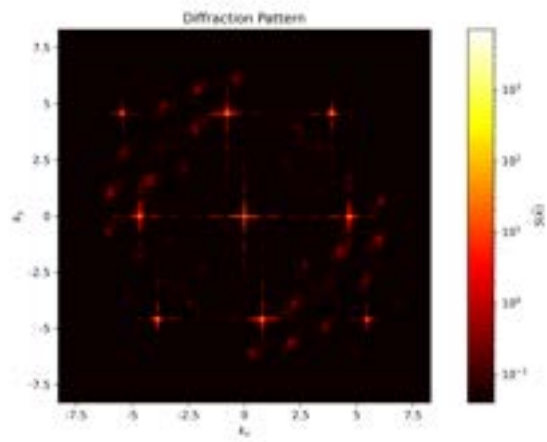
Figure 7.10: Diagrama de Voronoi

#### 7.4.2 Densidad 0.55

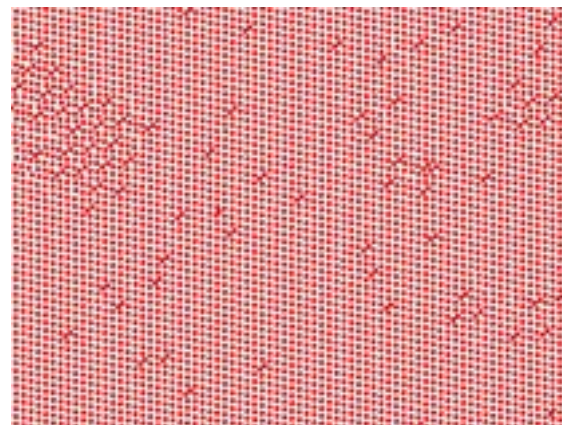
Si bien para la estructura con densidad 0.55, se esperaría que mantuviera una simetría similar a la de 0.50, este no fue el caso en la configuración final de la simulación, es decir, gráficamente se puede observar la siguiente caracterización.

Entonces, en la figura 7.11b, podemos observar como se presenta un acomodo de partículas, no en toda la configuración, ya que hay áreas en donde se presenta otro tipo de estructuras, ser amorfas, ahora en el patrón de difracción 7.11a, se pueden observar dos cosas, mucho ruido en el fondo lo cual puede ser indicativo de estructuras amorfas, sin embargo, se presentan picos bastante intensos que forman una estructura de orden 2.

Con respecto a la función de distribución radial, al rededor de 1.7 se encuentra el mayor número de vecinos, y cuenta con picos muy intensos, lo que señala que hay acomodo, es decir, se trata de una estructura cristalina.

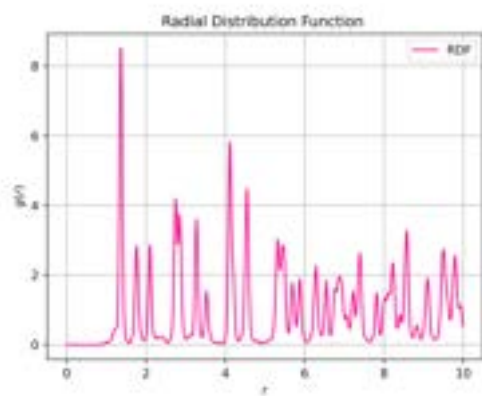


(a) Patrón de Difracción

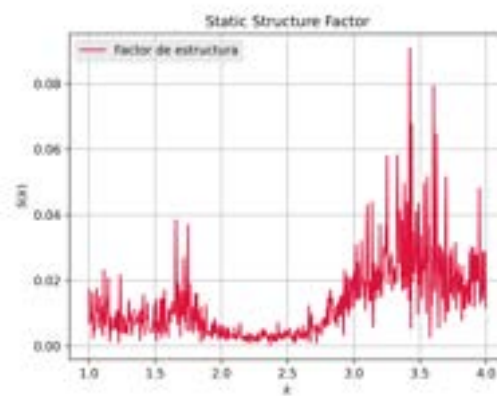


(b) Configuración Final

Figure 7.11: Caracterización de  $\rho = 55$



(a) Función de Distribución Radial



(b) Factor de Estructura

Figure 7.12: Caracterización de  $\rho = 55$

En la figura 7.13, podemos observar una estructura en su mayoría cuadrada, exceptuando algunos espacios donde se observa menos orden, lo cual, al relacionarlo con el patrón de difracción, al desorden, se lo podemos atribuir al ruido que observamos en la imagen 7.11a.

