



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Dinámica y estructura estática de micronadadores
dipolares bajo un campo externo

Tesis presentada al

Posgrado en Física Aplicada

como requisito parcial para la obtención del grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

por

Jesús Daniel Medel Sánchez

Asesorado por

Dr. Roberto Ramírez Sánchez

Puebla Pue.
Febrero de 2026



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Dinámica y estructura estática de micronadadores
dipolares bajo un campo externo

Tesis presentada al

Posgrado en Física Aplicada

como requisito parcial para la obtención del grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

por

Jesús Daniel Medel Sánchez

Asesorado por

Dr. Roberto Ramírez Sánchez

Puebla Pue.
Febrero de 2026

Título: Dinámica y estructura estática de micronadadores
dipolares bajo un campo externo

Estudiante: JESÚS DANIEL MEDEL SÁNCHEZ

COMITÉ

Dra. Patricia Mendoza Méndez
Presidente

Dra. Alexandra Deriabina
Secretaria

Dr. José Eladio Flores Mena
Vocal

Dra. Honorina Ruiz Estrada
Suplente

Dr. Roberto Ramírez Sánchez
Asesor

Agradecimientos

A mis padres, Gabriel y Magdalena, por enseñarme sobre el valor de sostenerme frente a la incertidumbre y ser un apoyo incondicional en todo momento. A ellos debo tanto, que no es posible contenerlo en estas líneas.

A mis amigos, Julio, Stefany, Germán y Andrés por haber sido una compañía sincera durante este trayecto. Todas esas llamadas, mensajes y reuniones me han recordado que no avanzamos solos.

A mi asesor, el Dr. Roberto Ramírez Sánchez, por introducirme al fascinante mundo de los sistemas complejos, así como por ayudarme a seguir desarrollando habilidades que me han permitido amar aún más la física.

A mi honorable jurado, por las correcciones realizadas a este trabajo; especial mención a la Dra. Patricia Mendoza Méndez, por motivarme a la mejora continua y a desarrollarme profesionalmente.

A Lorena, quien me ha enseñado a tener fe y de quien he recibido el amor que siempre había deseado. Ella me ha impulsado siempre siendo una poderosa fuente de inspiración no solo con palabras, sino con hechos.

A la Secretaría de Ciencias, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI, anteriormente CONAHCYT), por la beca otorgada para realizar este proyecto.

Mi agradecimiento sincero a todos ellos. Si algo bueno hay en estas páginas, es gracias a lo que me han brindado.

Comprendí que eran las fotos que algún día mirarían asombrados nuestros hijos pensando que sus padres habían vivido unas vidas tranquilas, ordenadas, estables y levantándose por las mañanas a pasear orgullosos por las aceras de la vida, sin imaginarse jamás la locura y el follón de nuestras arrastradas vidas reales, de nuestra auténtica noche, del infierno contenido en ella, de la insensata pesadilla de la carretera.

JACK KEROUAC, *En el camino*

Índice general

Agradecimientos	V
Resumen	IX
Abstract	XI
Introducción	XIII
1. Marco teórico	1
1.1. Antecedentes	1
1.1.1. Micronadadores apolares	1
1.1.2. Micronadadores dipolares	6
1.2. Marco conceptual	12
1.2.1. Hidrodinámica bajo pequeño número de Reynolds	12
1.2.2. Ecuaciones de Langevin	13
1.2.3. Ecuaciones de Dinámica Browniana	14
1.2.4. Método de Euler-Maruyama	14
1.2.5. Propiedades dinámicas y estructurales	15
2. Métodos	19
2.1. Modelo	19
2.2. Integración de ecuaciones	21
2.3. Entorno computacional	21
2.4. Cálculo de propiedades	22
3. Resultados y discusión	27
3.1. Caracterización de estados	27
3.1.1. Parámetros de orden	27
3.1.2. Diagrama de estados	29
3.2. Factor de estructura estático	31
3.3. Propiedades dinámicas	33
3.3.1. Desplazamiento típico	33
3.3.2. Distribuciones angulares	34
3.3.3. Desplazamiento cuadrático medio	35
3.3.4. Coeficiente de difusión rotacional y tiempos de respuesta	37
Conclusiones	38
Apéndices	39

A. Cálculos suplementarios	41
A.1. Fuerzas y torcas	41
A.2. Ecuación de Smoluchowski	43
A.3. Desplazamiento cuadrático medio en el formalismo de Smoluchowski	44
A.3.1. Traslacional	44
A.3.2. Rotacional	46
B. Información suplementaria del procesamiento de datos	49
B.1. Manejo de datos	49
B.2. Valores de parámetros utilizados	50
B.3. Scripts utilizados	51
C. Participación en congreso	53
Bibliografía	55

Resumen

En esta tesis se realizó un estudio computacional detallado sobre la dinámica y la estructura de un sistema microscópico de 100 micronadadores dipolares modelados a través de ecuaciones de dinámica browniana bajo la influencia de un campo magnético externo constante sin confinamiento. Las ecuaciones de movimiento se resolvieron mediante el método de Euler-Maruyama. Se calcularon cinco parámetros de orden estructural y se identificaron siete estados finales posibles para el sistema, los cuales se resumen en un diagrama de estados en función de las intensidades de interacción dipolar inicial y el acoplamiento con el campo externo. El análisis del factor de estructura revela estados para los cuales no se presenta relajación estructural, así como su relación con la intensidad de las interacciones entre micronadadores. Por otra parte, el análisis de propiedades dinámicas como el desplazamiento cuadrático medio muestra que el movimiento traslacional se mantiene en el régimen superdifusivo, con una transición hacia el movimiento balístico en presencia de campo externo. La dinámica rotacional se mantiene en un régimen subdifusivo propio de la supresión de la difusión rotacional mediada por el campo externo.

Palabras clave: *micronadador, dinámica Browniana, dipolo magnético, campo externo, materia activa.*

Abstract

In this thesis, a detailed computational study was conducted on the dynamics and structure of a microscopic system of 100 unconfined dipolar microswimmers modeled through Brownian dynamics equations under the influence of a constant external magnetic field. The equations of motion were solved using the Euler-Maruyama method. Five structural order parameters were calculated, and seven possible final states of the system were identified, summarized in a state diagram in terms of the initial dipolar interaction strengths and the coupling with the external field. The analysis of the structure factor reveals states for which structural relaxation does not occur, as well as its relationship with the intensity of interactions between microswimmers. On the other hand, the analysis of dynamic properties such as the mean squared displacement shows that translational motion remains in the superdiffusive regime, transitioning towards ballistic motion in the presence of an external field. Furthermore, rotational dynamics remains in a subdiffusive regime characteristic of the suppression of rotational diffusion mediated by the external field.

Keywords: *microswimmer, Brownian dynamics, magnetic dipole, external field, active matter.*

Introducción

Se conoce como materia activa a una clase de sistemas fuera del equilibrio termodinámico compuestos por agentes que extraen energía de su entorno local para realizar trabajo mecánico y desplazarse de forma autónoma. Ejemplos en la naturaleza abarcan desde motores moleculares hasta grupos de animales y sistemas sociales; entre algunos sistemas artificiales destacan las partículas coloidales autopropulsadas y robots de tamaño centimétrico [1, 2]. Un caso importante de la materia activa son los micronadadores, término que se refiere a objetos de escala micrométrica que se mueven en fluidos [3]. En esta escala de tamaños el número de Reynolds es muy bajo ($Re \ll 1$), lo cual implica que las fuerzas viscosas dominan sobre los efectos inerciales. Por tanto, su movimiento debe romper la simetría temporal para generar desplazamiento neto, según el teorema de la viera de Purcell [4].

El estudio de la materia activa se ha convertido en uno de los campos de más rápido crecimiento en física, química e ingeniería en las últimas dos décadas, en parte debido a sus diversas aplicaciones potenciales. [3, 5]. Entre algunos ejemplos se encuentra la administración de fármacos en terapia dirigida [6, 7], la purificación de agua contaminada [8] e incluso la contención de hemorragias en heridas con geometrías complejas [9]. Para muchas de estas aplicaciones, es fundamental controlar con precisión el movimiento autopropulsado de los micronadadores asegurando su desplazamiento hacia zonas específicas, teniendo control de su estructura colectiva [10, 11, 12].

Planteamiento del problema

Diversas investigaciones se han enfocado en los patrones estructurales y comportamientos de fase resultantes de sistemas de gran tamaño al modificar parámetros de control del sistema como la temperatura T del solvente, la fracción de empaquetamiento ϕ o la velocidad de autopropulsión v_0 , mediante simulaciones que incorporan condiciones de frontera periódica en el límite termodinámico [13, 14, 15, 16, 17]. Sin embargo, menor atención se ha puesto a la cuantificación de propiedades dinámicas y estructurales de sistemas de tamaño finito como clústers individuales desplazándose a través de su medio [10, 18].

En este trabajo se analiza la dinámica traslacional y rotacional, así como el factor de estructura y el diagrama de estados de un sistema cuasibidimensional y microscópico de 100 micronadadores dipolares magnéticos con geometría esférica bajo un campo externo uniforme, modelado a través de ecuaciones de movimiento en dinámica browniana, las cuales se resuelven mediante el método de Euler-Maruyama.

Limitaciones del estudio

El número de micronadadores se eligió como un punto intermedio entre la emergencia de fenómenos colectivos donde los efectos de micronadadores individuales no tienen relevancia dominante y la optimización del tiempo de cómputo con los recursos disponibles. El estudio se limita al efecto de las variaciones de los parámetros m^*B^* , relacionado con la intensidad de acoplamiento de los dipolos con el campo magnético y m^{*2}/d_0^* , asociado a la intensidad de la interacción inicial entre

los dipolos. Además, no se considera la inclusión de interacciones hidrodinámicas. Dado que el objetivo principal se centra en la caracterización de estados colectivos de los micronadadores en los tiempos máximos, el estudio se lleva a cabo en la escala de tiempos difusiva, utilizando un tamaño de paso temporal de orden $\Delta t \sim 10^{-4}\tau_r$ (donde $\tau_r = 1/D_r^{(0)}$ se conoce como el tiempo de reorientación), muy por encima de la escala de tiempos balísticos del sistema ($t \sim 10^{-9}$ s) [19].

Preguntas de investigación

Las preguntas de investigación que guían este trabajo son:

- ¿Qué estructuras colectivas forma un sistema finito de micronadadores dipolares no confinado bajo el efecto de un campo magnético homogéneo con una distribución inicial de rejilla cristalina?
- ¿Cómo influye la intensidad de las interacciones iniciales entre los micronadadores y el acoplamiento con un campo magnético externo homogéneo en las propiedades dinámicas y estructurales del sistema?

Objetivos

Para responder a las preguntas de investigación, se plantean los objetivos descritos a continuación.

Objetivo general

Analizar el efecto de la competencia entre intensidad de las interacciones iniciales y del acoplamiento con un campo magnético externo homogéneo sobre la dinámica y estructura emergente de un conjunto finito de micronadadores dipolares cuasibidimensionales, modelados por dinámica browniana y dispuestos inicialmente en una estructura de rejillas.

Objetivos específicos

1. Resolver las ecuaciones de dinámica browniana de un sistema de $N = 100$ micronadadores dipolares esféricos y cuasibidimensionales, mediante el método de integración estocástica de Euler-Maruyama.
2. Caracterizar las estructuras colectivas emergentes mediante un criterio de clasificación basado en cinco parámetros de orden (polarización $\langle\phi_M\rangle$, formación de clústeres $\langle\phi_c\rangle$, micronadadores libres $\langle\phi_f\rangle$, cadenas alineadas $\langle\phi_p\rangle$ y orden hexático $\langle\Psi_6\rangle$), así como construir un diagrama de estados en función de los parámetros m^*B^* y m^{*2}/d_0^* .
3. Calcular el factor de estructura estático $S(q)$ del sistema en distintos tiempos característicos con el fin de explorar el fenómeno de relajación estructural, así como analizar su forma para distintos estados en el tiempo máximo.
4. Analizar la dinámica traslacional y rotacional del sistema mediante el análisis de los desplazamientos cuadráticos medios W_t y W_r , identificando los regímenes de movimiento del sistema mediante los exponentes de difusión y los tiempos de respuesta rotacional del sistema τ_{res} .

Hipótesis

Se plantean las siguientes hipótesis:

- El sistema exhibirá diferentes regiones que distinguen estados con menor y mayor orden estructural para ciertos valores críticos de los parámetros m^*B^* y m^{*2}/d_0^* .
- La altura de los picos del factor de estructura mostrará una dependencia clara con los parámetros de interacción dipolar y de acoplamiento con el campo magnético, indicando un mayor orden estructural para los regímenes de alta intensidad de interacciones dipolares y acoplamiento con el campo externo.
- La supresión de la difusión rotacional (mediada por el campo magnético externo) producirá un movimiento traslacional dirigido con comportamiento balístico efectivo ($\alpha_t = 2$) cuyo desplazamiento efectivo será mayor frente a mayores acoplamientos con el campo m^*B^* . El aumento de este valor también se verá reflejado en tiempos de respuesta cada vez menores.

Validación

La validez del modelo computacional se evalúa a partir de su concordancia con los resultados teóricos del desplazamiento cuadrático medio (traslacional y rotacional), obtenidos mediante la solución de la ecuación de movimiento de la función de densidad de probabilidad bajo el formalismo de Smoluchowski (véase el Apéndice A.3) y validados experimentalmente por Howse (2007) [22], en estudios con micronadadores esféricos apolares. Aunque la solución analítica es estrictamente válida para sistemas muy diluidos en la escala difusiva, el modelo muestra buena concordancia para interacciones entre dipolos m^{*2}/d_0^* débiles. Las desviaciones de la solución analítica permitirán explorar los efectos de las interacciones dipolares entre micronadadores y acoplamientos con campos externos más intensos.

Justificación

El presente trabajo de tesis contribuye al estudio de sistemas finitos de micronadadores dipolares bajo campos externos y momentos magnéticos de intensidad cercana a la utilizada en experimentos realistas (orden de mT y 100 aJ/T, respectivamente). Se afina el criterio de clasificación de estados de Telezki y Klumpp (2025) [15] con la adición de dos parámetros de orden (fracción de micronadadores libres y orden hexático). Su inclusión permite la distinción de estados cuya diferencia entre morfologías es más notoria en sistemas microscópicos y finitos (clústeres dispersos/densos y estados heterogéneos donde se presentan cadenas y clústeres de menor tamaño). Además, se demuestra que el factor de estructura estático permite la identificación de orden y relajación estructural incluso en este tipo de sistemas.

Contenido

En el primer capítulo, se presenta el marco teórico sobre el cuál está basado este trabajo. Este se encuentra dividido en los antecedentes, que comprenden estudios sobre sistemas apolares (interacciones de volumen excluido) y dipolares; se presenta, además, el marco conceptual. En el segundo capítulo, se presenta una descripción detallada del sistema a estudiar, así como los métodos usados para calcular las propiedades de interés. En el tercer capítulo se expone la discusión de resultados. Finalmente, se presentan las conclusiones. En los Apéndices se incluyen los desarrollos de los cálculos teóricos suplementarios, una descripción del procesamiento de datos y la constancia de participación en congreso de este trabajo.

Capítulo 1

Marco teórico

1.1. Antecedentes

1.1.1. Micronadadores apolares

Una de las primeras caracterizaciones del movimiento autopropulsado de micronadadores se encuentra en Howse *et al.* (2007) [22]. Los micronadadores consisten en partículas Janus de poliestireno (PS) con geometría esférica y diámetro de $1.62 \pm 0.13 \mu\text{m}$. Mediante un proceso de evaporación, uno de sus hemisferios se cubrió con una capa de platino de 5.5 nm de grosor y se sumergieron en soluciones de 2ml de agua destilada y distintas concentraciones de peróxido de hidrógeno. El platino funciona como catalizador de una reacción química cuyos productos propulsan a las partículas en un proceso conocido como auto-difusiofóresis.

En la Fig. 1.1 se muestran las trayectorias de partículas Janus con cubierta de Pt así como de un control de partículas de PS. Mientras que las partículas de control realizan el característico movimiento browniano (conocido en la literatura como ‘pasivo’), las partículas cubiertas de Pt exhiben una componente direccional aumentada en su movimiento, que se incrementa con la concentración de H_2O_2 .

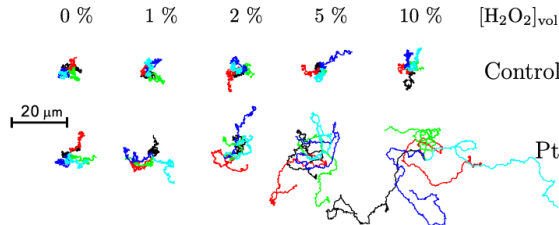


Figura 1.1: Trayectorias durante 25 segundos de 5 partículas de control (Arriba) y partículas Janus de Pt en agua y en diversas soluciones de peróxido de hidrógeno (Abajo). Tomada de [22].

Para una partícula puramente browniana de diámetro σ , el desplazamiento cuadrático medio es lineal en el tiempo y su pendiente coincide con el coeficiente de difusión traslacional $D_t^{(0)} = k_B T / (3\pi\eta\sigma)$, donde k_B es la constante de Boltzmann y T y η , la temperatura y viscosidad del solvente, respectivamente. Además, el tiempo característico de la difusión rotacional es el inverso del coeficiente $\tau_r^{-1} = D_r^{(0)} = k_B T / (\pi\eta\sigma^3)$. Por otra parte, para una partícula autopropulsada con velocidad v_0 , la traslación y la rotación están acopladas y la proyección 2D del desplazamiento cuadrático medio está dada por

$$W(\Delta t) = 4D_t^{(0)}\Delta t + \frac{v_0^2\tau_r^2}{2} \left[\frac{2\Delta t}{\tau_r} + \exp(-2\Delta t/\tau_r) - 1 \right] \quad (1.1)$$

Para tiempos cortos y largos, la expresión toma las formas límite

$$W(\Delta t) \approx \begin{cases} 4D_t^{(0)}\Delta t + v_0^2\Delta t^2 & \text{si } \Delta t/\tau_r \ll 1 \\ 4(D_t^{(0)} + \frac{v_0^2}{4D_r^{(0)}})\Delta t & \text{si } \Delta t/\tau_r \gg 1 \end{cases} \quad (1.2)$$

Mientras que, a tiempos cortos ($\Delta t/\tau_r \ll 1$), el desplazamiento depende linealmente del tiempo, la contribución browniana es proporcional a $\sqrt{\Delta t}$. A tiempos largos ($\Delta t/\tau_r \gg 1$), la difusión rotacional conlleva a una aleatorización de la dirección de propulsión, con una caminata aleatoria con un coeficiente de difusión traslacional aumentado $D_{eff} = D_t^{(0)} + v_0^2/(4D_r^{(0)})$. En el caso de la mayor concentración de peróxido de hidrógeno (10 %), $D_{eff} = 9.0\mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$, que representa un incremento del coeficiente de difusión puramente browniano por un factor de casi 30.

En la Fig. 1.2(a) se muestran los desplazamientos cuadráticos medios promediados sobre unos 3000 fotogramas para las trayectorias de la Fig. 1.1. Como se observa, en la ausencia de peróxido de hidrógeno, las trayectorias mostraron un comportamiento lineal que concordó con el movimiento browniano clásico. Por otra parte, con la adición del peróxido de hidrógeno se observa un comportamiento parabólico más marcado cuyo ajuste concuerda con la expresión de la Ec. 1.2.

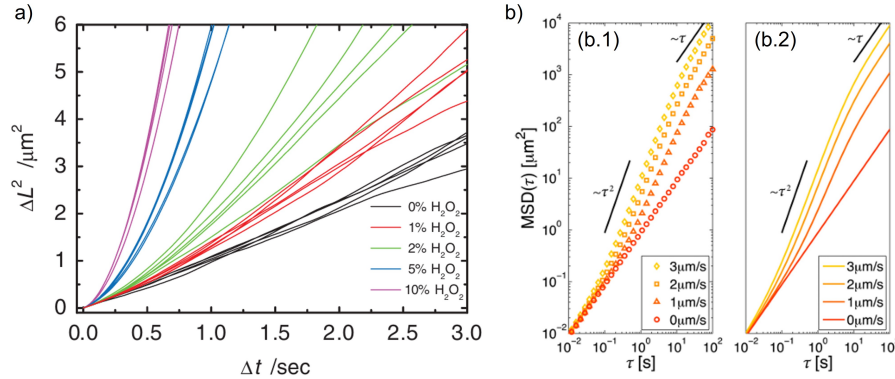


Figura 1.2: a) Desplazamiento cuadrático medio en función del intervalo de tiempo de las trayectorias de partículas Janus de Pt mostradas en la Fig. 1.1. Tomada de [22]. b) Desplazamiento traslacional cuadrático medio calculado de forma numérica (b.1) y teórica (b.2), para una partícula browniana activa con autopropulsión a distintas velocidades. Tomada de [23].

Aunque distintas investigaciones han explorado la dinámica de micronadadores desde una variedad de métodos computacionales, la referencia que se toma en este trabajo de tesis es la de Volpe *et al.* (2014), gracias a su fácil implementación en la escala difusiva y convergencia en la escala de tiempos explorada. En este estudio, se adapta el método de solución de ecuaciones diferenciales estocásticas de Euler-Maruyama para sistemas de partículas activas brownianas en dos dimensiones. Este método se describe con más detalle en la sección 1.2.4 del marco conceptual. La Fig. 1.2(b) muestra una comparación entre los resultados numéricos (b.1) y teóricos (b.2) del desplazamiento cuadrático medio de partículas brownianas activas para diferentes velocidades. La escala log-log permite identificar con mejor detalle los diferentes regímenes de la dinámica traslacional: Para $v_0 = 0$, la partícula muestra comportamiento difusivo clásico browniano ($W_t \sim t$), mientras que para el resto de velocidades, aparece un régimen balístico ($W_t \sim t^2$) intermedio y un régimen difusivo a tiempos largos, lo cual coincide con las observaciones de Howse.

Separación de fases inducida por motilidad (MIPS)

Mediante un enfoque experimental y numérico, Buttinoni *et al.* (2013) [24] estudiaron una suspensión de partículas coloidales recubiertas de carbono suspendidas en una mezcla de agua y lutidina y reportaron los primeros resultados experimentales de suspensiones coloidales activas que mostraban una separación de fases. Fenómeno que ya anticipaban investigaciones teórico-computacionales como la de Fily *et al.* (2012) [13].

Las partículas Janus se preparan con perlas de SiO_2 de diámetro $\sigma \approx 4.26\mu\text{m}$ mediante la deposición de una capa de 10 nm de grafito en un hemisferio. El solvente consiste en una solución de agua con una concentración de 28 % de 2,6-lutidina depositada en una cavidad casi bidimensional de $400 \times 400\mu\text{m}^2$, altura de $6\mu\text{m}$ y una fracción de empaquetamiento $\phi = 0.1 - 0.4$. A diferencia de las partículas catalíticas de Howse, que “consumen” el solvente para propulsarse, la fuerza forética de estas partículas proviene del calentamiento del hemisferio de carbono mediante la iluminación de la muestra por luz láser de longitud de onda de 532 nm.

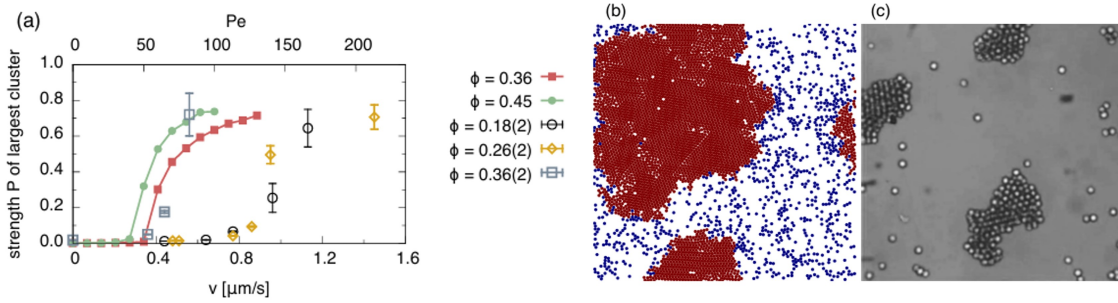


Figura 1.3: Separación de fases: (a) Tamaño relativo promedio P del cúmulo más grande como función de la velocidad de autopropulsión v . Se muestran los resultados experimentales (símbolos abiertos) y los resultados de simulación (símbolos cerrados). (b) Instantánea de simulación del sistema separado a $\phi = 0.5$ y número de Péclet $Pe = 100$. (c) Instantánea experimental a $\phi = 0.25$ y $v = 1.45\mu\text{m/s}$. Adaptada de [24].

A baja fracción de empaquetamiento ($\phi = 0.1$) el sistema entra en un estado estacionario que se describe como un fluido de clústeres dinámicos. El tamaño medio de estos clústeres se incrementa de forma aproximadamente lineal con la velocidad de autopropulsión. Por otra parte, a fracciones más altas ($\phi = 0.36$), la suspensión se separa en clústeres grandes rodeados por una fase gaseosa de micronadadores libres (Captura de simulación en Fig. 1.3(b) y del experimento en Fig. 1.3(c)). A esta separación se le conoce en literatura más reciente como separación de fases inducida por motilidad (MIPS, por sus siglas en inglés). En la Fig. 1.3(a) se muestra la fracción promedio P de partículas en el clúster de mayor tamaño definida como $P = \langle N_{lc} \rangle / N$, donde $\langle N_{lc} \rangle$ es el promedio del número de partículas en el clúster más grande (subíndice lc) y N es el número total de partículas. A cierta velocidad de autopropulsión crítica, el sistema muestra la transición de un fluido desordenado a una fase ordenada, donde el clúster más grande ocupa una fracción finita del sistema. La velocidad crítica disminuye a medida que se incrementa ϕ .

En la Fig. 1.4(a) se muestran capturas consecutivas de un solo clúster. Se observa que las orientaciones a lo largo del contorno apuntan hacia adentro. Se observa también una partícula con orientación hacia afuera (señalada con la flecha negra) que deja el clúster y otra que la sustituye. El origen de la transición es causa de un simple mecanismo de autoatrapamiento ilustrado en la Fig. 1.4(b): Dos o más micronadadores que colisionan de frente quedan detenidas por la persistencia de sus orientaciones. Por tanto, una partícula situada en la orilla del clúster tiene que esperar un tiempo de al menos τ_r hasta que la difusión rotacional reoriente su dirección para salir del clúster. Mientras que el tiempo para abandonar el clúster es independiente de la velocidad de autopropulsión v_0 , velocidades más altas aumentan la probabilidad de que otras partículas choquen con el clúster,

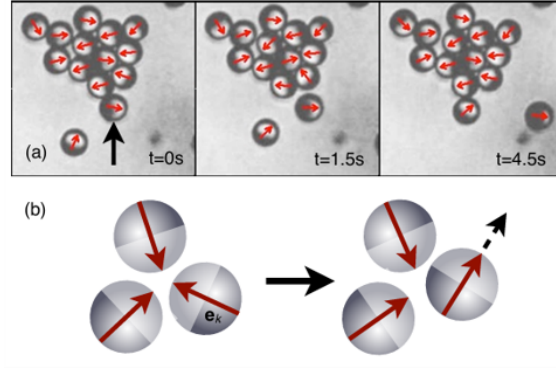


Figura 1.4: (a) Capturas consecutivas de un clúster, donde se muestran las orientaciones proyectadas (flechas) de los micronadadores. Las partículas del borde apuntan mayoritariamente hacia adentro. La partícula indicada en la parte inferior (izquierda) abandona el cúmulo (centro) y es reemplazada por otra partícula (derecha). (b) Esquema del mecanismo de autoatrapamiento: para que las partículas que colisionan se liberen, deben esperar a que sus orientaciones cambien debido a la difusión rotacional y apunten hacia afuera. Tomada de [24].

conduciendo a su crecimiento.

Factor de estructura estático en sistemas homogéneos

Estudios computacionales sobre la estructura de sistemas de micronadadores pueden encontrarse en De Macedo *et al.* (2018) [17], donde se investiga el efecto de la variación de parámetros de control sobre el factor de estructura estático y la función de distribución radial de un sistema de discos duros brownianos activos a fracciones de empaquetamiento bajas ($\phi = 0.2$) y altas ($\phi = 0.6, 0.7$). Para el sistema activo, la rejilla de parámetros se elige en regiones del espacio fase donde el sistema puede ser encontrado en estados homogéneos, esto es, en puntos suficientemente alejados de la espinodal de la MIPS. El cálculo de los factores de estructura estáticos $S(q)$ se realiza mediante la transformada de Fourier discreta

$$S(q) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{j,k=1}^N \exp(-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)) \right\rangle \quad (1.3)$$

En la Fig. 1.5 se presenta una comparación de $S(q)$ de (a) sistemas de partículas brownianas pasivas a $\phi = 0.1-0.6$ ¹ y (b) de discos duros brownianos activos a $\phi = 0.1-0.7$ y $D_r^{(0)} = 3D_t^{(0)}/\sigma^2$. La primera diferencia encontrada es el comportamiento de $S(q)$ en el límite de vectores de onda bajos $q \rightarrow 0$: El sistema pasivo satisface la bien conocida relación para la compresibilidad isotérmica χ_T ,

$$nk_B T \chi_T = \lim_{q \rightarrow 0} S(q) \quad (1.4)$$

donde $n = N/V$ y coincide con los valores dados por la expansión hallada por Baus y Colot (1987) [25]. Por otra parte, el sistema activo muestra un incremento de $S(q)$ para valores cercanos a cero que implica un incremento en su compresibilidad, atribuido a la emergencia de la región de MIPS. La segunda diferencia notable es el comportamiento de los picos de $S(q)$ que, para el sistema activo, exhiben una mayor altura y su máximo aparece desplazado hacia la derecha, lo cual sugiere un mayor orden estructural y una distancia entre micronadadores reducida, respectivamente.

¹En el artículo se usa la notación η para denotar la fracción de empaquetamiento.

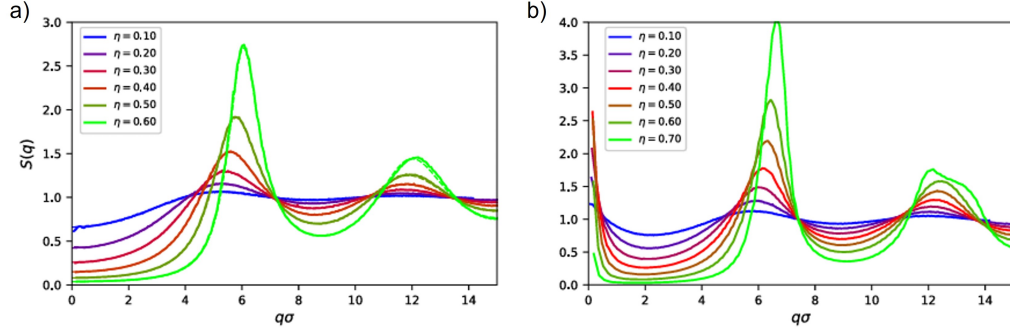


Figura 1.5: Factor de estructura estático $S(q)$ de sistemas de discos brownianos duros. a) Sistema pasivo con $\eta = 0.1 - 0.6$. Las líneas sólidas son resultados de las simulaciones ED-BD. Las líneas punteadas son la expresión de Baus-Colot para $S(q)$. b) Sistema activo con velocidad de autopropulsión $v_0 = 10D_t^{(0)}/\sigma$ y coeficiente de difusión rotacional $D_r^{(0)} = 1D_t^{(0)}/\sigma^2$ para $\phi = 0.1 - 0.7$. Adaptada de [17].

En la Fig. 1.6 se muestra una comparación entre los factores de estructura con fracciones de empaquetamiento a) $\phi = 0.2$, b) $\phi = 0.6$ y c) $\phi = 0.7$ a diferentes velocidades de autopropulsión v_0 que previenen MIPS. A fracciones de empaquetamiento bajas ($\phi = 0.2$, Fig. 1.6(a)), la mayor diferencia entre la estructura promedio existe entre $v_0 = 0$ y $v_0 \neq 0$, donde existe un incremento de $S(q)$ en la región de vectores de onda pequeños y un corrimiento de los picos $q\sigma > 2$ hacia la derecha, produciendo el mismo efecto del caso anterior. No obstante, en este caso, mayores velocidades tienen un efecto casi nulo sobre $S(q)$, lo cual se atribuye a las interacciones de volumen excluido.

Para fracciones de empaquetamiento altas (Figs. 1.6(b) y (c)), existe una interesante evolución no monótona de los picos principales de los factores de estructura: A medida que se desplazan hacia la derecha ante velocidades crecientes, su altura disminuye progresivamente hasta aproximadamente $v_0 = 5D_t^{(0)}/\sigma^2$, donde comienza a aumentar (Véanse los recuadros insertos). Se encuentra que este fenómeno es análogo a lo que sucede en sistemas tridimensionales con interacción de pozo cuadrado (SWS, por sus siglas en inglés). En este modelo, se complementa la interacción de esfera dura con una fuerza de atracción fija de intensidad Γ (análogo de v_0) y rango $\delta\sigma$ (análogo de ϕ). Por tanto, la evolución no monótona se atribuye a un cambio genuino en la forma en que la actividad altera la estructura del fluido.

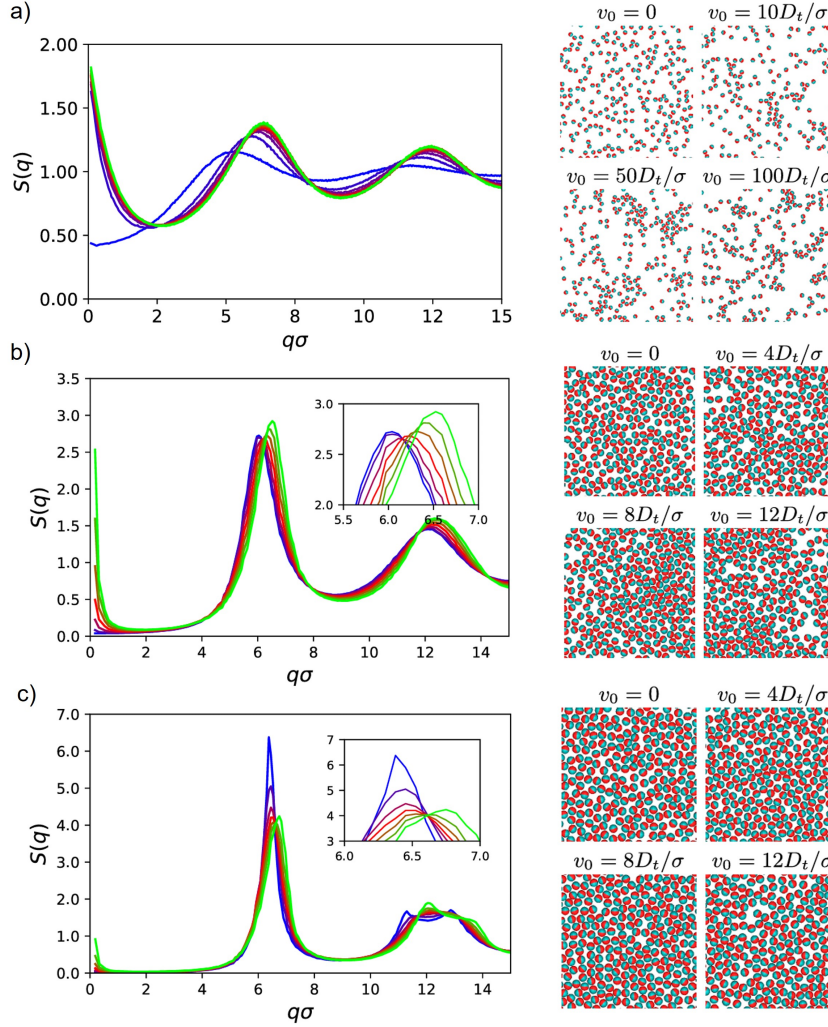


Figura 1.6: Columna izquierda: Factores de estructura estáticos $S(q)$ para sistemas de discos duros a diferentes ϕ y velocidades de autopropulsión. Columna derecha: capturas del sistema a diferentes velocidades de autopropulsión v_0 . Por filas: a) $\phi = 0.2$. b) $\phi = 0.6$ c) $\phi = 0.7$. Adaptada de [17].

1.1.2. Micronadadores dipolares

Cristales vivos

Palacci *et al.* (2013) [26] reportaron la observación experimental de la autoorganización de un sistema coloidal de partículas activas y magnéticas a fracciones de empaquetamiento $\phi \approx 0.01-0.45$. Las partículas consistieron en esferas de polímero 3-metacriloxipropiltrimetoxisilano, con un cubo de hematita parcialmente encapsulado, con una parte expuesta al solvente. El solvente fue una solución base en peróxido de hidrógeno de 0.1 a 3%, 5 mM de hidróxido de tetrametilamonio y 3.4 mM de dodecil sulfato de sodio (DSS). El diseño de las partículas es interesante puesto que permite controlar la actividad mediante iluminación con luz de alta frecuencia y, además, aplicar un campo externo magnético externo. Bajo un campo de iluminación de brillo normal, los coloides se encuentran en equilibrio con el solvente y se sedimentan en el fondo del portaobjetos de observación. Al ser iluminadas mediante luz azul/violeta ($\lambda \approx 430-490\text{nm}$), las partículas exhiben autopropulsión a una velocidad de hasta $15\mu\text{m/s}$. Debido al mismo fenómeno de autoatrapamiento

descrito en [24], las partículas se organizan en clústeres conocidos como *cristales vivos*, debido a su capacidad de fusionarse, romperse y reagruparse dinámicamente. Para este caso, se observa una transición de fluctuaciones normales ($\Delta N \sim N^{1/2}$) a fluctuaciones gigantes ($\Delta N \sim N^{0.9}$) al superar la fracción de empaquetamiento crítica $\phi \approx 0.07$. Además, la vida media de los cristales es finita y ampliamente distribuida, con un tiempo característico de 100 ± 75 s para que su tamaño varíe al menos en un 50 %.

Finalmente, para investigar los mecanismos subyacentes del sistema, se aprovecharon las propiedades magnéticas de los cubos de hematita encapsulados. Bajo un campo magnético externo ($B \approx 1$ mT), la dirección de autopropulsión de las partículas se alineó en dirección paralela al campo, suprimiendo la difusión rotacional. Mediante una simple demostración, se mostró cómo la formación de cristales depende en gran medida de la aplicación de un campo externo. Dado que este suprime la difusión rotacional de las partículas en el cristal, no hay forma de que el cristal se rompa. La Fig. 1.7 muestra el siguiente proceso: a) y b) Se enciende el campo magnético y la luz violeta/azul; el cristal se autopropulsa en la dirección del campo magnético y su rompimiento se suprime. c) La luz se apaga, y se deja el campo magnético encendido; el cristal se disuelve. d) Se apaga el campo magnético y se enciende la luz; las partículas colisionan y el cristal vuelve a formarse. e) La luz se apaga, con el campo magnético apagado; el cristal se disuelve. f) Se enciende primero el campo magnético y después se enciende la luz. Todas las partículas se mueven en la dirección del campo; no colisionan ni se cristalizan.

Aunque el estudio no profundizó en un análisis cuantitativo del fenómeno, se intuyó que la presencia del campo externo suprime la difusión rotacional de los micronadadores, lo cual impide la formación de clústeres, cuyo origen radica en el autoencierro inducido por la actividad. Por ello, el artículo es una referencia fundamental para este trabajo de tesis, pues se muestra la evidencia experimental del control sistemas microscópicos conformados por unas cuantas partículas activas mediante el acoplamiento de sus dipolos un campo externo.