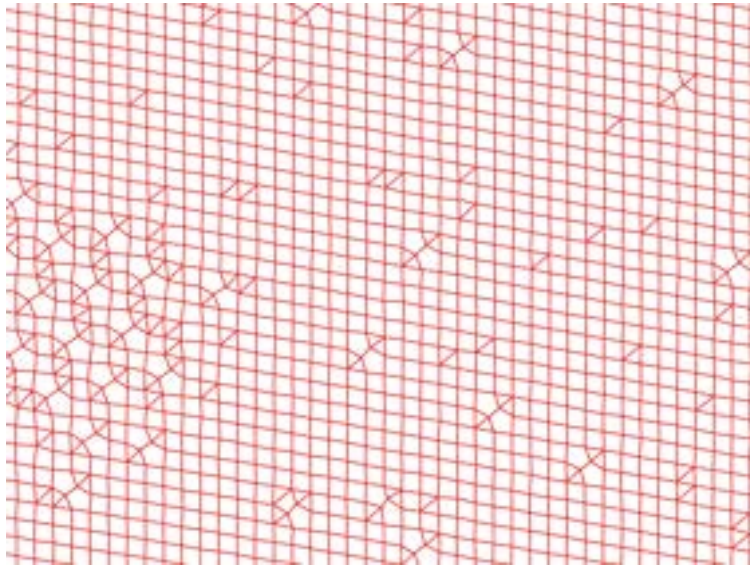


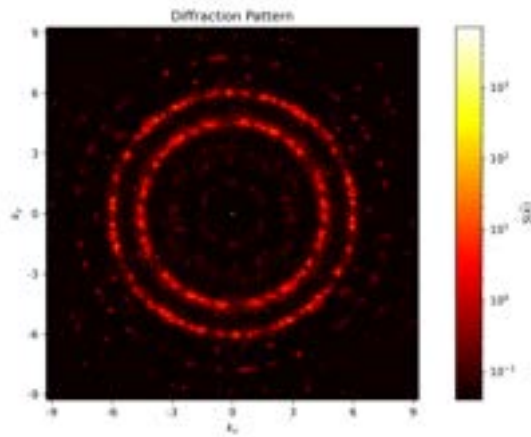
Figure 7.13: Diagrama de Voronoi



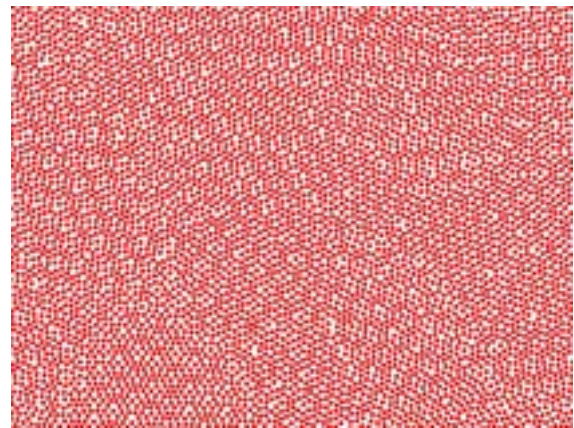
### 7.4.3 Densidad 0.62

La densidad de 0.62, fue la que más acertada fue en comparación con la simulación que se realizó con 3 millones de pasos, es decir, podemos observar como se empiezan a acomodar partículas en un hexágono, es más visible cuando observamos los diagramas de Voronoi, ya que cumplen mejor las características de los cuasicristales.

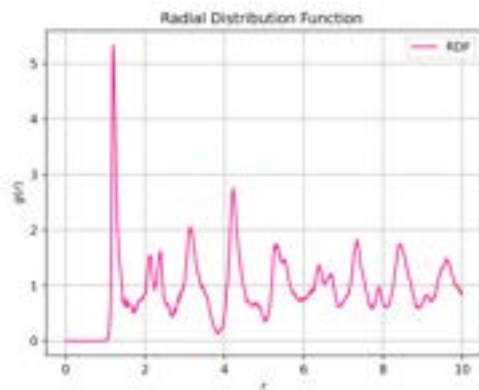
El patrón de difracción 7.14a muestra a los picos interiores muy tenues, pero se alcanza a observar como están acomodados en 6, a diferencia de los puntos externos que aún se muestran como si fuera un material amorfo.



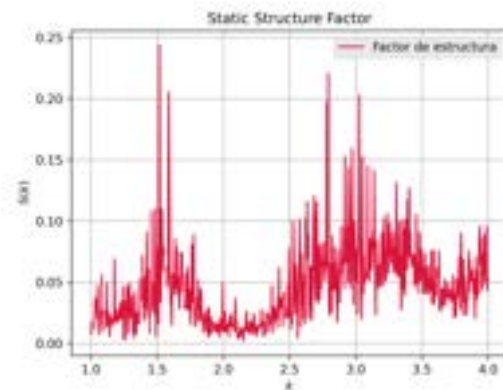
(a) Patrón de Difracción



(b) Configuración Final



(c) Función de Distribución Radial



(d) Factor de Estructura

Figure 7.14: Caracterización de  $\rho = 62$

La función de distribución radial y el factor de estructura, nos confirman que existe ordenamiento. La RDF en el pico más intenso nos muestra como está cerca de 6, como se muestra en la

figura 7.14c, por lo que se puede decir que a primeros vecinos se encuentran entre 5 y 6 de ellos, lo cual se comprueba al observar la configuración final de la simulación en la figura 7.14b.