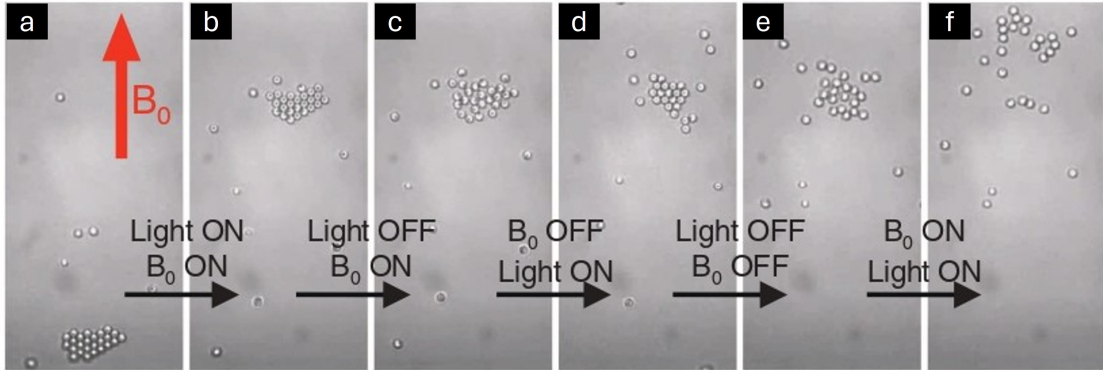


Figura 1.7: Capturas secuenciales del mecanismo de movimiento de cristales vivos. Se usa un campo magnético externo $B_0 \approx 1$ mT para orientar las partículas y dirigir su movimiento. La flecha roja indica la orientación del campo. Adaptada de [26].

Estructuras en sistemas pequeños confinados sin campo externo

Los sistemas pasivos de partículas brownianas dipolares tienden a formar cadenas ($N \leq 3$), anillos ($3 \leq N \leq 17$) y patrones hexagonales multicapa ($N \geq 18$) siendo estas configuraciones que minimizan la energía libre del sistema. En Telezki y Klumpp (2020) [27] se explora la formación de estructuras en sistemas bidimensionales pequeños ($N = 36$ y 81) de micronadadores dipolares activos con velocidad de autopropulsión v_0 y momento dipolar μ en confinamiento espacial.

Las ecuaciones de movimiento en Dinámica Browniana de la i -ésima partícula con posición $\mathbf{r}_i$

y orientación $\hat{\mathbf{e}}_i$ con autopropulsión v_0 están dadas como

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}}_i &= v_0 \hat{\mathbf{e}}_i + \frac{1}{\gamma_t} \mathbf{F}_i + \sqrt{2D_t^{(0)}} \mathbf{W}_{t,i} \\ \dot{\hat{\mathbf{e}}}_i &= \frac{1}{\gamma_r} \boldsymbol{\tau}_i \times \hat{\mathbf{e}}_i + \sqrt{2D_r^{(0)}} \mathbf{W}_{r,i} \times \hat{\mathbf{e}}_i\end{aligned}\tag{1.5}$$

Estas se resuelven mediante el método estocástico de Runge-Kutta de segundo orden. Las fuerzas $\mathbf{F}_i$ que actúan sobre la partícula i están dadas por la suma de las interacciones partícula-partícula y las interacciones con las paredes del sistema. Las torcas $\boldsymbol{\tau}_i$, por otra parte, resultan de la interacción entre partículas y las interacciones con la pared del sistema. Para modelar la reorientación del sistema, se introduce una torca de pared $\boldsymbol{\tau}_i^{wall}$ que puede ser modificada mediante el parámetro α

$$\boldsymbol{\tau}_i^{wall} = \alpha \hat{\mathbf{e}}_i \times \mathbf{F}_i^{wall}\tag{1.6}$$

donde $\mathbf{F}_i^{wall}$ se describen mediante el potencial de Weeks-Chandler-Andersen (WCA) calculando la distancia más corta al muro y aplicando una fuerza repulsiva para una partícula virtual de la pared con su superficie en el punto de la distancia más corta (fuera del muro a una distancia de $\sigma/2$).

Primero se calculó la probabilidad de los micronadadores para autoorganizarse en estructuras. Esta métrica también se conoce como grado de polimerización. Los cálculos se realizaron variando el número de Péclet $v_0^* = v_0 \sigma / D_t^{(0)}$ y la intensidad del dipolo $\mu^* = \mu B_0 / \epsilon$ (donde $B_0 = 0.01 \text{mT}$ es la intensidad del campo magnético de la Tierra). Este parámetro se definió como el promedio de ensamble del número de partículas asociadas a un clúster dividido por el número total de partículas en la simulación.

Como se muestra en la Fig. 1.8(a), se observa un aumento abrupto de p_s con un momento dipolar μ creciente. Este salto sugiere un valor crítico μ^* para la intensidad de momento dipolar. El recuadro de la misma figura, muestra que este valor crítico (que satisface $p_s(\mu^*) = 0.5$) depende de forma aproximadamente lineal de la velocidad de autopropulsión v_0 . La formación de estructuras comienza a dominar en $\mu^* \approx 1$, para partículas pasivas ($v_0 = 0$) lo cual corresponde a una intensidad de acoplamiento dipolar de $\lambda = \mu^{*2} / T = 1$. Por tanto, las estructuras comienzan a dominar cuando la energía de acoplamiento dipolar entre dos partículas coincide con la energía térmica del sistema ($\mu^{*2} = T$). Estos hallazgos sugieren que la actividad de las partículas puede ser tratada como una temperatura efectiva de este tipo de sistemas, idea que también se sugiere en [28].

Para clasificar las fases del sistema, se definió el parámetro de orden C , que describe la distancia d entre la cabeza y la cola de los clústeres normalizados a la longitud de su contorno l , tomando en cuenta las interacciones de volumen excluido que conllevan a la distancia mínima σ entre partículas

$$C = 1 - \frac{d - \sigma}{l - \sigma}\tag{1.7}$$

Con esta definición, una cadena completamente recta, con una distancia mínima entre vecinos de σ , resulta en un parámetro de orden $C = 0$, mientras que un anillo completamente cerrado resulta en $C = 1$. Para establecer los puntos en los diagramas de fase de la Fig. 1.8(b), se considera el valor máximo C_{max} del parámetro C de estructuras dominantes, siempre y cuando se cumpla que $p_s > 0.5$. Los puntos morados corresponden a una fase donde predomina la formación de anillos; los puntos azules, cadenas; los puntos grises, nula formación de estructuras; y, finalmente, el patrón cuadrículado bicolor señala que no existe una fase predominante. En la figura mencionada se muestra una comparación de diagramas de fases para $N = 36$ partículas. Por filas se presenta la geometría del confinamiento (caja cuadrada (arriba), circular (abajo)); por columnas, el efecto de la torca de la pared ($\alpha = 0.0; 0.4; 2.0$). Se observa que para momentos dipolares bajos ($\mu \leq 1.0$) no hay formación de estructuras, independientemente de la velocidad de autopropulsión. Además, en todos los casos se presentan dos regiones estrechas donde se forman cadenas, mientras que los

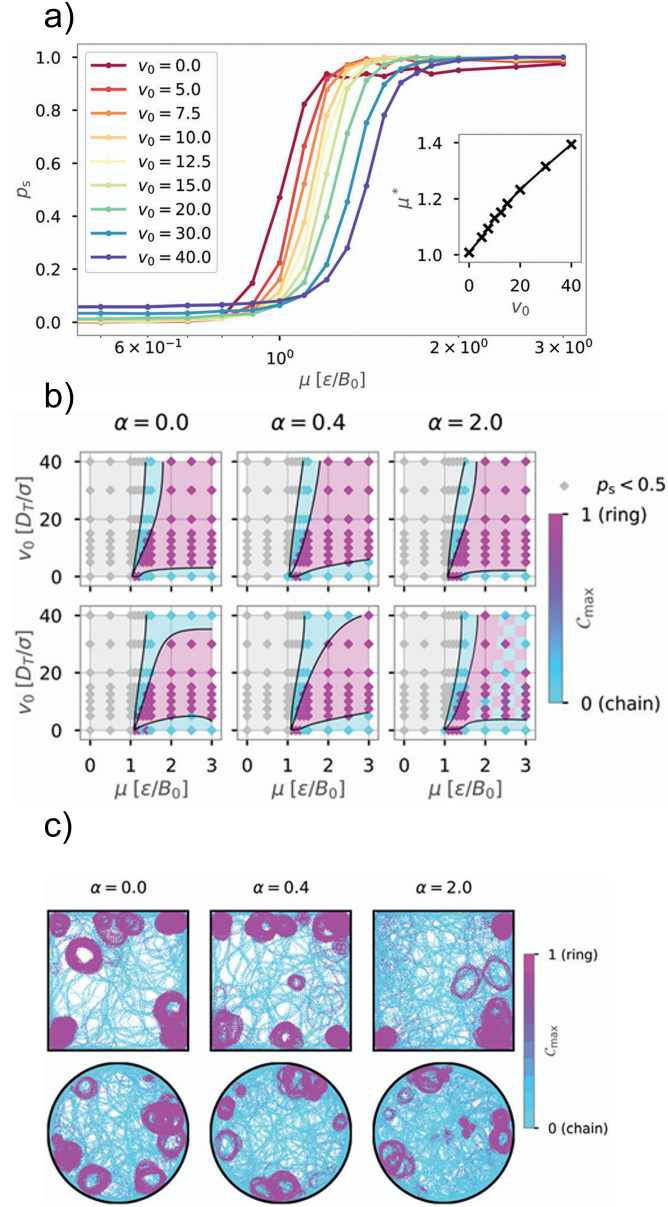


Figura 1.8: a) Probabilidad de formación de estructuras p_s como función del momento dipolar magnético μ para $N = 36$ partículas. Las diferentes curvas corresponden a diferentes velocidades de autopropulsión v_0 . El recuadro muestra la dependencia del dipolo magnético crítico μ^* de la velocidad de autopropulsión. b) Influencia de las condiciones de frontera en los diagramas de estados de $N = 36$ partículas: Se varía la forma del confinamiento (primera fila: caja de $L = 50$, segunda fila: círculo de $R = 50/\sqrt{\pi}$) y el coeficiente de interacción con las paredes ($\alpha = 0.0; 0.4; 2.0$). Las áreas coloreadas y las líneas se agregan como ayuda visual. El área coloreada con el patrón cuadrículado indica que no hay una asignación clara a una estructura dominante que pudiera ser asignada a estos parámetros. c) Parámetro de orden local $C_{max}(\mathbf{r})$ para 10 realizaciones independientes con $v_0 = 15$ y $\mu = 2$. Tomadas de [27].

CAPÍTULO 1. MARCO TEÓRICO

1.1. ANTECEDENTES

anillos son las condiciones dominantes. El diagrama de fases cambia cualitativamente con un α creciente. Para una torca de pared alta ($\alpha = 2.0$) para confinamiento circular, surge una región en la cual ya no es posible hacer una separación clara entre una fase de cadenas y anillos (cuadrículado bicolor).

En la Fig. 1.8(c) se calcula el parámetro de orden local C_{max} en una rejilla de 250×250 puntos en los confinamientos y se demuestra que las configuraciones de anillos ocurren principalmente cerca de los bordes de ambas geometrías de confinamiento. Este efecto se atribuye a la colisión de cadenas con los muros.

Sistemas grandes con campo externo

En un estudio más reciente de Telezki y Klumpp (2025) [15], se investigan los patrones formados por un sistema grande de micronadadores dipolares bajo el efecto de un campo magnético externo homogéneo.

Se modelan $N = 1156$ partículas en condiciones de frontera periódica. Este enfoque es equivalente a estudiar el sistema en el bulto, sin efectos de pared. Las ecuaciones de movimiento del i -ésimo micronadador introducen los efectos del campo mediante la torca $\boldsymbol{\tau}_i^{ext} = \mu \hat{\mathbf{e}}_i \times \mathbf{B}$ y el campo magnético externo homogéneo $\mathbf{B} = B \hat{\mathbf{e}}_x$. Para la rejilla de parámetros, se modelan tres fracciones de empaquetamiento: $\phi = 0.13$, $\phi = 0.23$ y un valor crítico $\phi = 0.57$ donde sistemas activos apolares presentan MIPS. Para el campo externo, se investigan las magnitudes adimensionales: 0.1, 1, 14² Considerando la magnitud adimensional $\mu^* = \mu B_0 / \epsilon$ con $B_0 = 1 \times 10^{-5}$ T³ y $\epsilon = k_B T$, se exploran nueve valores en el rango $[0, 1.6]$ y los valores individuales 2.4 y 4. Para las velocidades, dadas por el número de Péclet $v^* = v_0 \sigma / D_t^{(0)}$, se exploran once valores en el rango $[2, 500]$.

La caracterización de las estructuras formadas en el sistema se lleva a cabo mediante un sistema de clasificación basado en los siguientes tres parámetros de orden: (1) la fracción de partículas en el clúster más grande $\phi_c = n_c^*/N$, donde n_c^* es el número de partículas en este clúster, (2) la polarización global ϕ_e , dada por

$$\phi_e = \frac{1}{N} \left\| \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{e}}_i \right\| \quad (1.8)$$

y (3) el grado de polimerización ϕ_p , dada por $\phi_p = n_{chain}/N$, donde n_{chain} es el número de micronadadores que satisfacen los siguientes tres criterios: 1) su distancia es menor que el radio de corte, $r_{ij} < r_c$. 2) Están alineados de forma paralela $\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_j > 0$. 3) Su orientación es paralela al vector de distancia que conecta sus centros, $(\hat{\mathbf{e}}_i \times \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \cdot (\hat{\mathbf{e}}_j \times \hat{\mathbf{r}}_{ij}) > 0$. Estos criterios son útiles para identificar la formación de cadenas en el sistema.

Para una clasificación sistemática de los patrones formados en el sistema, se consideró que el sistema estaba ordenado de acuerdo con el parámetro de orden global correspondiente si su promedio de ensamble global era mayor a 0.5. Esta clasificación define ocho estados posibles, mostrados en la Tabla 1.1. En la Fig. 1.9, se muestran capturas de los sistemas simulados con baja fracción de empaquetamiento ($\phi = 0.13$) y velocidad de autopropulsión intermedia ($v_0 = 23$), para diferentes valores de B (por columnas) y μ (por filas).

Los diagramas de estado obtenidos se muestran en la Fig. 1.10. Por columnas, se muestran tres intensidades de campo magnético: $B = 0.1; 1; 14$; por filas, tres fracciones de empaquetamiento: $\phi = 0.13; 0.23; 0.57$. Como era de esperarse, la MIPS solo se observa con el valor crítico $\phi = 0.53$, en ausencia de interacciones dipolares (triángulos naranjas, etiqueta “cluster”). Este fenómeno se atribuye a que la interacción dipolar previene el autoatrapamiento mediante reorientaciones y, por tanto, la desaceleración necesaria para la MIPS.

Sistemas con un campo magnético externo débil y densidades bajas y moderadas (primera columna en Fig. 1.10) muestran configuraciones similares a sistemas sin campo externo. Este resul-

²Equivalentes a 10^{-4} , 10^{-3} y 0.14 mT, etiquetadas como “débil”, “moderado” y “fuerte”.

³Del orden de magnitud del campo magnético de la Tierra.

$\langle \phi_c \rangle > 0.5$	$\langle \phi_e \rangle > 0.5$	$\langle \phi_p \rangle > 0.5$	Estado
✓	✓	✗	clúster
✗	✓	✗	gas orientado
✗	✓	✓	gas de cadenas
✓	✗	✗	clúster orientado
✓	✓	✗	red de cadenas
✗	✓	✓	cadenas orientadas
✓	✗	✓	bandas
✗	✗	✗	gas desordenado

Tabla 1.1: Combinaciones de parámetros de orden y estados correspondientes. Adaptada de [15].

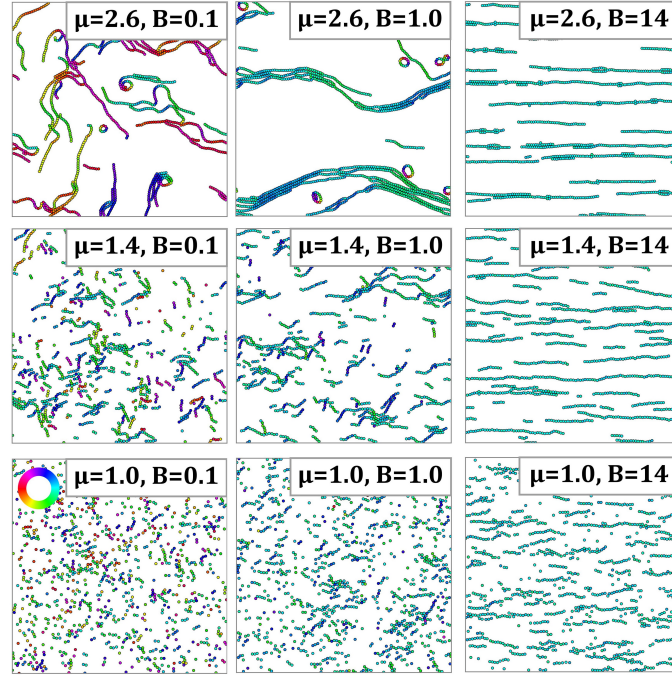


Figura 1.9: Colección de capturas del sistema con baja densidad ($\phi = 0.13$) y velocidad de propulsión intermedia ($v_0 = 23$) para diferentes intensidades de campos magnéticos B (columnas) y magnitudes de momento dipolar μ (filas). El campo magnético externo apunta de izquierda a derecha ($\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{x}}$). Todas las capturas fueron tomadas en el tiempo adimensional $t^* = 20$. Adaptada de [15].

tado concuerda con los diagramas observados en sistemas pequeños del trabajo anterior [27], donde los microneedles exhiben orden a partir de $\mu \geq 1$. En general, bajo la influencia de un campo magnético externo, las cadenas orientadas son dominantes y las bandas son menos frecuentes. Con intensidad moderada de campo magnético ($B = 1$), los microneedles tienden a alinearse con el campo tal y como puede observarse en la columna correspondiente en la Fig. 1.9. Para distintos valores de μ , las partículas exhiben transiciones entre estados colectivos característicos. En orden creciente de $\mu = 1.0; 1.4; 2.6$, el sistema evoluciona desde un gas orientado hacia configuraciones de cadenas orientadas, finalizando en la formación de bandas. Esta secuencia puede observarse

sobre el camino $v_0 = 23$ en el diagrama de estados correspondiente a $\phi = 0.13$ en la Fig. 1.10. Por otra parte, para campos e interacciones fuertes se observa una independencia de la actividad. Esta observación contrasta con los resultados para sistemas dipolares activos sin campos, donde la velocidad de autopropulsión tiene un papel crucial en la formación de estructuras colectivas. En cuanto a la formación de bandas en el sistema, se observa que el número de líneas por columna y el espacio entre columnas disminuye rápidamente con intensidad de momento magnético creciente, y se vuelve constante para campos magnéticos constantes.

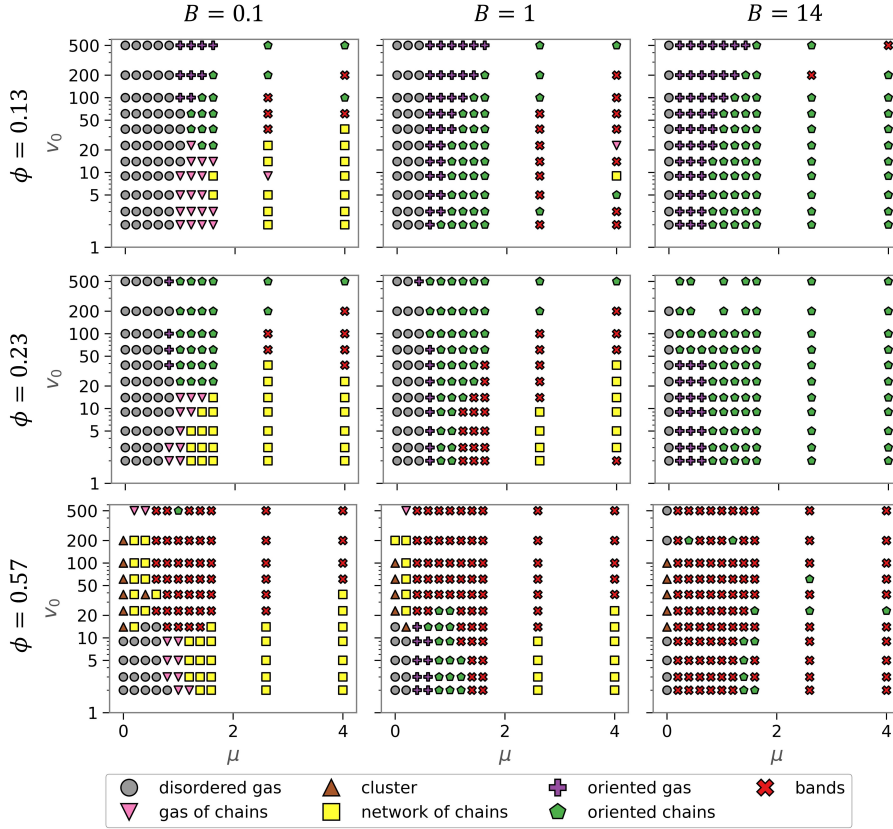


Figura 1.10: Diagramas de estado v_0 en función de μ para combinaciones de tres intensidades de campo magnético adimensionales $B = 0.1; 1.0; 14$ (por columnas) y tres fracciones de empaquetamiento $\phi = 0.13; 0.23; 0.57$ (por filas). Adaptada de [15].

1.2. Marco conceptual

1.2.1. Hidrodinámica bajo pequeño número de Reynolds

Para que un microorganismo pueda desplazarse a través de un fluido es necesario que se sobreponga a la fuerza viscosa del medio y aproveche el arrastre generado por el mismo. Para ello, estos han desarrollado diferentes técnicas (por ejemplo, el uso de flagelos, reacciones químicas e incluso mecanismos de propulsión a chorro) que les permiten desplazarse de forma eficiente a pesar de su tamaño [4].

Como principio general, el nado a escala microscópica se desarrolla en condiciones hidrodinámicas caracterizadas por números de Reynolds extremadamente bajos ($Re \ll 1$), donde la inercia

se ve superada por los efectos viscosos y de fricción. Se define el *número de Reynolds* Re como

$$Re = \frac{\rho v_0 \sigma}{\eta} \quad (1.9)$$

donde ρ es la densidad del fluido, v_0 la velocidad de nado del micronadador (velocidad característica del problema), σ es su diámetro (longitud característica) y η , la viscosidad del medio. Esta cantidad representa una comparación entre las fuerzas inerciales y viscosas por unidad de volumen del medio. Cuando $Re \ll 1$, podemos considerar que la inercia del cuerpo sumergido en el fluido es insignificante. En este caso, toda la energía del nadador se emplea para modificar la forma de nadar o se disipa instantáneamente en forma de calor. Mientras que para una ballena azul, $Re \sim 10^8$ (longitud característica ~ 10 m y velocidad característica ~ 10 m/s), para cuerpos en la escala microscópica se tiene $Re \sim 10^{-5} - 10^{-4}$ -prácticamente, el número de Reynolds de un humano nadando en miel- [4].

Debido al teorema de Purcell, el movimiento del micronadador en el régimen $Re \ll 1$ solo depende de las fuerzas que actúan sobre él en ese mismo instante; en otras palabras, su dinámica no depende de eventos pasados y puede despreciarse el término inercial de las ecuaciones de Navier-Stokes. De esta manera, se obtienen las *ecuaciones de Stokes*.

$$\begin{aligned} \frac{1}{Re} \nabla'^2 \mathbf{v}'(\mathbf{r}', t') &= \nabla' p'(\mathbf{r}', t') \\ \nabla' \cdot \mathbf{v}'(\mathbf{r}', t') &= 0 \end{aligned} \quad (1.10)$$

donde $\mathbf{v}' = \mathbf{v}/v_0$ es la velocidad de flujo, $p' = p/\Delta p$ es el campo de presión, $\mathbf{r}' = \mathbf{r}/\sigma$, el vector de posición, y $t' = v_0 t/\sigma$ el tiempo; todas estas cantidades expresadas en su versión adimensional. Estas son las ecuaciones que gobiernan la hidrodinámica de bajo número de Reynolds de un micronadador.

1.2.2. Ecuaciones de Langevin

Debido a su tamaño, los micronadadores se encuentran dentro de la escala coloidal (10 nm - 10 μ m), y no están exentos de presentar fenómenos que son comunes a sus contrapartes pasivas. Uno de ellos es el movimiento browniano, que consiste en el movimiento errático producido por el elevado número de colisiones aleatorias de las moléculas del solvente sobre su superficie. De esta manera, las moléculas del solvente interactúan con el nadador solo de forma promedio. Dicho movimiento puede clasificarse en dos tipos: traslacional y rotacional.

Una forma de estudiar el movimiento browniano es usar las ecuaciones de Newton agregando una fuerza o una torca estocástica que cambie rápidamente para modelar las interacciones de la partícula con dichas moléculas. A este enfoque se le conoce como el formalismo de Langevin.

En un sistema coloidal pasivo, la i -ésima partícula esférica realiza una difusión browniana pasiva con coeficiente de difusión traslacional

$$D_t^{(0)} = \frac{k_B T}{3\pi\eta\sigma} = \frac{k_B T}{\gamma_t} \quad (1.11)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, T la temperatura del solvente y η , su viscosidad [23]. Por otra parte, la i -ésima partícula realiza una difusión rotacional cuyo coeficiente de difusión rotacional es

$$D_r^{(0)} = \frac{k_B T}{\pi\eta\sigma^3} = \frac{k_B T}{\gamma_r} \quad (1.12)$$

En el caso particular de un sistema de N micronadadores dipolares esféricos bajo un campo magnético externo homogéneo, el movimiento de cada agente puede modelarse como la acción combinada de cuatro procesos físicos diferentes: (1) un proceso de difusión aleatoria (traslacional y rotacional); (2) una torca debida al campo externo; (3) fuerzas y torcas resultantes debido a

las interacciones dipolares y de volumen excluido entre los micronadadores y (4) una fuerza de autopropulsión que genera una velocidad constante al equilibrarse con la viscosidad del solvente. De esta manera, el movimiento traslacional y rotacional de cada micronadador está gobernado por las ecuaciones de Langevin en dos dimensiones

$$M\ddot{\mathbf{r}}_i(t) = -\gamma_t \dot{\mathbf{r}}_i(t) + \gamma_t v_0 \hat{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{F}_i^{\text{int}}(t) + \sqrt{2\gamma_t k_B T} \mathbf{W}_{r,i}(t) \quad (1.13a)$$

$$I\ddot{\phi}_i(t) = -\gamma_r \dot{\phi}_i(t) + \tau_{i,z}^{\text{ext}}(t) + \tau_{i,z}^{\text{int}}(t) + \sqrt{2\gamma_r k_B T} W_{\phi,i}(t) \quad (1.13b)$$

para $i = 1, 2, \dots, N$, donde M (I) es la masa (momento de inercia) de un micronadador esférico, $\mathbf{W}_{r,i} = (W_{x,i}, W_{y,i})$, $W_{\phi,i}$ representan procesos de ruido blanco gaussianos independientes cuyas componentes satisfacen

$$\langle W_{\alpha,i}(t) W_{\beta,j}(t') \rangle = \delta_{i,j} \delta_{\alpha,\beta} \delta(t - t') \quad (1.14)$$

donde los índices (α, β) corren sobre las componentes x, y, ϕ . Las fuerzas y torcas de interacción se escriben como

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_i^{\text{int}}(t) &= \sum_{j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij}(t) \\ \tau_{i,z}^{\text{int}}(t) &= \sum_{j \neq i}^N \tau_{ij,z}(t) \end{aligned} \quad (1.15)$$

En el capítulo 2 estas ecuaciones se simplifican bajo el enfoque de la dinámica browniana y se discretizan empleando el método de integración estocástica de Euler-Maruyama para obtener las trayectorias espaciales y angulares.

1.2.3. Ecuaciones de Dinámica Browniana

La Dinámica Browniana es una aproximación matemática ampliamente utilizada para describir la dinámica de sistemas microscópicos en la escala de tiempos difusiva [30]. En la escala de longitud característica de los micronadadores, las fuerzas viscosas superan en varios órdenes a los efectos inerciales, como lo indica el número de Reynolds Re . Para un micronadador $\sigma = 1\mu\text{m}$ con velocidad de autopropulsión $v_0 = 10\sigma/\text{s}$ sumergido en agua, se obtiene

$$Re = \frac{\rho v_0 \sigma}{\eta} \approx 5 \times 10^{-6} \quad (1.16)$$

De este modo, el sistema opera en un régimen en el que las fuerzas y torcas que actúan sobre cada micronadador se equilibran de forma instantánea.

En este límite, también conocido como dinámica de Langevin sobrearmortiguada o *sin inercia*, se descartan los términos inerciales de las ecuaciones de Langevin.

1.2.4. Método de Euler-Maruyama

Las Ecs. 1.13 se denominan matemáticamente como ecuaciones diferenciales estocásticas (SDE, por sus siglas en inglés), debido a la inclusión de términos estocásticos. Obtener soluciones analíticas es extremadamente complejo, por lo cual se recurre a distintos métodos de aproximaciones numéricas. Estos métodos se basan típicamente en discretizaciones de tiempo con puntos

$$0 = t_0 < t_1 < \dots < t_P$$

en el intervalo de tiempo $[0, t_P]$, usando un paso de tiempo $\Delta t = t_P/P$, donde P es el número de pasos. El método de Euler-Maruyama es el ejemplo más simple de tales métodos y fue estudiado por Gisiro Maruyama en 1955. Se considera una SDE de Itô de la forma

$$dX_t = a(X_t)dt + b(X_t)dW_t \quad (1.17)$$

donde $t \in [0, t_P]$, con el valor inicial $X_0 \in \mathcal{R}$. Se asume que el proceso estocástico $X = \{X_t, 0 \leq t \leq t_P\}$ es una solución única de la SDE 1.17. El método de Euler-Maruyama consiste en la implementación de la ecuación recursiva

$$X_{n+1} = X_n + a(X_n)\Delta t + B(X_n)\Delta W_n \quad (1.18)$$

donde $n = 0, 1, \dots, P$ y $\Delta W_n = W_{t_{n+1}} - W_{t_n}$ denota el incremento del proceso de Wiener en el intervalo $[t_n, t_{n+1}]$, en términos de las variables aleatorias gaussianas con media cero y varianza Δt . A pesar de su simplicidad, se demuestra que este método converge para $\Delta t \rightarrow 0$ bajo diferentes tipos de convergencia, a la solución X de la SDE de Itô de la Ec. 1.17 [29].

1.2.5. Propiedades dinámicas y estructurales

Desplazamiento cuadrático medio

La cantidad más simple que describe el movimiento traslacional y rotacional es el desplazamiento cuadrático medio (*MSD*, por sus siglas en inglés). Se denota el MSD traslacional con W_t y el rotacional con W_r . Teóricamente, estas cantidades están definidas como los promedios de ensamble

$$W_t(t) = \langle |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t=0)|^2 \rangle \quad (1.19a)$$

$$W_r(t) = \langle |\hat{\mathbf{u}}(t) - \hat{\mathbf{u}}(t=0)|^2 \rangle \quad (1.19b)$$

donde $|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t=0)|$ es el desplazamiento del micronadador entre $t = 0$ y t , mientras que $|\hat{\mathbf{u}}(t) - \hat{\mathbf{u}}(t=0)|$ es la distancia entre vectores unitarios en el plano.

Escalas de tiempo: Una escala de tiempo es el orden temporal característico en el cual una variable dinámica cambia significativamente. El comportamiento del exponente del tiempo en el MSD traslacional sirve como criterio para separar dos regímenes de movimiento importantes en sistemas coloidales pasivos: (1) balístico ($W_t \sim t^2$, en $t \ll M/\gamma$ conocido como tiempo de relajación de momento) y (2) difusivo o browniano ($W_t \sim t$, para $t \gg M/\gamma$). En la primera escala, antes de la relajación del momento lineal, el movimiento puede aproximarse como inercial. Sin embargo, en sistemas coloidales este régimen dura tiempos extremadamente cortos. En la segunda, la partícula exhibe movimiento browniano como si hubiera “perdido memoria de su masa” y sus trayectorias son, por tanto, erráticas. Para una partícula pasiva en la escala de tiempo difusiva, el MSD traslacional es lineal en el tiempo:

$$W_t(t) = 4D_t^{(0)}t \quad (\text{para } t \gg M/\gamma_t) \quad (1.20)$$

donde el factor numérico que acompaña al coeficiente de difusión se relaciona con los grados de libertad (dos para el caso bidimensional) multiplicado por 2. Por otra parte, el comportamiento del MSD rotacional a tiempos cortos de la escala difusiva tiene la forma de un movimiento traslacional en una sola dimensión

$$W_r(t) = 2D_r^{(0)}t \quad (\text{para } t \ll \tau_r) \quad (1.21)$$

donde $\tau_r = 1/D_r^{(0)}$ es el tiempo de reorientación de orientación del movimiento autopropulsado del micronadador. Considerando una partícula esférica de poliestireno ($\rho = 1.05\text{g/cm}^3$) de $\sigma = 1\mu\text{m}$ sumergida en agua, el tiempo de relajación de momento es $M/\gamma_t \approx 0.2\mu\text{s}$ mientras que $\tau_r \approx 2.3$ s.

Desplazamiento cuadrático medio de un micronadador libre: Como se demuestra en el Apéndice A.3, los desplazamientos cuadráticos medios bidimensionales asociados a los movimientos traslacional y rotacional (denotados por W_t y W_r , respectivamente) de un micronadador inmerso en un fluido sin campos externos y en la escala difusiva están dados por

$$W_t(t) = 4 \left(D_t^{(0)} + \frac{v_0^2}{2D_r^{(0)}} \right) t + \frac{2v_0^2}{D_r^{(0)^2}} \left[\exp(-D_r^{(0)}t) - 1 \right] \quad (1.22a)$$

$$W_r(t) = 2 \left[1 - \exp(-D_r^{(0)}t) \right] \quad (1.22b)$$

donde W_t coincide con el ajuste a los resultados experimentales [30]. Para *tiempos cortos*, se aplica una aproximación en serie de Taylor a segundo orden alrededor de $t = 0$ en W_t y se obtiene

$$W_t(t) = 4D_t^{(0)}t + v_0^2t^2 \quad (\text{para } t \ll \tau_r) \quad (1.23)$$

En la Fig. 1.11(a) se muestran dos regímenes a tiempos cortos: (1) en el intervalo de 0.001 a 0.1 s domina la difusión térmica pasiva del término lineal, (2) en el intervalo de 0.1 a 1 s domina el término cuadrático, produciendo un régimen balístico intermedio. Aplicando un límite a tiempos largos $t \gg \tau_r$, se obtiene

$$W_t(t) = 4 \left(D_t^{(0)} + \frac{v_0^2}{2D_r^{(0)}} \right) t \quad (\text{para } t \gg \tau_r) \quad (1.24)$$

En la figura mencionada, este intervalo ocurre en el intervalo de 1 a 100s, la orientación se aleatoriza y se recupera un comportamiento difusivo con un coeficiente de difusión efectivo mayor al de la contraparte pasiva

$$D_{t,eff}^{(0)} = D_t^{(0)} + \frac{v_0^2}{2D_r^{(0)}} \quad (1.25)$$

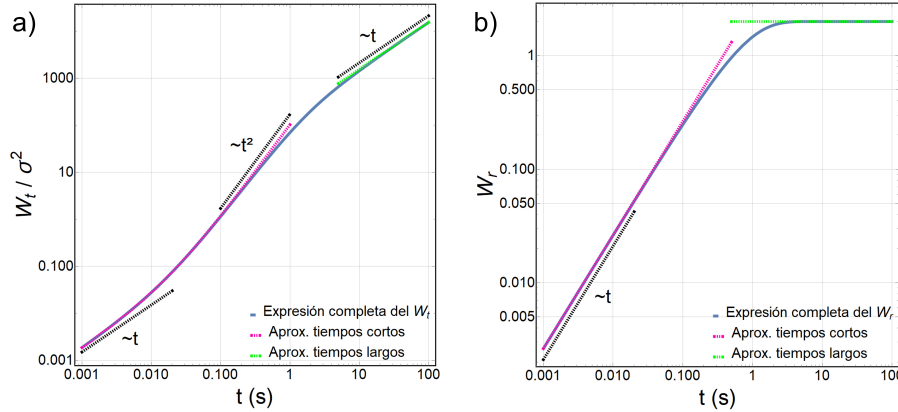


Figura 1.11: a) Desplazamiento cuadrático medio de un micronadador con velocidad de auto-propulsión $v_0 = 10\sigma/s$, en ausencia de campo externo. Se muestra la dependencia del tiempo correspondiente a las tres fases del movimiento de sistemas activos, así como las aproximaciones a tiempos cortos y largos. b) Desplazamiento rotacional cuadrático medio de un micronadador con velocidad rotacional $\Omega = 0$, en ausencia de campo externo.

Este movimiento difusivo a tiempos largos es resultado de la aleatorización de la orientación del movimiento a una escala de tiempo de orden mayor. La dependencia de v_0 de $D_{eff}^{(0)}$ se muestra en la Fig. 1.12.

En el caso rotacional, W_r es idéntico a la expresión de su contraparte pasiva, puesto que no se considera que el micronadador tenga una velocidad angular intrínseca Ω_0 . Como se observa en la Fig. 1.11(b), tiene un límite geométrico a tiempos largos $W_r \rightarrow 2$ (para $t \gg \tau_r$), tiempo en el que la difusión rotacional ha aleatorizado completamente la orientación del micronadador.

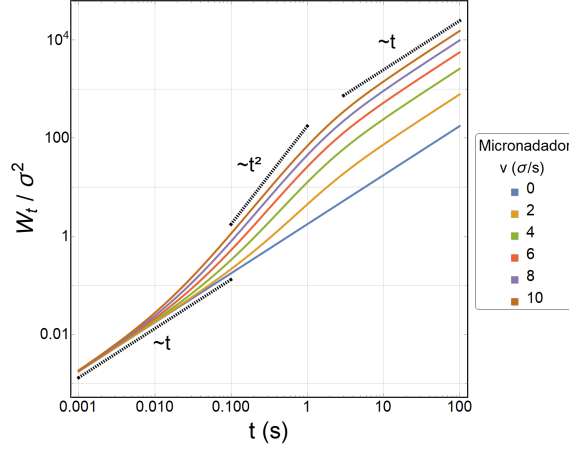


Figura 1.12: Desplazamiento traslacional cuadrático medio para velocidades de 0 a $10\sigma/s$ de un micronadador libre.

Factor de estructura estático

Para fluidos en equilibrio (pasivos), la cantidad básica que revela las correlaciones estructurales en el fluido desordenado es el factor de estructura S o, alternativamente, la función de distribución radial $g(r)$ (que no es analizada en este trabajo). Desde los inicios de la física del estado líquido, el factor de estructura ha sido medido por experimentos de dispersión de luz y calculado mediante simulaciones y teoría integral de ecuaciones. En este sentido, el modelo de esfera dura ha jugado un papel fundamental para entender la estructura de los fluidos y probar teorías aproximadas.

Las propiedades estructurales de los fluidos activos han sido estudiadas mucho menos. Esta es una brecha significativa, porque los fluidos activos homogéneos proporcionan un terreno de prueba claro para extender los conceptos bien establecidos de la física estadística clásica a regiones lejos del equilibrio térmico.

Una variable estocástica particularmente importante es la densidad microscópica de número ρ de partículas coloidales (o micronadadores esféricos, en este caso), definida como

$$\rho(\mathbf{X}|\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N|\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}) \quad (1.26)$$

Integrar esta función con respecto a $\mathbf{r}$ sobre algún volumen ΔV da el número de partículas en ese volumen. Esta función puede ser descompuesta en componentes sinusoidales dadas por una transformada de Fourier. La transformada de Fourier con respecto a $\mathbf{r}$ da,

$$\rho(\mathbf{X}|\mathbf{q}) = \rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N|\mathbf{q}) = \sum_{j=1}^N \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j) \quad (1.27)$$

Para sistemas con invariancia traslacional [19], se deriva la función de densidad de autocorre-

lación S_c como

$$\begin{aligned} S_c(\mathbf{q}, t - t_0) &= \frac{1}{N} \langle \rho^*(\mathbf{X}(t_0)|\mathbf{q}) \rho(\mathbf{X}(t)|\mathbf{q}) \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{j,k=1}^N \langle \exp(i\mathbf{q} \cdot [\mathbf{r}_j(t_0) - \mathbf{r}_k(t)]) \rangle \end{aligned} \quad (1.28)$$

donde el factor $1/N$ se agrega por conveniencia, el superíndice $*$ indica una conjugación compleja. A esta función se le conoce como factor de estructura dinámico colectivo. En la ausencia de interacciones, para suspensiones muy diluidas, S_c es 1 en $t = t_0$.