En el diagrama de Voronoi suceden cosas interesantes, ya que se empiezan a ver pentágonos, los cuales no están regulares del todo, pero ya son figuras de 5 lados, otra cosa que sucede es que hay caminos compuestos de triángulos y cuadrados que rodean a las figuras de 5 lados, como se muestra en la figura 7.15.

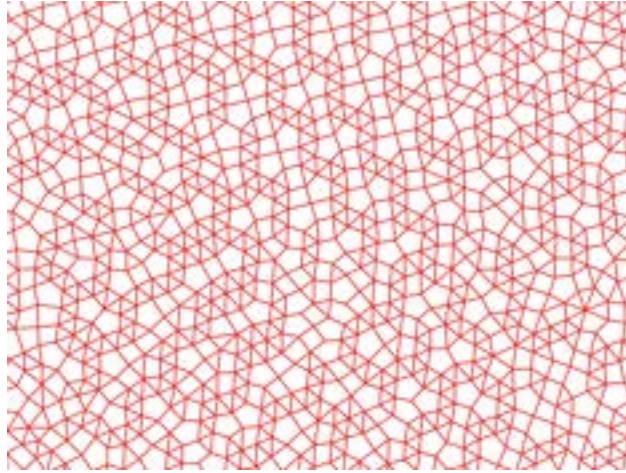
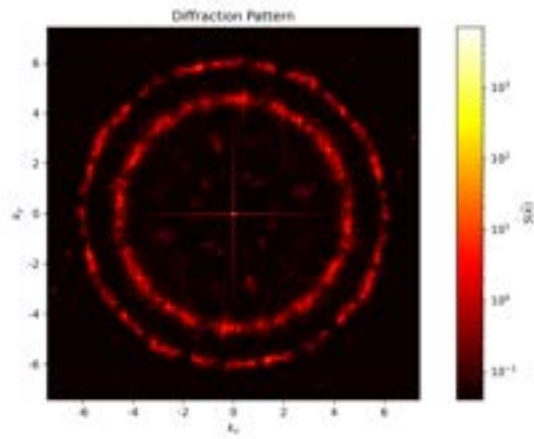


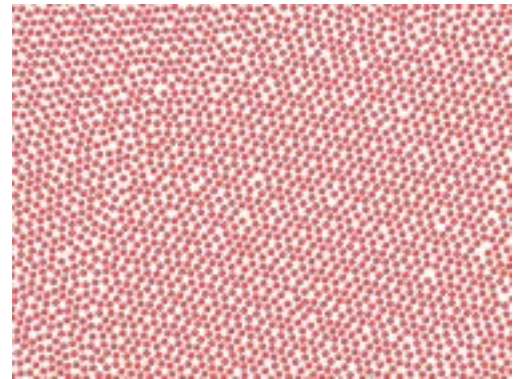
Figure 7.15: Diagrama de Voronoi

#### 7.4.4 Densidad 0.63

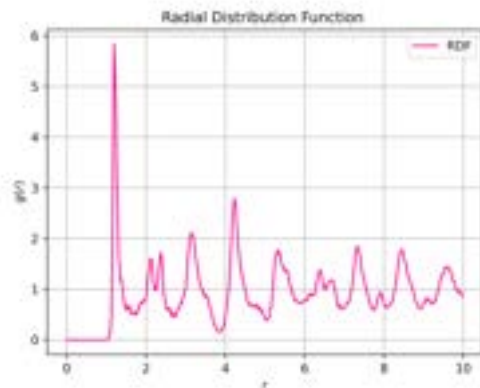
En la densidad 0.63 es en donde mejores resultados se encuentran, ya que en el patrón de difracción, mostrado en la figura 7.16a, se puede observar como hay una formación en la primera circunferencia, ya que se pueden contar alrededor de 12 picos, un poco difuso. Algo similar se obtiene en la última configuración, puesto que podemos observar como hay formaciones de clusters, pequeñas partículas que encierran a otras, como está en la figura 7.16b. Para la RDF, se puede decir que encontramos