Para tiempos iguales $t = t_0$, S_c se reduce al llamado factor de estructura estático,

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{j,k=1}^N \langle \exp(i\mathbf{q} \cdot [\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k]) \rangle \quad (1.29)$$

Esta es la expresión matemática que se usará en el modelo para calcular S_c , dado que la integral sobre el volumen solo aplica para sistemas en el límite termodinámico y no en sistemas microscópicos. Los corchetes $\langle \dots \rangle$ denotan un promedio sobre algún estado estacionario de no equilibrio. En un fluido homogéneo e isotrópico, $S(q)$ solo depende de su magnitud $q = |\mathbf{q}|$.

Para sistemas en equilibrio, el límite de números de onda pequeños del factor de estructura se relaciona con la compresibilidad isotérmica mediante la ecuación

$$nk_B T \chi_T = \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} S(\mathbf{q}) \quad (1.30)$$

donde χ_T es la compresibilidad isotérmica y n es la densidad de número definida como $n = N/V$, donde V es el volumen del sistema. En un sistema finito como el de este estudio, $S(\mathbf{q})$ diverge en el límite de vectores de onda pequeños, debido a grandes fluctuaciones de densidad. En este sentido, no es posible asignar una compresibilidad al sistema dentro de este esquema. Este fenómeno es similar a lo que sucede en sistemas activos en MIPS [17, 31].

Capítulo 2

Métodos

2.1. Modelo

En este trabajo se modela numéricamente un conjunto finito de $N = 100$ micronadadores esféricos de diámetro $\sigma = 1\mu\text{m}$, velocidad de autopropulsión v_0 y un dipolo puntual incrustado en su centro de masa. La posición de cada micronadador se describe mediante el vector $\mathbf{r}(t) = (x(t), y(t))$, donde x y y son las coordenadas espaciales. El momento dipolar está dado por $\mathbf{m} = m\hat{\mathbf{u}}$, donde $\hat{\mathbf{u}} = (\cos \phi, \sin \phi)$ es el vector unitario que indica la orientación del dipolo y m es su magnitud. Se consideran las magnitudes $m^* \in \{1/\sqrt{10}, 1, \sqrt{10}\}$ en unidades de $m_0 = 100 \text{ aJ/T}^{-1}$. La naturaleza de la fuerza autopropulsora que da origen a la actividad no es objetivo de estudio en este trabajo, por tanto, la actividad o velocidad de autopropulsión de cada micronadador se modela como un vector constante $\mathbf{v}_0 = v_0\hat{\mathbf{u}}$ paralelo a la dirección del momento dipolar. Se toma la rapidez fija $v = 10\sigma/\text{s}$ ² como un estándar del movimiento de micronadadores de sistemas reales [8, 24]. Una representación esquemática de un micronadador individual se ilustra en la Fig. 2.1(a). En la Fig. 2.1(b), se ilustran las configuraciones iniciales, las cuales consisten en arreglos de rejilla de 10×10 con espaciados iniciales $d_0^* \in \{1, 2, 3\}$ (en unidades de σ) y orientaciones aleatorias en cada corrida del modelo. Las orientaciones se asignan conforme a una distribución uniforme $[0, 2\pi)$.

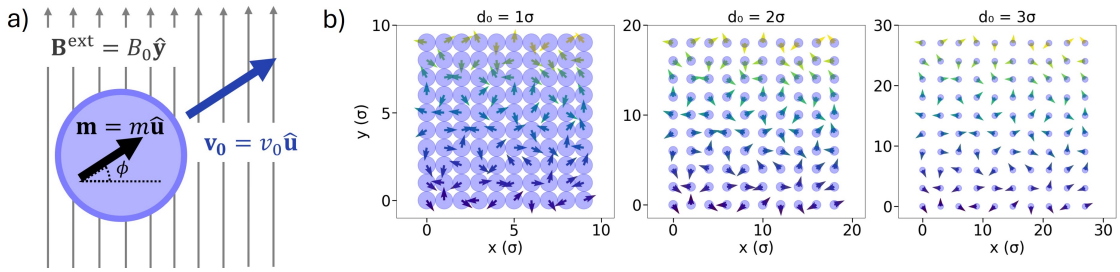


Figura 2.1: a) Esquema de un micronadador esférico con un dipolo magnético puntual incrustado en su centro de masa y sometido a un campo magnético homogéneo externo $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{y}}$. La dirección de la velocidad de autopropulsión $\mathbf{v}_0$ coincide con la orientación del momento dipolar $\mathbf{m}$, descrita por el vector unitario $\hat{\mathbf{u}}$ que forma un ángulo polar ϕ . b) Configuración inicial. Rejilla cristalina de micronadadores con espaciado $d_0 \in \{\sigma, 2\sigma, 3\sigma\}$.

El solvente modelado consiste en agua a temperatura ambiente $T = 300\text{K}$, viscosidad $\eta =$

¹Este es un valor congruente con el orden de magnitud del momento dipolar de micronadadores dipolares y bacterias magnetotáticas experimentos y simulaciones [14, 20, 21]

²Número de Péclet $\text{Pe}_r = aD_r/v_0 \approx 0.07$, donde $a = \sigma/2$ [31].

1mPa·s y permeabilidad magnética $\mu = 1.26\mu\text{H/m}$. Sobre el sistema se aplica un campo magnético externo uniforme $\mathbf{B}^{\text{ext}} = B\hat{\mathbf{y}}$. La intensidad del campo magnético homogéneo externo corresponde a valores $B^* \in \{0, 0.1, 1, 10\}$ en unidades de $B_0 = 1\text{mT}$.

Imponiendo $M\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{0}$ y $I\ddot{\phi} = 0$ en las ecuaciones de Langevin 1.13, estas se simplifican a las siguientes expresiones

$$\dot{\mathbf{r}}_i = v_0\hat{\mathbf{u}} + \frac{1}{\gamma_t}\mathbf{F}_i^{\text{int}} + \sqrt{2D_t^{(0)}}\mathbf{W}_{r,i} \quad (2.1a)$$

$$\dot{\phi}_i = \frac{1}{\gamma_r}\tau_{i,z}^{\text{ext}} + \frac{1}{\gamma_r}\tau_{i,z}^{\text{int}} + \sqrt{2D_r^{(0)}}W_{\phi,i} \quad (2.1b)$$

Estas son las ecuaciones de dinámica browniana que describen la dinámica traslacional y rotacional del i -ésimo micronadador en el régimen sobrearmortiguado. Los factores $\mathbf{W}_{r,i} = (W_{x,i}, W_{y,i})$, $W_{i,\phi}$ representan procesos de ruido blanco gaussianos independientes cuyas componentes satisfacen

$$\langle W_{\alpha,i}(t)W_{\beta,j}(t') \rangle = \delta_{i,j}\delta_{\alpha,\beta}\delta(t-t') \quad (2.2)$$

donde los índices (α, β) corren sobre las componentes x, y y ϕ . La torca experimentada por la i -ésima partícula, debida al campo externo $\mathbf{B}^{\text{ext}}$ es

$$\boldsymbol{\tau}_i^{\text{ext}} = \mathbf{m}_i \times \mathbf{B}^{\text{ext}} = mB \cos \phi_i \hat{\mathbf{z}} \quad (2.3)$$

Las fuerzas y torcas de interacción se escriben como

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_i^{\text{int}}(t) &= \sum_{j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij}(t) \\ \tau_{i,z}^{\text{int}}(t) &= \sum_{j \neq i}^N \tau_{ij,z}(t) \end{aligned} \quad (2.4)$$

Considerando que los micronadadores son esferas duras con dipolo puntual incrustado en su centro de masa, se plantean dos potenciales a pares dependiendo de la distancia entre partículas $\mathbf{r}_{ij}$ comparada con el radio de corte $r_C = 2^{1/6}\sigma$. Si $r_{ij} < r_C$, las interacciones de volumen excluido son modeladas mediante el potencial de interacción de Weeks-Chandler-Andersen (WCA) [32], dado por

$$U_{ij}^{\text{WCA}}(r_{ij}) = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 + \frac{1}{4} \right] & \text{si } r \leq r_C \\ 0 & \text{si } r > r_C \end{cases} \quad (2.5)$$

donde $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ es la posición de la partícula j respecto a la i . Si $r_{ij} \geq r_C$, se propone el potencial dipolar, dado por

$$U_{ij}^{\text{DD}}(\mathbf{r}_{ij}, \hat{\mathbf{u}}_i, \hat{\mathbf{u}}_j) = \frac{\mu m^2}{4\pi} \left[\frac{\hat{\mathbf{u}}_i \cdot \hat{\mathbf{u}}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\hat{\mathbf{u}}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\hat{\mathbf{u}}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] \quad (2.6)$$

La fuerza de interacción del j -ésimo micronadador sobre el i -ésimo es

$$\mathbf{F}_{ij} = -\nabla_i U_{ij} = -\frac{3\mu m^2}{4\pi r_{ij}^5} \left[(\hat{\mathbf{u}}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})\hat{\mathbf{u}}_j + (\hat{\mathbf{u}}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})\hat{\mathbf{u}}_i + (\hat{\mathbf{u}}_i \cdot \hat{\mathbf{u}}_j)\mathbf{r}_{ij} - 5 \frac{(\hat{\mathbf{u}}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\hat{\mathbf{u}}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \mathbf{r}_{ij} \right] \quad (2.7)$$

para $i = 1, 2, \dots, N$ y $j = 1, 2, \dots, N$. La torca $\boldsymbol{\tau}_{ij}$ que el j -ésimo micronadador produce sobre el i -ésimo es la suma de dos contribuciones

$$\boldsymbol{\tau}_{ij} = \boldsymbol{\tau}_{ij}^A + \boldsymbol{\tau}_{ij}^B \quad (2.8)$$

La primera viene del i -ésimo micronadador estando inmerso en el campo magnético $\mathbf{B}_j$ del j -ésimo, y está dada por

$$\boldsymbol{\tau}_{ij}^A = \mathbf{m}_i \times \mathbf{B}_j(\mathbf{r}_i) = \frac{\mu m^2}{4\pi} \left[\frac{3(\hat{\mathbf{u}}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})(\hat{\mathbf{u}}_i \times \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} - \frac{\hat{\mathbf{u}}_i \times \hat{\mathbf{u}}_j}{r_{ij}^3} \right] \quad (2.9)$$

La segunda contribución en la Ec. 2.8 surge de la fuerza que ejerce el dipolo del j -ésimo nadador sobre el del i -ésimo:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}_{ij}^B = \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_{ij} = \frac{3\mu m^2}{4\pi r_{ij}^5} \left[5 \frac{(\hat{\mathbf{u}}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\hat{\mathbf{u}}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} (\mathbf{r}_i \times \mathbf{r}_j) \right. \\ \left. - (\hat{\mathbf{u}}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{r}_i \times \hat{\mathbf{u}}_j) - (\hat{\mathbf{u}}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{r}_j \times \hat{\mathbf{u}}_i) - (\hat{\mathbf{u}}_i \cdot \hat{\mathbf{u}}_j)(\mathbf{r}_i \times \mathbf{r}_j) \right] \end{aligned} \quad (2.10)$$

Los detalles de estos cálculos se encuentran en el Apéndice A.1.

2.2. Integración de ecuaciones

Las soluciones analíticas $\mathbf{r}_i(t)$ y $\phi_i(t)$ de las ecuaciones de dinámica browniana del sistema pueden aproximarse mediante las secuencias a tiempo finito $\mathbf{r}_i(t_n)$ y $\phi_i(t_n)$. Aplicando el método de Euler-Maruyama (también conocido como método de diferencias finitas) a intervalos de tiempo regulares $t_n = n\Delta t$. Se realizan las siguientes sustituciones

$$\mathbf{r}_i(t) \rightarrow \mathbf{r}_{i,n+1}, \quad \phi_i(t) \rightarrow \phi_{i,n+1} \quad (2.11a)$$

$$\mathbf{r}'_i(t) \rightarrow \frac{1}{\Delta t}(\mathbf{r}_{i,n+1} - \mathbf{r}_{i,n}), \quad \phi'_i(t) \rightarrow \frac{1}{\Delta t}(\phi_{i,n+1} - \phi_{i,n}) \quad (2.11b)$$

$$\mathbf{W}_{r,i}(t) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\Delta t}} \mathbf{w}_{r,i,n}, \quad W_{\phi,i}(t) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\Delta t}} w_{\phi,i,n} \quad (2.11c)$$

donde $w_{\phi,i,n}$ y $\mathbf{w}_{r,i,n}$ son procesos de ruido blanco gaussiano con media igual a cero y desviación estándar igual a uno. En Python, estos procesos se modelan como números pseudoaleatorios tomados de una distribución $\mathcal{N}(0,1)$ mediante la función `random.normal`, incluida en el paquete `numpy`. Las soluciones numéricas se obtienen en forma de las siguientes relaciones recursivas:

$$\mathbf{r}_{i,n+1} = \mathbf{r}_{i,n} + v_0 \hat{\mathbf{u}}_{i,n} \Delta t + \frac{1}{\gamma_t} \mathbf{F}_{i,n}^{\text{int}} \Delta t + \sqrt{2D_t^{(0)} \Delta t} \mathbf{w}_{r,i,n} \quad (2.12a)$$

$$\phi_{i,n+1} = \phi_{i,n} + \frac{1}{\gamma_r} \tau_{i,n}^{\text{ext}} \Delta t + \frac{1}{\gamma_r} \tau_{i,n}^{\text{int}} \Delta t + \sqrt{2D_r^{(0)} \Delta t} w_{\phi,i,n} \quad (2.12b)$$

Estas son las soluciones numéricas para los grados de libertad del micronadador en una corrida del modelo. Dichas ecuaciones de movimiento se integraron en $P = 10^5$ pasos de tiempo con tamaño de paso $\Delta t^* = 10^{-4} \tau_r$. Los criterios para la elección del tamaño de paso fueron: (1) que fuera mayor a la escala de tiempos balística del sistema ($t \approx 10^{-9}$ s), (2) evitar fuerzas de interacción infinitas y (3) mantener el tiempo de cómputo y el almacenamiento manejable con el poder de cómputo disponible. Se realizaron 10 repeticiones por cada combinación de parámetros (B, m, d_0) (360 corridas).

2.3. Entorno computacional

El entorno principal de trabajo fueron distintas Jupyter Notebooks (Python, versión 3.12.8), una por cada magnitud de momento dipolar, donde se declararon los parámetros del sistema. La

integración de ecuaciones, el procesamiento de datos y la generación de visualizaciones se realizaron mediante funciones de un módulo externo (`final_functions` as `f`) de autoría propia. El manejo y organización de los datos generados se efectuó dentro de un marco de trabajo también de autoría propia descrito en la Sección B.1.

El flujo de trabajo se estructuró en cuatro etapas principales:

1. **Condiciones iniciales:** Se especifican los valores de los parámetros, incluyendo la intensidad del dipolo m^* , el campo magnético externo B^* , así como el resto de valores mencionados en la Sección B.2. Adicionalmente, se generan las posiciones y las orientaciones aleatorias de los micronadadores en $t = 0$, determinadas por el espaciado inicial de rejilla d_0^* y una distribución uniforme de ángulos en $[0, 2\pi)$, respectivamente.
2. **Integración de las ecuaciones de movimiento:** Implementada por la función `solve_equations` del módulo desarrollado. Esta función aplica el método de Euler-Maruyama para resolver las ecuaciones de movimiento y actualiza, paso a paso, los valores de las posiciones y orientaciones según las Ecs. (2.12).
3. **Cálculo de propiedades:** Una vez obtenidos los conjuntos de datos correspondientes a las posiciones y orientaciones de todas las corridas es necesario procesarlas para calcular las propiedades dinámicas y estructurales. Estos cálculos generan nuevos conjuntos de datos agregados de menor tamaño.
4. **Visualización:** Se producen las gráficas correspondientes a las propiedades estudiadas.

2.4. Cálculo de propiedades

Desplazamiento cuadrático medio y coeficientes de difusión

Los desplazamientos cuadráticos medio (traslacional y rotacional) se describen en la sección 1.2.5. Para calcularlos de forma computacional se usó el algoritmo de Saxton (1997) [33], optimizado mediante el método de transformada de Fourier rápida (FFT, por sus siglas en inglés), según Calandrini et al. (2011)[34]. El caso traslacional está dado por la expresión

$$W_t(n\Delta t) = \left\langle \frac{1}{P-n} \sum_{i=1}^{P-n} \|\mathbf{r}_{i+n} - \mathbf{r}_i\|^2 \right\rangle \quad (2.13)$$

promediado sobre todas las corridas del modelo. En este caso, el desplazamiento traslacional cuadrático medio W_t se define como el promedio sobre todos los puntos con retraso temporal $n\Delta t$. P denota el número total de pasos de la simulación y n , el número de pasos de distancia entre el conjunto de pasos subsecuentes considerados. Para el MSD rotacional, se usa una adaptación de esta expresión:

$$W_r(n\Delta t) = \left\langle \frac{1}{P-n} \sum_{i=1}^{P-n} \|\hat{\mathbf{u}}_{i+n} - \hat{\mathbf{u}}_i\|^2 \right\rangle \quad (2.14)$$

donde u_x y u_y denotan, respectivamente, las componentes x y y del vector de orientación $\hat{\mathbf{u}}$.

Se definen los coeficientes de difusión efectivos para los casos traslacional y rotacional, a partir de las relaciones

$$W_t(\tau) = 4D_{t,eff}(\tau)\tau \quad (2.15a)$$

$$W_r(\tau) = 2[1 - \exp(-D_{r,eff}(\tau)\tau)] \quad (2.15b)$$

donde $D_{t,eff}$ y $D_{r,eff}$ son funciones del tiempo adimensional $\tau = t/\tau_r$ que emulan coeficientes efectivos. Comparados con los coeficientes no dependientes del tiempo de un micronadador libre, estos coeficientes adimensionales están dados por

$$D_{t,eff}^*(\tau) = \frac{1}{4D_{t,eff}^{(0)}\tau} W_t(\tau) \quad (2.16a)$$

$$D_{r,eff}^*(\tau) = -\frac{1}{D_r^{(0)}} \ln \left[1 - \frac{1}{2} W_r(\tau) \right] \quad (2.16b)$$

Factor de estructura estático

Para calcular el factor de estructura estático según la Ec. 1.29, se aplica el método usado en [17]. En todos los caso se han excluido valores pequeños del vector de onda (límite $q \rightarrow 0$), donde S diverge debido a las grandes fluctuaciones de número características de sistemas finitos e hiperuniformes [35].

Parámetros de orden

Se espera que diversas estructuras emerjan aún en sistemas pequeños de micronadadores activos dipolares. Para caracterizar estos patrones, se usan los siguientes parámetros de orden presentados en Telezki y Klumpp (2025) [15] y en Schwanzer (2016) [28]. Se usan combinaciones de estos parámetros para construir el diagrama de estados mostrado en el capítulo 3 de resultados.

Formación de clústeres

Para cuantificar la formación de clústeres, se determina el promedio de la fracción de todos los micronadadores que tienen al menos cinco vecinos en un radio $r_c = 1.2$, dada por

$$\langle \phi_c \rangle = \left\langle \frac{n_c^*}{N} \right\rangle \quad (2.17)$$

donde n_c^* es el número de micronadadores en clústeres con al menos cinco micronadadores, comparados con el número total N de micronadadores y la notación $\langle \cdot \rangle$ se refiere a un promedio sobre todas las iteraciones del modelo. Cuando todos los micronadadores están en clústeres con $n_c < 5$, $\langle \phi_c \rangle = 0$. Por otra parte el parámetro alcanza un valor de 1 cuando todos los micronadadores se concentran en un solo clúster. Para identificar los clústeres se usó el método DBSCAN, implementado para la búsqueda de vecinos mediante la función DBSCAN de la biblioteca scikit-learn en Python.

Fracción de micronadadores libres

Con el mismo método, se cuantifica el promedio de la fracción de micronadadores que no tienen vecinos en una distancia r_c , dada por

$$\langle \phi_f \rangle = \left\langle \frac{n_f^*}{N} \right\rangle \quad (2.18)$$

donde n_f^* es el número de micronadadores libres comparados con el número total N de micronadadores. Es importante destacar que los criterios $\langle \phi_c \rangle > 0.5$ y $\langle \phi_f \rangle > 0.5$ son mutuamente excluyentes, por lo que no existen estados que satisfagan a ambos.

Polarización global

El orden orientacional debido al acoplamiento de los dipolos con el campo externo se caracterizó mediante la polarización global, dada como el promedio de las orientaciones de todos los micronadadores en el conjunto

$$\langle \phi_M \rangle_0 = \left\langle \frac{1}{N} \left\| \sum_i \hat{\mathbf{u}}_i \right\| \right\rangle \quad (2.19)$$

Grado de formación de cadenas alineadas

Para caracterizar la formación de cadenas alineadas con el campo magnético $\mathbf{B}$, se aplican los criterios para determinación de estructura de cadenas presentado en Telezki y Klumpp (2025) [15]. El cuarto criterio se agrega para diferenciar la formación de cadenas individuales de clústeres con micronadadores cuyas columnas se encuentran alineadas. Se considera que dos micronadadores están alineados en una cadena si cumplen los siguientes criterios:

1. Su distancia es menor que el radio de corte: $r_{ij} < r_c$.
2. Están alineadas paralelamente: $\hat{\mathbf{u}}_i \cdot \hat{\mathbf{u}}_j > 0$.
3. Sus orientaciones son paralelas con la recta de su vector de distancia: $(\hat{\mathbf{u}}_i \times \hat{\mathbf{r}}_{ij}) \cdot (\hat{\mathbf{u}}_j \times \hat{\mathbf{r}}_{ij}) > 0$
4. Cada vector de orientación forma un ángulo θ con el vector de distancia menor a $\theta_c = 0.95$.

La fracción promedio de micronadadores que satisfacen los cuatro criterios está dada por

$$\langle \phi_p \rangle = \left\langle \frac{n_{chain}}{N} \right\rangle \quad (2.20)$$

Parámetro de orden hexático

El parámetro de orden hexático cuantifica el grado de similitud entre el entorno local de una partícula y un cristal hexagonal perfecto. Para el j -ésimo micronadador, el parámetro de orden hexático local $\Psi_{6,j}^{[1]}$ se define como

$$\Psi_{6,j}^{[1]} = \left| \frac{1}{M_j} \sum_{m=1}^{M_j} \exp(6i\phi_{j,m}) \right| \quad (2.21)$$

donde M_j representa el número de vecinos más cercanos (determinado con el método de árbol k -d) y $\phi_{j,m}$ es el ángulo entre el eje x y el vector que conecta el centro del j -ésimo micronadador con el m -ésimo vecino. Dado que el conjunto de micronadadores en este trabajo es finito, se impone la condición de calcular $\Psi_{6,j}^{[1]}$ solo sobre aquellos micronadadores donde se cumpla $M_j \geq 4$. Esta condición tiene la finalidad de evitar la ambigüedad en la caracterización de clústeres y cadenas; de lo contrario, automáticamente se asigna el valor $\Psi_{6,j}^{[1]} = 0$.

El parámetro de orden hexático global, $\langle \Psi_6 \rangle$, se obtiene promediando los valores locales $\Psi_{6,j}^{[1]}$ sobre todos los micronadadores y las iteraciones de la simulación, dado por

$$\langle \Psi_6 \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \Psi_{6,j}^{[1]} \right\rangle \quad (2.22)$$

Un valor $\langle \Psi_6 \rangle = 1$ corresponde a arreglos hexagonales perfectos, mientras que valores cercanos a cero indican estructuras aleatorias [28].

Diagrama de estados

Para caracterizar las distintas conformaciones del sistema, se construye un diagrama de estados en el tiempo máximo de corrida $t = 10\tau_r$. La clasificación de estados está basada en el trabajo de Telezki y Klumpp (2025) [15], donde se identifican los estados colectivos a partir de parámetros de orden relacionados con la formación de clústeres, polarización y formación de cadenas. En esta tesis, dicha clasificación se complementa con la inclusión del parámetro de orden hexático $\langle \Psi_6 \rangle$ y la fracción de micronadadores libres $\langle \phi_f \rangle$, con el propósito de obtener una caracterización más completa de los distintos estados.

Para una clasificación sistemática, se considera que el sistema se encuentra ordenado si el parámetro de orden correspondiente supera el valor 0.5. Esta elección define cinco criterios de orden binarios con $2^5 - 2^3 = 24$ estados posibles (considerando la exclusión parcial debido a la imposibilidad de estados con $\langle \phi_c \rangle > 0.5$ y $\langle \phi_f \rangle > 0.5$), de los cuales solo siete son observados en este trabajo. En la Tabla 2.1, se resumen los estados relevantes.

$\langle \phi_c \rangle > 0.5$	$\langle \phi_M \rangle > 0.5$	$\langle \phi_p \rangle > 0.5$	$\langle \phi_f \rangle > 0.5$	$\langle \Psi_6 \rangle > 0.5$	Estado
X	X	X	✓	X	Estado tipo gas desordenado
X	✓	X	✓	X	Estado tipo gas orientado
X	✓	X	X	X	Clúster disperso orientado
✓	✓	X	X	✓	Clúster denso orientado
X	✓	X	X	✓	Estado heterogéneo de clústeres densos orientados
X	✓	✓	X	✓	Estado heterogéneo de cadenas orientadas
X	X	✓	X	X	Estado tipo gas de cadenas

Tabla 2.1: Clasificación de estados observados según combinaciones de parámetros de orden.

El uso del término “estado” en lugar de “fase” se justifica puesto que el sistema estudiado consiste en un número finito de micronadadores sin condiciones de frontera periódica. Por tanto, no es posible definir fases en el sentido termodinámico estricto, tal como se hace en sistemas de equilibrio a partir de análisis energéticos. Un ejemplo de un estudio sobre clasificación de estados de clústeres dipolares activos finitos sin condiciones de frontera puede ser encontrado en Kaiser et al. (2016) [18]. Por otra parte, el término “heterogéneo” se usa de forma descriptiva para denotar la coexistencia de estructuras con distinto grado de orden (mayor cantidad de clústeres/cadenas orientadas).

Capítulo 3

Resultados y discusión

3.1. Caracterización de estados

3.1.1. Parámetros de orden

El parámetro de polarización $\langle \phi_M \rangle$ muestra independencia del espaciado inicial de rejilla d_0^* . En la Fig. 3.1(a) se presentan los resultados para dipolos débiles ($m^* = 1/\sqrt{10}$) y fuertes ($m^* = \sqrt{10}$) en función de la intensidad de campo externo reducida B^* . De forma general, $\langle \phi_M \rangle$ crece de forma monótona al incrementarse B^* y tiende a saturar en $\langle \phi_M \rangle$ cuando el acoplamiento entre campo y dipolos domina la dinámica del sistema. En particular, para dipolos fuertes, el sistema alcanza un valor de polarización notable aún con campos débiles ($\langle \phi_M \rangle \gtrsim 0.88$).

En la Fig. 3.1(b), se muestra esta tendencia de forma más clara, en función de la energía de acoplamiento magnético reducida m^*B^* . A pesar de tratarse de un sistema de componentes interactuantes y fuera del equilibrio, el ajuste a la función de Langevin $L(\alpha x) = \coth(\alpha x) - (\alpha x)^{-1}$ sugiere que las interacciones dipolares entre micronadadores tienen un efecto neto prácticamente despreciable sobre la orientación global del sistema en el régimen $m^*B^* \geq 1$. De esta forma, el grado de libertad angular se comporta como el de un sistema efectivo sin interacciones.

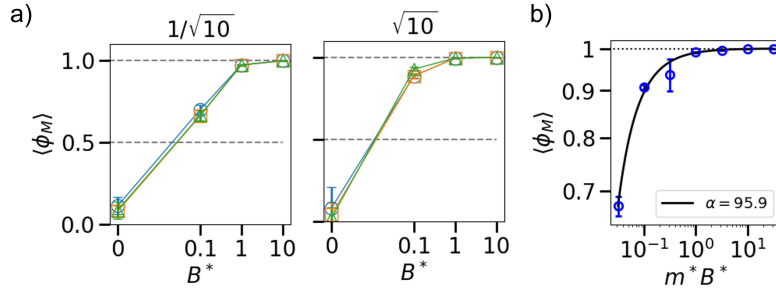


Figura 3.1: a) Parámetro de polarización $\langle \phi_M \rangle$ en función de la intensidad de campo magnético externo reducido B^* para diferentes valores de m^* (por columnas) y d_0^* (según la etiqueta correspondiente). b) $\langle \phi_M \rangle$ en función de m^*B^* . La curva sólida negra representa el ajuste a la función de Langevin $L(\alpha x) = \coth(\alpha x) - (\alpha x)^{-1}$.

En la Fig. 3.2(a), se observa que la formación de clústeres (criterio $\langle \phi_c \rangle > 0.5$) es completamente ausente para momentos dipolares débiles y moderados, y solo se exhibe bajo la presencia de un campo magnético externo cuando $d_0 \in \{1, 2\}$. Este comportamiento coincide con los resultados de Telezki y Klumpp (2025) [15] para sistemas de gran tamaño y baja densidad ($\Phi = 0.14$).

CAPÍTULO 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1. CARACTERIZACIÓN DE ESTADOS

bajo un campo débil ($B^* = 0.14$ en las unidades de este trabajo). Por otra parte, la fracción de micronadadores libres (criterio $\phi_f > 0.5$) disminuye drásticamente para dipolos fuertes incluso en la ausencia de campo externo.

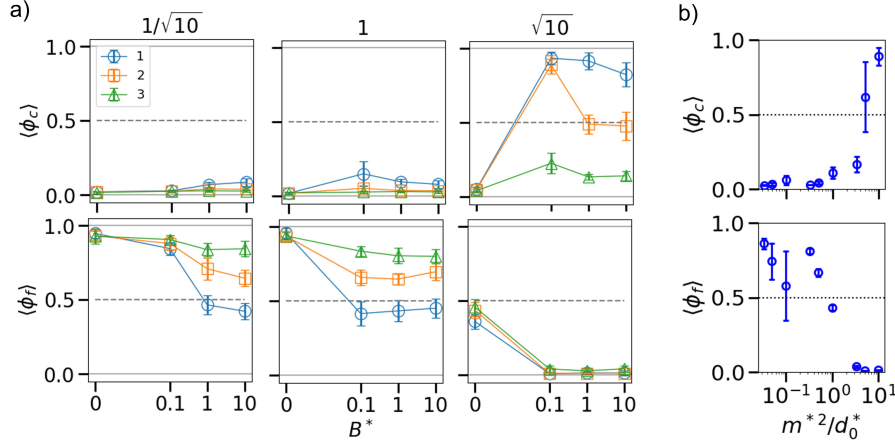


Figura 3.2: a) Parámetro de formación de clústeres $\langle \phi_c \rangle$ (fila superior) y de fracción de micronadadores libres $\langle \phi_f \rangle$ (fila inferior) en función de la intensidad de campo magnético externo reducido B^* para diferentes valores de m^* (por columnas) y d_0^* (según la etiqueta correspondiente). b) $\langle \phi_c \rangle$ (arriba) y $\langle \phi_f \rangle$ (abajo) en función de m^{*2}/d_0^* .

El pronunciado crecimiento de $\langle \phi_c \rangle$ y el decrecimiento de $\langle \phi_f \rangle$ en la Fig. 3.2(b) sugieren la existencia de un umbral en $m^{*2}/d_0^* = 1$, a partir del cual el sistema entra en comportamiento cualitativamente similar a una transición de estado fuertemente ligada a la interacción dipolar.

Para investigar la compactación interna de los agregados, se calcula el parámetro de orden hexático global $\langle \Psi_6 \rangle$ y local $\Psi_6^{[1]}$. Como se observa en la Fig. 3.3(a), el conjunto no alcanza un orden hexático significativo ($\langle \Psi_6 \rangle > 0.5$) para dipolos débiles y moderados. En conjunto con los valores de $\langle \phi_f \rangle$, estos resultados sugieren la aparición de clústeres pequeños y dispersos. Por otra parte, para dipolos fuertes, el conjunto exhibe un orden hexático significativamente mayor, alcanzando valores $\langle \Psi_6 \rangle \gtrsim 0.67$ con una dependencia de d_0^* menos relevante. El salto pronunciado a partir del umbral $m^{*2}/d_0^* = 1$ en la Fig. 3.3(b), muestra la relevancia de las interacciones dipolares para provocar que el sistema se agrupe en agregados densamente empaquetados.

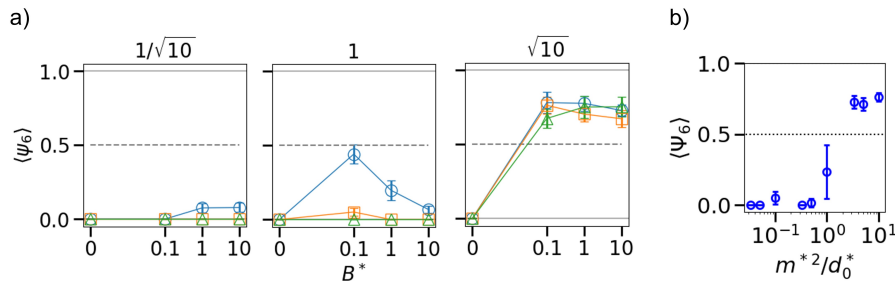


Figura 3.3: a) Parámetro de orden hexático global $\langle \Psi_6 \rangle$ en función de la intensidad de campo magnético externo reducido B^* para diferentes valores de m^* (por columnas) y d_0^* (según la etiqueta correspondiente). b) $\langle \Psi_6 \rangle$ en función de m^{*2}/d_0^* .

Finalmente, en la Fig. 3.4(a) se presenta el parámetro de formación de cadenas alineadas $\langle \phi_p \rangle$. En general, la formación de cadenas alineadas no domina el comportamiento del sistema en ningún

CAPÍTULO 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1. CARACTERIZACIÓN DE ESTADOS

caso explorado. No obstante, el criterio $\langle \phi_p \rangle > 0.5$ se alcanza para dipolos fuertes, bajo $B^* \geq 1$ y $d_0^* \in \{2, 3\}$. Este resultado pone de manifiesto el delicado equilibrio entre la intensidad de las interacciones entre micronadadores, su separación inicial y el campo aplicado. El salto abrupto a partir del umbral $m^{*2}/d_0 = 1$ en la Fig. 3.4(b) evidencia un comportamiento cualitativo similar a una transición de estado con formación de cadenas alineadas. No obstante, esta transición no es del todo clara, siendo que para un aumento del parámetro de control, $\langle \phi_p \rangle$ experimenta una disminución incluso hacia valores que están por debajo del umbral $\langle \phi_p \rangle < 0.5$, por lo que la formación de cadenas alineadas corresponde a un régimen transitorio. Una exploración más extensa del espacio de parámetros es necesario para verificar esta tendencia.

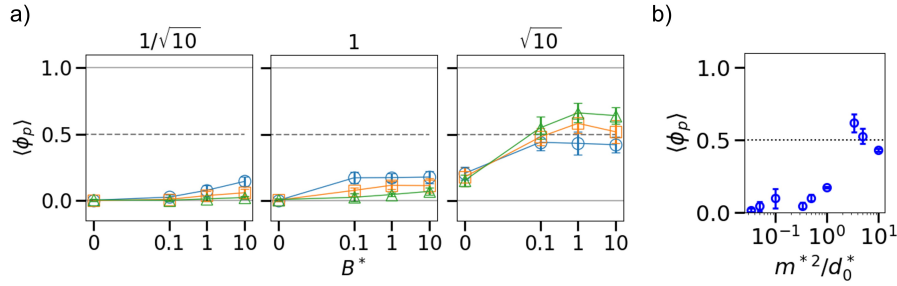


Figura 3.4: a) Parámetro de formación de cadenas alineadas $\langle \phi_p \rangle$ en función de la intensidad de campo magnético externo reducido B^* para diferentes valores de m^* (por columnas) y d_0^* (según la etiqueta correspondiente). b) $\langle \phi_p \rangle$ en función de m^{*2}/d_0^* .

3.1.2. Diagrama de estados

Para diferentes combinaciones de los parámetros B^* , m^* y d_0^* se identificaron siete estados distintos, mostrados en la Fig. 3.5. Dichos estados corresponden a: (a) un estado tipo gas desordenado, sin orden posicional ni angular; (b) un estado heterogéneo sin orden global, caracterizado por una mezcla de cadenas y micronadadores libres; (c) un estado tipo gas exclusivamente con orden orientacional; (d) un clúster con orden orientacional y mayor número de vecinos por micronadador, pero sin un orden hexático predominante; (e) un estado heterogéneo con predominancia de cadenas orientadas; (f) un estado heterogéneo con orden orientacional y predominancia de clústeres densos; (g) un clúster orientado con alta compactación ($\langle \Psi_6 \rangle > 0.6$). De los ocho estados caracterizados en [15] para un sistemas de un gran número de micronadadores (véase la Tabla 1.1), solamente cuatro estados análogos emergen en el sistema finito analizado en este trabajo: gas orientado, clúster orientado, cadenas orientadas y gas desordenado.

Con base en la clasificación sistemática del capítulo anterior, se construyó el diagrama de estados de la Fig. 3.6. Los ejes corresponden a las cantidades reducidas m^*B^* , asociada a la energía dipolar de acoplamiento con el campo magnético externo y m^{*2}/d_0^* , relacionada con la energía de interacción dipolar entre micronadadores.

En ausencia de campo magnético ($m^*B^* = 0$) e intensidades de interacción moderadas ($m^{*2}/d_0^* < 1$), los micronadadores del clúster adoptan un estado altamente disperso, la mayoría sin vecinos tal y como lo muestra el parámetro de orden $\langle \phi_f \rangle$ (Fig. 3.2). Para valores mayores en este régimen de interacciones, el sistema transita a un estado heterogéneo donde aproximadamente el 50 % de los micronadadores pertenece a alguna cadena sin orientación preferente, según los resultados del mismo parámetro de orden para $m^* = \sqrt{10}$.

En presencia de campo magnético, se obtuvieron regiones con estados más diversos. Para intensidades de interacción dipolar débiles y moderadas ($m^{*2}/d_0^* < 1$ y $m^*B^* \neq 0$), se sugiere la dominancia del estado tipo gas orientado (72 % de los puntos calculados). La fracción menor de puntos corresponde a la formación de clústeres dispersos orientados en $m^{*2}/d_0^* = 0.1, 1$. Esta diver-

CAPÍTULO 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1. CARACTERIZACIÓN DE ESTADOS

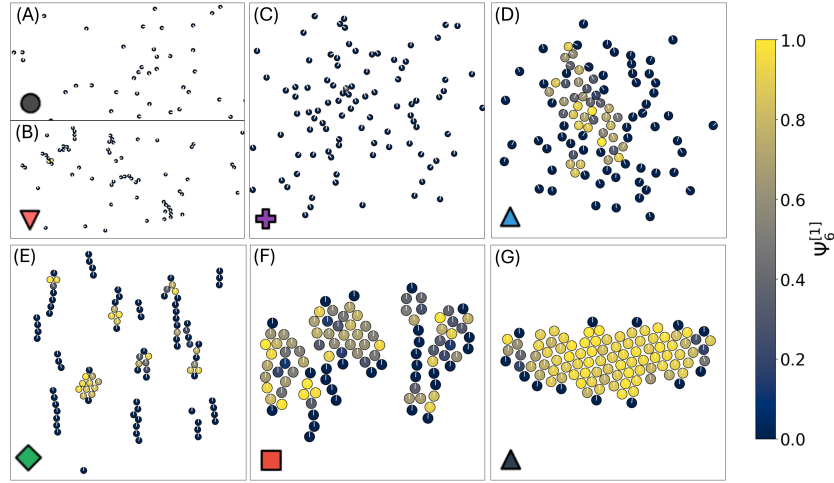


Figura 3.5: Estados colectivos identificados en los resultados para diferentes combinaciones de parámetros. La escala de valores representa el valor del parámetro de orden hexático local $\Psi_{6,j}^{[1]}$ para cada microneedador, mientras que la orientación se representa con una pequeña línea blanca. El pequeño marcador en la esquina inferior izquierda es el correspondiente al del diagrama de estados. En coordenadas (B^*, m^{*2}, d_0^*) : (A) Estado tipo gas desordenado (0, 0.1, 1); (B) Estado heterogéneo de cadenas desordenadas (0, 10, 1); (C) Estado tipo gas orientado (0.1, 1, 2); (D) Clúster disperso orientado (0.1, 1, 1); (E) Estado heterogéneo de cadenas orientadas (1, 10, 3); (F) Estado heterogéneo de clústeres densos orientados (10, 10, 2); (G) Clúster denso orientado (10, 10, 1).