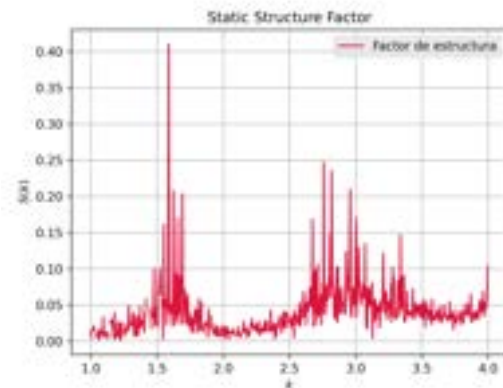
(a) Patrón de Difracción



(b) Configuración Final



(c) Función de Distribución Radial



(d) Factor de Estructura

Figure 7.16: Caracterización de  $\rho = 63$

alrededor de 6 a primeros vecinos, y de igual forma hay ordenamiento posterior porque se encuentran picos definidos. Lo mismo sucede con el factor de estructura, se tienen picos muy definidos.

De igual forma que en el diagrama de Voronoi de la figura 7.15, hay pentágonos con caminos de triángulos y cuadrados que los rodean. Con la diferencia que cada vez hay más pentágonos regulares.

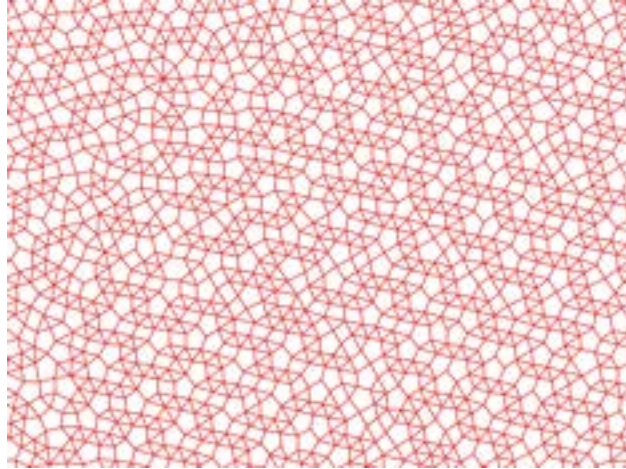
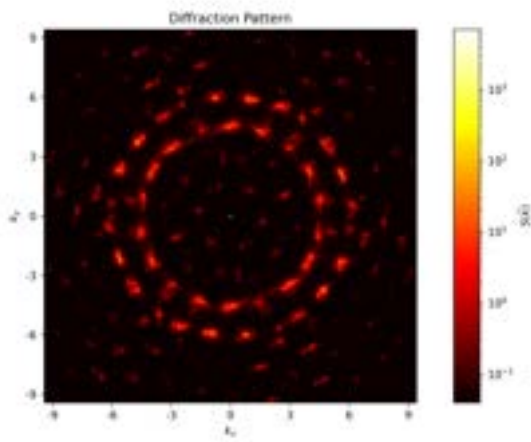


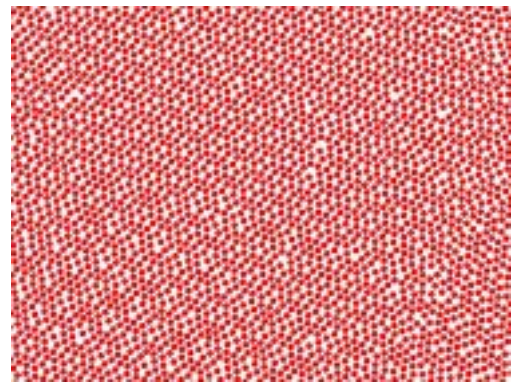
Figure 7.17: Diagrama de Voronoi

#### 7.4.5 Densidad 0.64

Para la densidad de 0.64, se puede observar una estructura bastante interesante, ya que, al analizar la figura 7.18a, se puede observar en el centro del patrón, 6 picos, en el segundo círculo de picos se pueden observar 12 picos, y por último en el tercero 18 puntos, por lo que se interpreta como una estructura hexagonal o un cuasicristal, este último porque las simetrías de orden 12 y 18, son prohibidas, característico de las estructuras cuasiperiódicas.