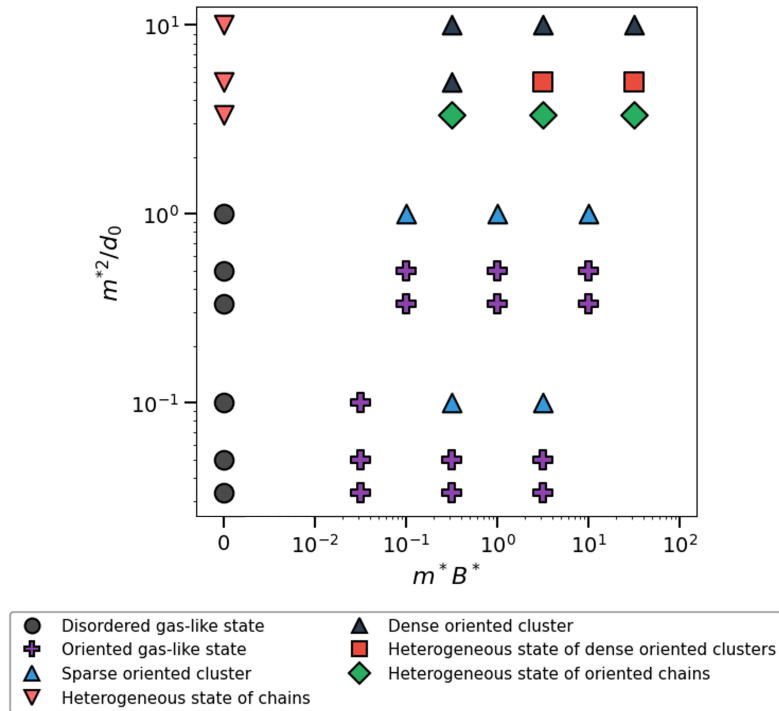


Figura 3.6: Diagrama de estados.

sidad muestra la competencia entre interacciones dipolares y la interacción con el campo externo que tiene como efecto la agregación de los micronadadores. En $m^{*2}/d_0^* \gtrsim 3$, se observa otra zona con tres estados: en $m^{*2}/d_0^* \approx 3$ encuentra la formación de cadenas orientadas en un estado heterogéneo. En este estado, aproximadamente 60 % de los micronadadores pertenece a alguna cadena orientada según los resultados del parámetro $\langle \phi_p \rangle$ (Fig. 3.4). Para $m^{*2}/d_0^* \approx 5$, se observa un comportamiento de tipo transición de clústeres orientados densos hacia un estado heterogéneo a mayor m^*B^* . Estos resultados sugieren que un acoplamiento con el campo externo más intenso ocasiona la escisión de los clústeres formados como evidencia el aumento considerable de la desviación estándar del penúltimo punto en la gráfica del parámetro $\langle \phi_c \rangle$ (Fig 3.2(a)). Finalmente, para el máximo valor del parámetro de interacción dipolar, el sistema muestra la predominancia de clústeres orientados densos.

Los clústeres orientados (dispersos y densos) destacan por su formación en este sistema, pero no en el de Telezki y Klumpp. Se intuye que el número finito de micronadadores y la no restricción del entorno, mediada por la interacción dipolar, favorece su agregación sin formar bandas largas como en el trabajo de Telezki.

Los resultados obtenidos confirman que la formación de agregados densamente empaquetados depende fuertemente de las interacciones dipolares entre micronadadores. Además, sugieren que para minimizar la agregación en conjuntos finitos es conveniente fijar momentos dipolares débiles o espaciados de rejilla suficientemente grandes. Se observa además que, al menos en esta rejilla de parámetros y escala temporal, no se mantiene el ordenamiento original que corresponde al estado cristalino metaestable. Se intuye que un estudio de este tipo depende del control de las interacciones brownianas a través de las propiedades del solvente.

3.2. Factor de estructura estático

Para comparar los diversos ordenamientos espaciales del sistema, se obtuvo el factor de estructura estático S a partir de las posiciones $\mathbf{r}_i$, promediado sobre una rejilla de vectores de onda $\mathbf{q}$ con distintas orientaciones θ . En la Fig. 3.7(a) se presenta la evolución temporal de $S(q\sigma)$ para dipolos débiles ($m^* = 1/\sqrt{10}$, fila superior) y fuertes ($m^* = \sqrt{10}$, fila inferior) con $d_0 = \sigma$ y $B^* = 10$, que concluyen en la formación de clústeres dispersos y densos, respectivamente. Los recuadros insertos muestran instantáneas del sistema en los tiempos correspondientes al título de cada gráfica. En ambos casos, el pico principal se localiza alrededor de $q\sigma = 6$, que coincide con la distancia promedio entre partículas $2\pi/q \approx \sigma$. El segundo pico, relacionado con la emergencia de orden cristalino o hexático, aparece más localizado alrededor de $q\sigma = 12$ para dipolos fuertes y sobre el intervalo $q\sigma \in [12, 15]$, en el caso de dipolos débiles. En el caso de interacciones dipolares débiles, los picos tienden a mostrar mayor asimetría, característica de un ordenamiento no establecido completamente. Conforme avanza el tiempo, estos tienden a ensancharse y disminuir en altura hasta que en el tiempo máximo de simulación ($t/\tau_r = 10$) las correlaciones espaciales prácticamente se desvanecen. En contraste, para dipolos fuertes, aunque los picos pierden altura con el tiempo, el orden colectivo perdura hasta los tiempos máximos de corrida. La ubicación y forma de los picos de los factores de estructura en sistemas con interacciones dipolares fuertes recuerdan a las obtenidas por De Macedo et al. (2018) [17] y Dulaney et al. (2021) [31] para partículas brownianas activas con interacciones de volumen excluido.

En la Fig. 3.7(b) se muestra un detalle del pico principal del factor de estructura estático para distintos tiempos característicos en unidades de τ_r e intensidades de campo magnético B^* , según la etiqueta correspondiente con $d_0^* = 1$ y $m^* = \sqrt{10}$. Entre los tiempos $t = 0.1\tau_r$ y $t = 10\tau_r$, se observa una inversión de la dependencia de S respecto al campo magnético. En particular, en torno a $t = \tau_r$, se presenta una dependencia no monótona respecto a B^* . Este comportamiento es análogo al reportado en [17] respecto a la comparación de la intensidad de atracción Γ en sistemas de partículas brownianas esféricas con interacción de potencial de tipo pozo cuadrado, y de la velocidad de autopropulsión v_0 en micronadadores apolares, ambos en regímenes de altas

CAPÍTULO 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.2. FACTOR DE ESTRUCTURA ESTÁTICO

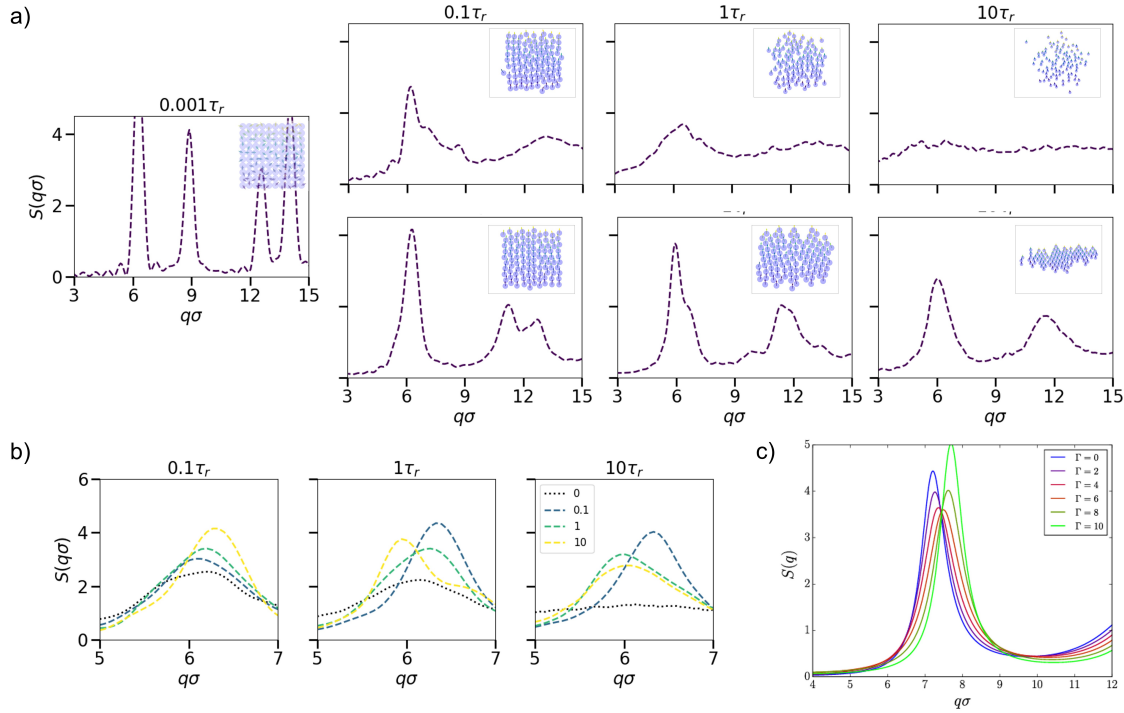


Figura 3.7: a) Evolución temporal del factor de estructura estático en distintos tiempos característicos t/τ_r para $m^* = 1/\sqrt{10}$ (fila superior) y $m^* = \sqrt{10}$ (fila inferior) con $B^* = 10$ y $d_0 = \sigma$. Los recuadros insertos son instantáneas del sistema en una corrida del modelo. b) Detalle de la evolución temporal del pico principal para diferentes intensidades de campo magnético externo (según se indica en la etiqueta) con $m^* = \sqrt{10}$ y $d_0^* = 1$. c) Factor de estructura estático $S(q)$ de un sistema 3D de pozo cuadrado con atracción de corto alcance (rango 0.1σ), como función de la intensidad de la atracción $\Gamma \in [0, 10]$ (de azul a verde), con alta densidad ($\phi = 0.55$). Tomado de [17].

fracciones de empaquetamiento $\phi \approx 0.6$ (Fig. 3.7(c)). Un posible mapeo inverso entre la intensidad de atracción Γ y de campo magnético B^* sugiere que, en esta escala de tiempo, el campo magnético actúa como una repulsión efectiva entre los micronadadores, favoreciendo el desorden colectivo.

En la Fig. 3.8(a) se muestran los factores de estructura estáticos en el tiempo $t/\tau_r = 10$ para los distintos estados de la Fig. 3.5. En particular, las correlaciones de los estados (a) (tipo gas desordenado) y (c) (tipo gas orientado) se extinguen casi por completo, como era de esperarse en sistemas con nulo ordenamiento espacial.

Para los valores de parámetros considerados, los resultados sugieren además una independencia respecto a la intensidad de campo magnético externo B^* , siempre que las interacciones dipolares no sean dominantes. Para ilustrar esta tendencia se muestra la Fig. 3.8(b), donde se comparan los factores de estructura para diferentes valores de campo magnético con $d_0 = \sigma$ (izquierda), $d_0 = 3\sigma$ (derecha) y $m^* = \sqrt{10}$. Se observa que la altura, forma y localización de los picos depende notablemente del campo magnético cuando d_0 es mínimo; no obstante, la dependencia se vuelve prácticamente irrelevante para d_0 mayor.

En la Fig. 3.8(c) se muestra la relación de la altura del pico principal del factor de estructura S_{peak} y los parámetros del sistema m^{*2}/d_0^* . Los puntos de mayor desviación corresponden a configuraciones en que la influencia del campo comienza a manifestarse de forma más notable, aunque se requiere explorar un rango más amplio de valores para confirmar esta tendencia.

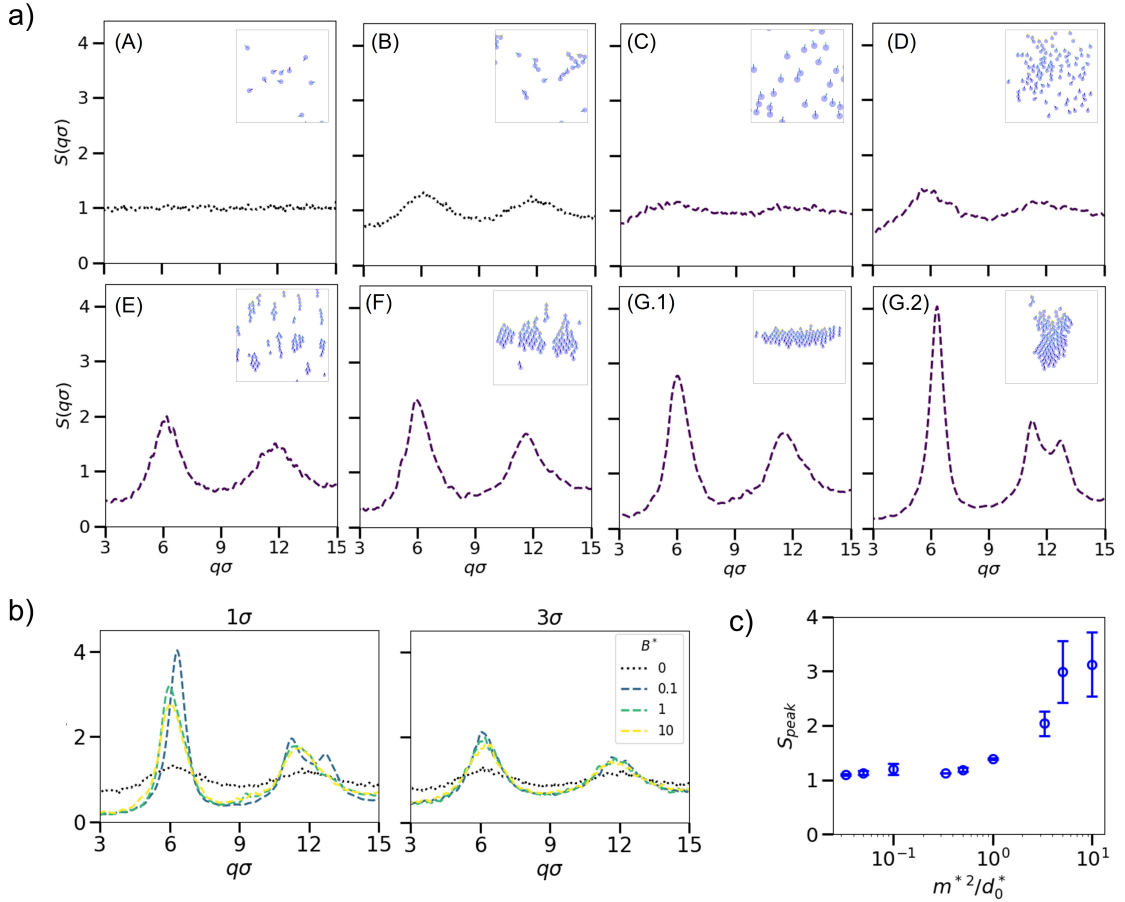


Figura 3.8: a) Factor de estructura estático en $t/\tau_r = 10$, para los diferentes estados mostrados en la Fig. 3.5. Los recuadros insertos son instantáneas del sistema. b) Factor de estructura para distintas intensidades de campo magnético B^* (según la etiqueta correspondiente) con $d_0 \in \{\sigma, 3\sigma\}$ y $m^* = \sqrt{10}$. c) Altura del pico principal S_{peak} en función de m^{*2}/d_0^* .

3.3. Propiedades dinámicas

3.3.1. Desplazamiento típico

Para cuantificar el desplazamiento neto del conjunto de micronadadores en dirección paralela al campo externo se calcula el desplazamiento típico $\sqrt{W_{t,P}}$. Puesto que los resultados son prácticamente independientes con respecto al parámetro d_0 , en la Fig. 3.9(a) se representa $\sqrt{W_{t,P}}$ adimensionalizada sobre la longitud de persistencia $l_p = v_0\tau_r$, en función de la intensidad de acoplamiento m^*B^* . Se observa que incrementos en esta magnitud conducen a un mayor desplazamiento, el cual satura alrededor de $2.1l_p$ para $m^*B^* \geq 1$.

Por otra parte, en la Fig. 3.9(b), se muestra $\sqrt{W_{t,P}}/l_p$ en función de B^* para los tres valores de m^* . Para $B = 0$, todos los casos se aproximan a l_p , como es de esperarse: en ausencia de una dirección preferente, los micronadadores recorren en promedio una longitud de persistencia antes de aleatorizar su trayectoria. En presencia de campo externo, únicamente los dipolos débiles muestran un desplazamiento menor a los otros dos casos. Los resultados son coherentes con la saturación del parámetro de polarización $\langle\phi_M\rangle$ (Fig. 3.1), cuyo origen radica en la menor supresión del movimiento rotacional. Como consecuencia, las trayectorias de los micronadadores son más

rectas en conjunto (Fig. 3.9(c)), propias de estados con $m^*B^* \geq 1$.

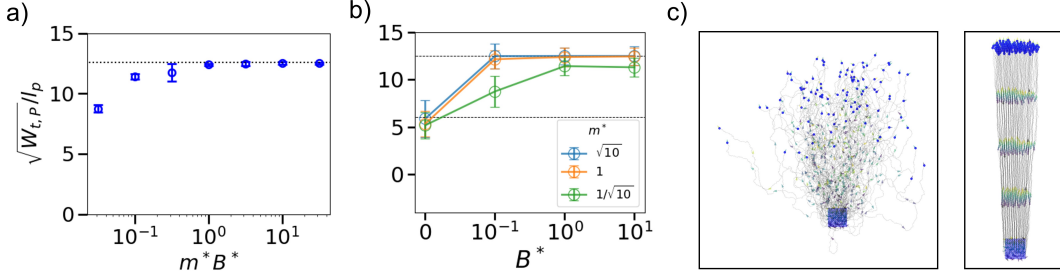


Figura 3.9: Desplazamiento típico $\sqrt{W_{t,P}}$ (en unidades de l_p) en función de: a) la intensidad de acoplamiento m^*B^* y b) la intensidad de campo externo B^* para $m^* \in \{1/\sqrt{10}, 1, \sqrt{10}\}$. c) Trayectorias del sistema para $m^*B^* \approx 3.2 \times 10^{-2}$ y $m^*B^* \approx 31.6$, ambas con $d_0^* = 1$.

3.3.2. Distribuciones angulares

Para explorar la supresión del movimiento rotacional y la independencia de d_0^* con mayor detalle, en la Fig. 3.10(a) se calculan las distribuciones angulares $P(\phi, t/\tau_r = 10)$ de los micronadadores para $m^* = \sqrt{10}$ en el tiempo máximo de corrida para distintos d_0^* . Las barras representan histogramas obtenidos a partir de las soluciones numéricas de las ecuaciones, mientras que las curvas negras representan los ajustes de los histogramas a funciones normales $\mathcal{N}(\langle\phi\rangle = \pi/2, \sigma_\phi)$.