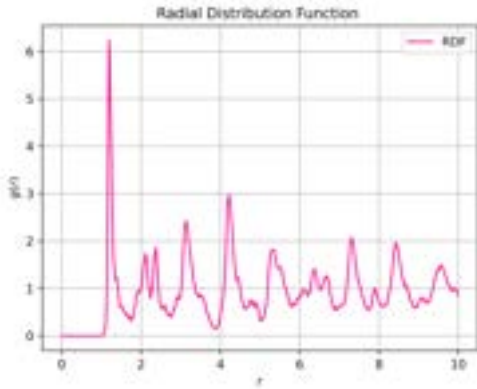
(a) Patrón de Difracción



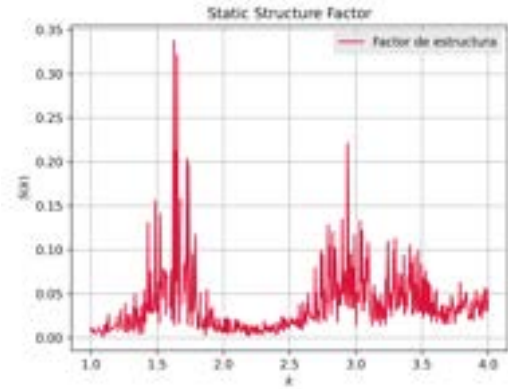
(b) Configuración Final

Figure 7.18: Caracterización de  $\rho = 64$

Ahora, al tomar en cuenta la configuración final del sistema, como se muestra en la figura 7.18b, podemos observar que cada vez es más común observar acomodos de 5 partículas, o conjuntos de 2 y 3 partículas, encerradas por otras. Para la función de distribución radial, a primeros vecinos



(a) Función de Distribución Radial



(b) Factor de Estructura

Figure 7.19: Caracterización de  $\rho = 64$

el pico sobresale al 6, es decir, tenemos alrededor de 6 primeros vecinos, lo cual ayuda a explicar como hay una estructura que pareciera ser hexagonal.

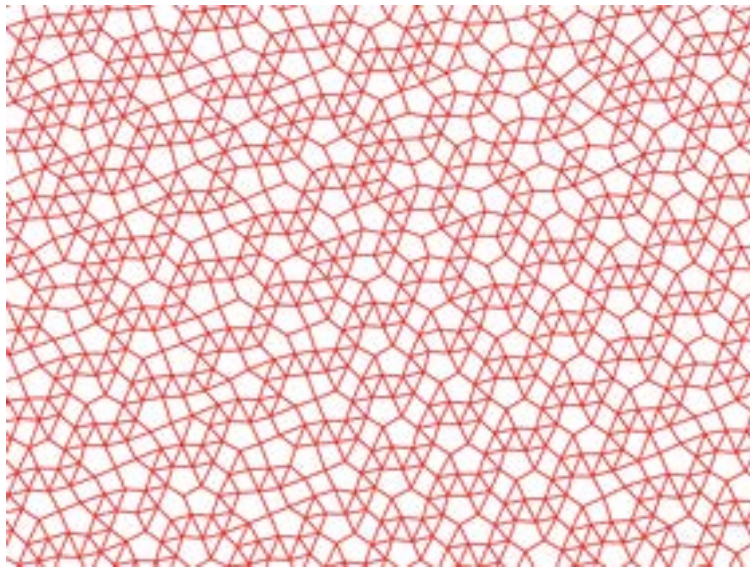
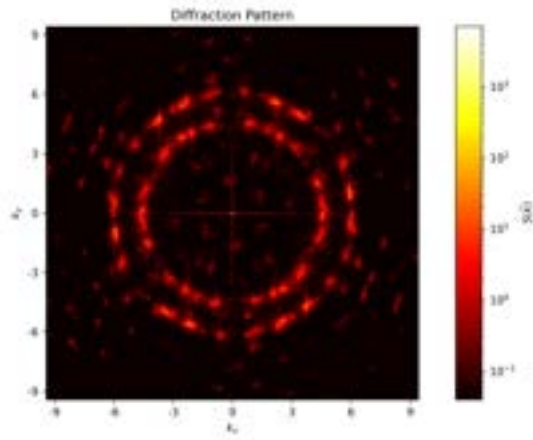


Figure 7.20: Diagrama de Voronoi

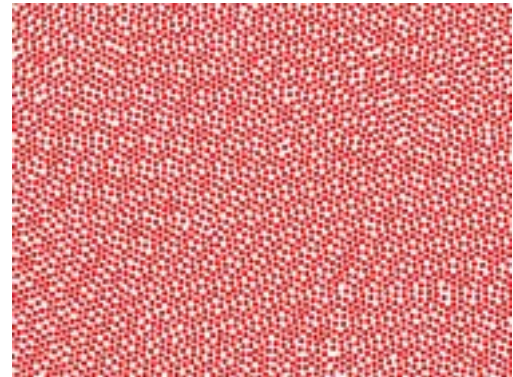
El diagrama de Voronoi que se obtuvo a partir de la configuración final, nos dice varias cosas, la primera es que se encuentran formas pentagonales, características de los cuasicristales, las cuales en comparación con el obtenido en las densidades de 0.62 y 0.63, los pentágonos aquí se encuentran regulares. Segundo, existen varios caminos de triángulos que se forman alrededor de los pentágonos, mismo que si comparamos con la figura 14 del artículo de Schoberth, [5], podemos hacer una comparación y decimos que encontramos un cuasicristal.

### 7.4.6 Densidad 0.65

A diferencia de la densidad de 0.64, lo que se puede observar es como las formaciones que totalmente se formaron se notan un poco menos visibles, por lo que podemos decir que llegar a 0.65, realiza un acomodo distinto.



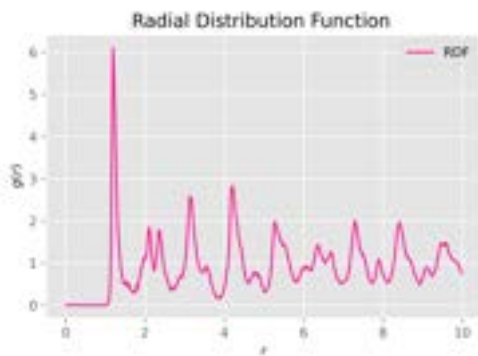
(a) Patrón de Difracción



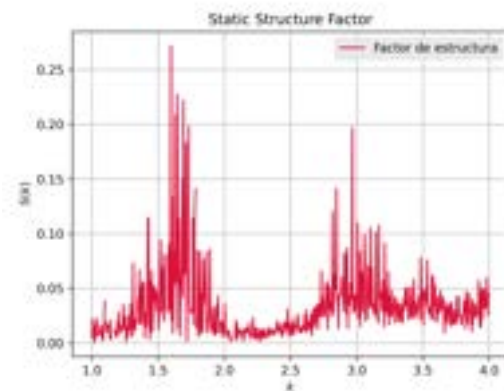
(b) Configuración Final

Figure 7.21: Caracterización de  $\rho = 65$

En el patrón de difracción, 7.18a, se encuentra de una forma similar al de la densidad  $\rho = 64$ , con la diferencia que la intensidad de los picos se empieza a perder, es decir, cada tres puntos de la tercera circunferencia, hay espacios vacíos; lo mismo sucede en el tercer círculo del patrón. Por lo que se puede inferir como se está perdiendo el ordenamiento.



(a) Función de Distribución Radial



(b) Factor de Estructura

Figure 7.22: Caracterización de  $\rho = 65$

Para el diagrama de Voronoi, similar a la densidad de 0.64, se muestran pentágonos, sin embargo, cada vez menos regulares, por lo que se puede inferir que al seguir aumentando la densidad, se va a estar más lejos de encontrar un cuasicristal. Otra similitud con la densidad anterior es que se pueden observar los caminos de triángulos que rodean a los pentágonos, como se muestra en la figura 7.23.

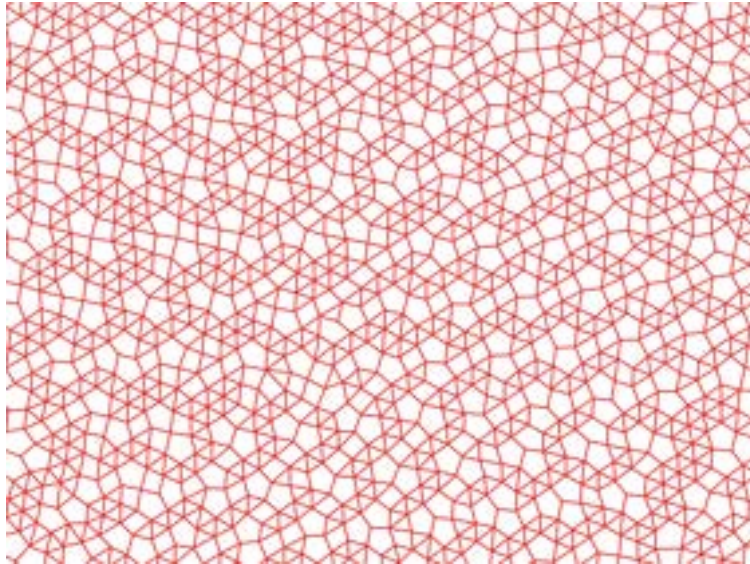


Figure 7.23: Diagrama de Voronoi





---

# Conclusión

En este trabajo de tesis se estudió un sistema de partículas core-corona de una misma especie sometido bajo un potencial de interacción de tangente hiperbólica, de donde para las conclusiones se tomó la última exploración, de donde, con 52 millones de pasos, se calentó a una temperatura 1, enfrió hasta 0.1; usando las densidades de 0.50, 0.55 y 0.62 hasta 0.65.

Las conclusiones a las que se llegaron después de hacer un análisis de patrones de difracción, RDF, factor de estructura y diagrama de Voronoi son las siguientes.

1. Es importante intentar imitar lo mejor posible a la realidad, por lo tanto, entre mayor número de pasos para la simulación mejor, se puede comprobar al comparar los resultados de las simulaciones que tomaron 1 millón de pasos y las que tomaron 52 millones, por lo que se infiere que el sistema se encuentra más ordenado.
2. Al utilizar una densidad cercana a 0.63 y 0.64, hay mayor posibilidad de encontrar un cuasi-cristal, esto tomando en cuenta los resultados de los diagramas de Voronoi y los Patrones de Difracción.
3. En las densidades cercanas a  $\rho = 0.5$  las estructuras que se encuentran son ordenamientos cristalinos de orden 2, de los cuales en la densidad  $\rho = 0.55$  presenta stripes, que como se mencionó antes son característicos de los coloides.
4. Es importante recalcar que a pesar de estar encontrando 18 picos intensos en los patrones de difracción de las densidades 0.63, 0.64 y 0.65, también hay formaciones con picos menos intensos en el centro del patrón de difracción que forman estructuras de hexagonales, por lo que también se debe tomar en cuenta el resultado.



---

# Bibliography

- [1] H. Pattabhiraman and M. Dijkstra, “Phase behaviour of quasicrystal forming systems of core-corona particles,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 146, mar 2017.
- [2] G. R. Pérez-Lemus, J. C. Armas-Pérez, A. Mendoza, J. Quintana-H, and A. Ramírez-Hernández, “Hierarchical complex self-assembly in binary nanoparticle mixtures,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 31, p. 475102, nov 2019.
- [3] G. Ibañez-Garcia, “Core-corona colloidal Quasicrystals via Long-range purely repulsive interactions: the Soft Core Shoulder potential I,” tech. rep., 2022.
- [4] S. Cullity, B.D.and Stock, *Elements of X-Ray Difraccction: New International Edition*. United States of America: Pearson Education Limited, third edit ed., 2014.
- [5] H. G. Schoberth, H. Emmerich, M. Holzinger, M. Dulle, S. Förster, and T. Gruhn, “Molecular dynamics study of colloidal quasicrystals,” *Soft Matter*, vol. 12, no. 36, pp. 7644–7654, 2016.
- [6] L. A. Padilla and A. Ramírez-Hernández, “Phase behavior of a two-dimensional core-softened system: new physical insights,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 32, p. 275103, jun 2020.
- [7] E. Marciá - Barber, *Quasicrystals: Fundamentals and Applications*. Boca Raton,FL: CRC Press, first edit ed., 2021.
- [8] G. Ibañez-Garcia, “Core-corona colloidal Quasicrystals via Long-range purely repulsive interactions: the Soft Core Shoulder potential I,” *Research Gate*, 2022.
- [9] J.-L. Barrat and J.-P. Hansen, *Basic Concepts for Simple and Complex Liquids*. Cambridge, United Kingdom: Cambridge University Press, 2003.
- [10] C. Hammond, *The Basics of Crystallography and Diffraction*, vol. 20. USA: Oxford University PressOxford, may 2015.
- [11] C. Giacobozzo, H. L. Monaco, G. Artioli, D. Viterbo, M. Milanesio, G. Gilli, P. Gilli, G. Zanotti, G. Ferraris, and M. Catti, *Fundamentals of Crystallography*. Oxford University Press, feb 2011.
- [12] D. Levine and P. J. Steinhardt, “Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures,” *Physical Review Letters*, vol. 53, pp. 2477–2480, dec 1984.

- [13] N. G. Szwacki and T. Szwacka, *Basic Elements of Crystallography*. Singapore: Jenny Stanford Publishing, apr 2016.
- [14] A. Glassner, “Penrose tiling,” *IEEE Computer Graphics and Applications*, vol. 18, no. 4, pp. 78–86, 1998.
- [15] P. J. Steinhardt and H.-C. Jeong, “A simpler approach to Penrose tiling with implications for quasicrystal formation,” *Nature*, vol. 382, no. 6590, pp. 431–433, 1996.
- [16] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. USA: Reverté, eight edit ed., 2013.
- [17] D. S. Rokhsar, N. D. Mermin, and D. C. Wright, “Rudimentary quasicrystallography: The icosahedral and decagonal reciprocal lattices,” *Physical Review B*, vol. 35, pp. 5487–5495, apr 1987.
- [18] I. Kingsley Ogemdi, “Properties and Uses of Colloids: A Review,” *Colloid and Surface Science*, vol. 4, no. 2, p. 24, 2019.
- [19] M. Doi, “Soft Matter Physics,” *Soft Matter Physics*, 2013.
- [20] M. King, “Management of Tyndall Effect,” *The Journal of clinical and aesthetic dermatology*, vol. 9(11), no. E6–E8, 2016.
- [21] M. D. Haw, “Colloidal suspensions, Brownian motion, molecular reality: a short history,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 14, p. 315, aug 2002.
- [22] G. M. Whitesides and B. Grzybowski, “Self-Assembly at All Scales,” *Science*, vol. 295, pp. 2418–2421, mar 2002.
- [23] I. W. Hamley, *Introduction to Soft Matter– Revised Edition*. Chichester, UK: John Wiley Sons, Ltd, sep 2007.
- [24] M. Zemansky and R. Dittman, *Calor y Termodinámica*. McGraw-Hill, sexta edic ed., 1985.
- [25] W. Greiner, L. Neise, and H. Stöcker, *Thermodynamics and Statistical Mechanics*. New York, NY: Springer New York, 1995.
- [26] G. Zgrablich, *Elementos de mecánica estadística*. UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA, primera ed ed., 2009.
- [27] D. Frenkel and B. Smit, *Understanding molecular simulation: From algorithms to applications*. 1996.
- [28] M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, second edi ed., 2017.
- [29] D. C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, vol. 74. New York: Cambridge University Press., 2nd editio ed., 2004.

- [30] A. P. Thompson, H. M. Aktulga, R. Berger, D. S. Bolintineanu, W. M. Brown, P. S. Crozier, P. J. in 't Veld, A. Kohlmeyer, S. G. Moore, T. D. Nguyen, R. Shan, M. J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott, and S. J. Plimpton, "LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales," *Computer Physics Communications*, vol. 271, p. 108171, feb 2022.
- [31] V. Ramasubramani, B. D. Dice, E. S. Harper, M. P. Spellings, J. A. Anderson, and S. C. Glotzer, "freud: A software suite for high throughput analysis of particle simulation data," *Computer Physics Communications*, vol. 254, p. 107275, sep 2020.
- [32] F. Aurenhammer, "Voronoi diagrams—a survey of a fundamental geometric data structure," *ACM Computing Surveys*, vol. 23, pp. 345–405, sep 1991.
- [33] M. Senechal, A. Okabe, B. Boots, and K. Sugihara, "Spatial Tessellations: Concepts and Applications of Voronoi Diagrams," *The College Mathematics Journal*, vol. 26, p. 79, jan 1995.
- [34] L. A. Padilla, A. A. León-Islas, J. Funkhouser, J. C. Armas-Pérez, and A. Ramírez-Hernández, "Dynamics and phase behavior of two-dimensional size-asymmetric binary mixtures of core-softened colloids," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 155, p. 214901, dec 2021.
- [35] G. Malescio and G. Pellicane, "Stripe patterns in two-dimensional systems with core-corona molecular architecture," *Physical Review E*, vol. 70, p. 021202, aug 2004.

## .1 Códigos

### .1.1 Código de Simulación en LAMMPS

```
1      # 2d corono-core melt
2
3 variable t index    0.63 0.64
4 #package           gpu 1
5 dimension          2
6 units              lj
7 atom_style         atomic
8
9 neighbor           2.0 bin
10
11 lattice            hex $t
12 region             box block 0 100 0 100 -0.5 0.5
13 create_box         1 box
14 create_atoms       1 box
15 mass               1 1.0
16 velocity           all create 1.0 87287
17
18 pair_style         table linear 1000
19 pair_coeff          1 1 CG.table CGpotential 10
20
21 variable            k equal 100*$t
22 #Estado Desordenado
23 fix                 1 all enforce2d
24 fix                 2 all nve
25 fix                 3 all langevin 1.0 1.0 1.0 123452
26
27 thermo             100
28 timestep           0.001
29 run                 10000000
30
31 unfix               2
32 unfix               3
33 #Etapas de enfriamiento
34 fix                 2 all nvt temp 1.0 0.1 1.0
35
36 #dump                2 all atom 20000 dump.$t
37
38
39 thermo             1000
40 timestep           0.005
41 run                 30000000
42
43 unfix               2
44 #Etapas de equilibraci3n y caracterizaci3n
45 fix                 2 all nvt temp 0.1 0.1 1.0
46 # Patr3n de difraci3n y factor de estructura
47 dump                3 all custom 100000 diffraction$k.xyz x y z ix iy iz
48 #para encontrar el facto de estructura
49 dump                4 all custom 1000 out$k.xyz x y z ix iy iz
50 dump                5 all atom 1000 dump$k.cluster
51
```

```
52 #Radial distribution function
53 compute      RDF all rdf 500 cutoff 10
54 fix          RDF_OUT all ave/time 1 1000 100000 c_RDF[*] file rdf$k.out mode
      vector
55
56 #Diffusion Coefficient file
57 thermo      1000
58 timestep    0.005
59 run         120000000
60
61 # Snapshots
62 write_data   cluster$t.data
63 clear
64
65 next t
66 jump in.cluster
67
```