Las distribuciones para los tres valores de B^* tienden a ensancharse a menor d_0^* , con efecto más notable para campos débiles, donde el ajuste normal es menos exacto (véase el recuadro pequeño del caso $d_0 = 1\sigma$). Esta observación se refuerza mediante el análisis de la desviación estándar σ_ϕ de los histogramas en la Fig. 3.10(b), donde se evidencia una disminución monótona frente a m^{*2} y B^* , junto con una independencia del espaciado de rejilla inicial d_0 (desviaciones casi nulas). La mayor desviación respecto a este comportamiento se observa en las combinaciones de intensidad de dipolo débil e intensidad de dipolo magnético fuerte ($m^*B^* \approx 3 \times 10^{-1}$), donde el parámetro d_0^* tiene una mayor relevancia. El ajuste lineal de los datos revela una ley de potencias $\sigma_\phi \sim (m^*B^*)^{-0.52}$.

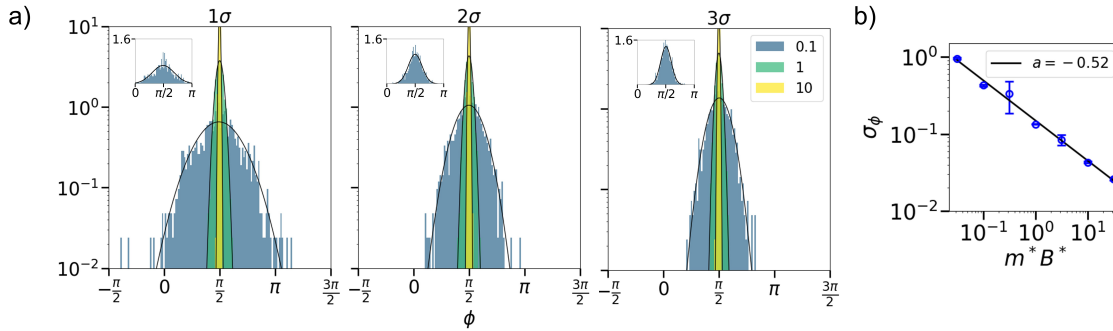


Figura 3.10: a) Distribuciones angulares $P(\phi, t/\tau_r = 10)$ con $m^* = \sqrt{10}$ y $B^* \in \{0.1, 1, 10\}$ (según la leyenda), para los espaciados iniciales de rejilla $d_0 \in \{1, 2, 3\}\sigma$. Las barras muestran los histogramas obtenidos, mientras que las curvas negras representan su ajuste a una curva normal. En los insertos se muestra en detalle la distribución de $B^* = 0.1$ sin escala logarítmica. b) Ajuste lineal de la desviación estándar angular σ_ϕ contra m^*B^* . Se indica el coeficiente característico $a = -0.52$.

3.3.3. Desplazamiento cuadrático medio

Traslacional

En la Fig. 3.11(a) se muestran los desplazamientos cuadráticos medios, adimensionalizados con l_p^2 , correspondientes a distintos estados del sistema. Dentro de la ventana de tiempos analizada, únicamente el estado A (tipo gas desordenado) sigue el comportamiento teórico derivado de la ecuación de Smoluchowski (etiqueta *Theory* ($B = 0$)), lo que sugiere que, en esta escala de tiempos, las interacciones dipolares y de volumen excluido son despreciables. A tiempos cortos, el resto de estados presentan desviaciones respecto a este comportamiento (véase el cuadro inserto). En contraste, a tiempos largos, estados más energéticos como C (clúster disperso orientado) y G (clúster denso orientado), exhiben un comportamiento típico del régimen de movimiento balístico ($\alpha = 2$).

Para explorar las transiciones entre regímenes de movimiento, en la Fig. 3.11(b), se presentan los exponentes de difusión α para cada uno de los distintos estados caracterizados. El estado A presenta valores en el intervalo $1 < \alpha < 2$, ajustándose al comportamiento teórico de sistemas activos con interacciones de volumen excluido y sin campo externo (véase la Fig. 1.11). Por otra parte, el estado B (tipo gas de cadenas) presenta un incremento del exponente a tiempos cortos ($t^* < 10^{-1}$), seguido de una disminución hacia $\alpha \approx 1.5$. Los demás estados muestran una transición monótona hacia el régimen balístico ($\alpha = 2$), lo cual muestra la fuerte influencia del campo externo que promueve un movimiento dirigido.

Finalmente, en la Fig. 3.11(c) se muestra el coeficiente de difusión efectivo $D_{t,eff}^*$ evaluado a tiempos máximos en función del parámetro m^*B^* . Los resultados sugieren una saturación en el intervalo $m^*B^* \geq 1$. Este comportamiento concuerda con los resultados del desplazamiento típico, que también presenta saturación en el mismo intervalo de valores. De manera notable, los resultados parecen ajustarse adecuadamente a la función de Langevin de la forma $D_{t,eff}^{*,max} L(ax)$, donde $D_{t,eff}^{*,max}$ denota el coeficiente de difusión efectivo para el valor máximo de m^*B^* .

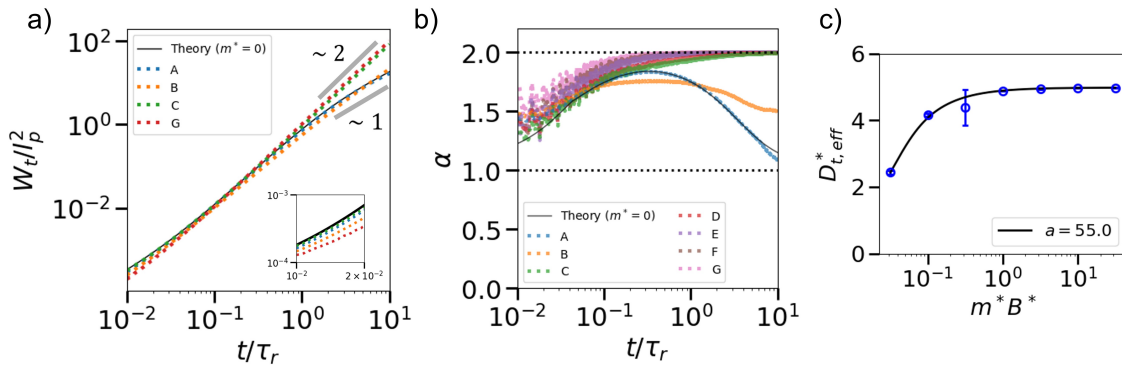


Figura 3.11: a) Desplazamiento traslacional cuadrático medio W_t/l_p^2 de distintos estados (según la etiqueta correspondiente). El resultado teórico para un sistema sin interacciones (etiquetado como *Theory* ($B = 0$)) se representa con una curva sólida negra. Se indican los exponentes característicos $\alpha \in 1, 2$. b) Exponente de difusión traslacional α de los distintos estados del sistema en función del tiempo. Las líneas horizontales son guías visuales de los regímenes de movimiento difusivo ($\alpha = 1$) y balístico ($\alpha = 2$). c) Coeficiente de difusión traslacional efectivo $D_{t,eff}^*$ a tiempos máximos. La curva sólida negra representa el ajuste a la función de Langevin de la forma $D_{t,eff}^{*,max} L(ax)$, donde $D_{t,eff}^{*,max}$ denota el coeficiente de difusión efectivo para el valor máximo de m^*B^* .

Rotacional

En la Fig. 3.12(a), se muestran los desplazamientos rotacionales cuadráticos medios, para distintos estados del sistema. De igual forma que el caso traslacional, la curva del MSD del estado A concuerda con la expresión teórica del sistema sin interacciones, confirmando la predominancia de la difusión térmica frente a las interacciones entre micronadadores, saturando en el límite geométrico $W_r = 2$, que indica la aleatorización de todas las orientaciones del conjunto. Por otra parte, el estado B exhibe una desviación más notoria respecto al sistema sin interacciones, caracterizada por un mayor desplazamiento en tiempos menores al tiempo de reorientación ($t^* < 1$) que se atribuye a las interacciones dipolares que producen una rápida formación de cadenas en el sistema. Estados de clústeres dispersos y densos (C y G, respectivamente), muestran saturación alrededor de valores de W_r menores en órdenes de magnitud respecto al estado A sobre la misma envolvente. Este comportamiento es típico de sistemas no ergódicos cuya difusión rotacional queda arrestada en cierto arco de la circunferencia de orientaciones posibles.

En la Fig. 3.12(b) se presentan los exponentes de difusión rotacional correspondientes a todos los estados caracterizados. De forma unánime exhiben un decaimiento generalizado a cero. Este resultado tiene una doble interpretación dependiendo del valor de *plateau* de W_r : 1) Si $W_r \rightarrow 2$, el sistema alcanza un estado isótropo en el orden orientacional. 2) Si $W_r < 2$, el sistema experimenta arresto rotacional y los micronadadores tienen alguna dirección preferida en promedio. El estado A muestra un decaimiento monótono acorde a la solución teórica del sistema infinitamente diluido sin interacciones, como era de esperarse. A excepción el estado heterogéneo de cadenas (B), el estado heterogéneo de clústeres densos orientados (F) y el clúster denso orientado (G), los resultados de todos los estados siguen un decaimiento cada vez a tiempos menores. El estado tipo gas de cadenas (B) destaca por el régimen de movimiento superdifusivo que presenta a tiempos $t^* < 10^{-1}$, y el decaimiento irregular. En el mismo intervalo de tiempos cortos, los estados F y G presentan un valor de α pequeño ($\alpha < 0.1$) que finalmente decae a cero.

El coeficiente de difusión rotacional a tiempos máximos, representado en la Fig. 3.12(c), muestra una fuerte correlación lineal (pendiente $a = -0.98$) del parámetro m^*B^* , que se atribuye a una dinámica dominada por la interacción con el campo externo. La supresión del movimiento rotacional es clara, cayendo hasta tres órdenes de magnitud para el máximo valor del parámetro de acoplamiento ($m^*B \approx 31.6$).

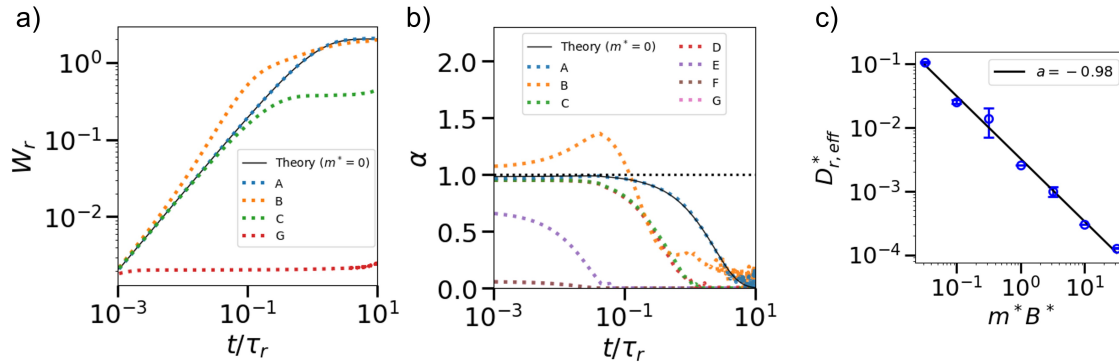


Figura 3.12: a) Desplazamiento rotacional cuadrático medio W_r de distintos estados (según la etiqueta correspondiente). El resultado teórico para un sistema sin interacciones (etiquetado como *Theory* ($B = 0$)) se representa con una curva sólida negra. b) Exponente de difusión rotacional α de los distintos estados del sistema en función del tiempo. La línea horizontal es una guía visual del régimen de movimiento difusivo ($\alpha = 1$). c) Coeficiente de difusión rotacional efectivo $D_{r,eff}^*$ a tiempos máximos. La curva sólida negra representa el ajuste lineal.

3.3.4. Coeficiente de difusión rotacional y tiempos de respuesta

Para analizar la difusión rotacional y los tiempos de respuesta τ_{res} del sistema, se presenta la evolución temporal del coeficiente de difusión efectivo rotacional $D_{r,eff}$. En la Fig. 3.13(a) se muestran los coeficientes de difusión rotacional efectivos y adimensionalizados $D_{r,eff}^*$ respecto a unidades de $D_r^{(0)}$, para distintos estados del sistema. En ausencia de campo externo, el estado a (tipo gas desordenado), sigue el comportamiento típico, sin modificaciones en el coeficiente de difusión. Por otra parte, el estado heterogéneo de cadenas presenta una gran diferencia, con un régimen superdifusivo ($D_{r,eff}^* > 0$) en tiempos menores al tiempo de reorientación $t = \tau_r$, seguido de un decaimiento posterior hasta los tiempos máximos. Para los estados en presencia del campo externo, se presentan decaimientos a partir de escalas de tiempo diferentes, relacionados con la supresión de la dinámica rotacional inducida por el campo magnético externo. Es notable la superposición de las curvas de los estados C y D (tipo gas orientado y clúster disperso orientado, respectivamente), así como de F y G (estado heterogéneo de clústeres densos orientados y clúster denso orientado). Los tiempos donde la difusión rotacional comienza a ser suprimida (llamados tiempo de respuesta τ_{res}) muestran una dependencia no lineal del acoplamiento magnético $m^* B^*$, según se muestra en la Fig. 3.13(b).

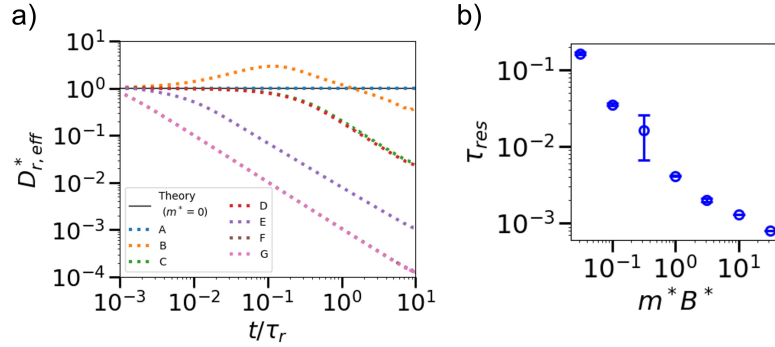


Figura 3.13: a) Coeficiente de difusión rotacional de distintos estados (según la etiqueta correspondiente). El resultado teórico para un sistema sin interacciones (etiquetado como *Theory* ($m^* = 0$)) se representa con una curva negra sólida. b) Tiempos de respuesta τ_{res} del sistema en función de $m^* B^*$.

Conclusiones

A partir de los resultados obtenidos, se pueden establecer las siguientes conclusiones:

1. Mientras que el parámetro m^*B^* no presentó un umbral bien definido, sino transiciones a otros estados para valores específicos de la interacción dipolar, sí se identificó un umbral para las interacciones en $m^{*2}/d_0^* = 1$. Para valores mayores, el sistema exhibe estados con mayor orden estructural, pasando de estados tipo gas/clústeres dispersos a la formación de estados heterogéneos con predominancia de clústeres densos o cadenas orientadas, e incluso un estado que consiste en un único clúster denso orientado. Este último estado es particularmente relevante puesto que, a pesar de ser caracterizado en el estudio previo de [15], no emerge en sistemas de gran tamaño. Esto sugiere que la aplicación de campo externo sobre sistemas finitos, así como la configuración cristalina inicial con espaciado mínimo, influye en su aparición, en línea con lo observado en clústers formados en sistemas a bajas densidades [26].
2. La evolución temporal del factor de estructura evidencia que la relajación estructural se presenta incluso en presencia de campo externo, siempre que las interacciones dipolares sean lo suficientemente débiles. Asimismo, se observa una inversión de su dependencia respecto a la intensidad del campo externo a lo largo del tiempo. Por otra parte, la altura del pico principal, asociado a correlaciones de corto alcance, muestra una dependencia clara de la intensidad de las interacciones dipolares. De esta manera, se demuestra que el factor de estructura estático permite una caracterización adecuada incluso en sistemas finitos sin confinamiento.
3. El análisis de los desplazamientos cuadráticos medios y sus exponentes de difusión revelan un régimen de movimiento traslacional superdifusivo dentro de la ventana de tiempos estudiada para todos los estados bajo campo externo, independientemente de su morfología específica. En el caso rotacional, únicamente la formación de cadenas exhibe un régimen superdifusivo, mientras que el resto tiende a subdifusión debido a la supresión de la dinámica mediada por el campo externo. El efecto se refleja en el desplazamiento efectivo de las partículas, que aumenta con la intensidad de acoplamiento con el campo hasta alcanzar un valor de saturación a partir del umbral $m^*B^* \geq 1$.

Dos observaciones pueden motivar investigación posterior: (1) La marcada diferencia del factor de estructura estática entre estados de clústeres densos (diferenciados en la Fig. 3.8(a) como G.1 y G.2). Aunque ambos corresponden al mismo estado, el segundo muestra un pico principal más agudo y pronunciado, así como un segundo pico asimétrico. Esta asimetría se ha reportado en sistemas activos únicamente en ausencia de campo externo en densidades cercanas a la región de MIPS [17, 31]. (2) La razón por la que propiedades dinámicas como el coeficiente de difusión traslacional y el parámetro de polarización se ajustan de forma notable a la función de Langevin. Se sospecha que el ajuste podría deberse a una equivalencia entre la dinámica de un sistema activo dipolar orientado, en el marco de referencia del centro de masa, y la de un sistema pasivo.

En conjunto, los resultados muestran la relación entre la autoorganización colectiva del modelo computacional de un sistema finito de micronadadores dipolares y su dinámica traslacional y rotacional, bajo la influencia de un campo magnético externo homogéneo.

Apéndice A

Cálculos suplementarios

A.1. Fuerzas y torcas

Interacción partícula-campo externo

Se considera un campo magnético externo $\mathbf{B}^{\text{ext}}$ constante con dirección paralela al eje y :

$$\mathbf{B}^{\text{ext}} = B\hat{\mathbf{y}} \quad (\text{A.1})$$

La energía potencial de un dipolo con momento dipolar $\mathbf{m}_i$ inmerso en este campo simplemente es

$$U_i^{\text{ext}} = -\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{B}^{\text{ext}} = -m_i B \cos \theta_i \quad (\text{A.2})$$

donde θ_i es el ángulo formado por los vectores $\mathbf{m}_i$ y $\hat{\mathbf{y}}$. Puesto que U^{ext} no depende de la posición del dipolo, no hay una fuerza producida sobre el dipolo debido al campo externo

$$\mathbf{F}_i^{\text{ext}} = -\nabla_i U^{\text{ext}} = \mathbf{0} \quad (\text{A.3})$$

donde ∇_i es el gradiente con respecto a $\mathbf{r}_i$. No obstante, sí existe una torca producida debido al campo externo y puede ser obtenida mediante

$$\boldsymbol{\tau}_i^{\text{ext}} = \mathbf{m}_i \times \mathbf{B}^{\text{ext}} = m_i B \sin \theta_i \hat{\mathbf{z}} \quad (\text{A.4})$$

Puesto que la dispersión de micronadadores es monodispersa, todos tienen el mismo momento dipolar y la expresión se reduce a

$$\boldsymbol{\tau}_i^{\text{ext}} = mB \cos \phi_i \hat{\mathbf{z}} \quad (\text{A.5})$$

usando que ϕ_i es el ángulo complementario de θ_i .

Interacciones micronadador-micronadador

El potencial de interacción entre dos dipolos puntuales puede ser considerado como una expresión exacta para el caso de dos esferas magnetizadas de forma uniforme según los resultados de Edwards et al. (2017) [36]. Por tanto, se usa un potencial dipolo-dipolo y esfera dura (DD-HS) para modelar las interacciones entre partículas. El campo de intensidad magnética $\mathbf{B}_i$ producido en la posición $\mathbf{r}_j$ por un dipolo puntual $\mathbf{m}_i$ en la posición $\mathbf{r}_i$ es

$$\mathbf{B}_i(\mathbf{r}_j) = \frac{\mu}{4\pi} \left(\frac{3\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^5} \mathbf{r}_{ij} - \frac{\mathbf{m}_i}{r_{ij}^3} \right) \quad (\text{A.6})$$

APÉNDICE A. CÁLCULOS SUPLEMENTARIOS

A.1. FUERZAS Y TORCAS

donde μ es la permeabilidad magnética del medio y $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ es una distancia relativa. La energía de interacción U_{ij} entre un dipolo puntual $\mathbf{m}_j$ en la posición $\mathbf{r}_j$ está dada por

$$U_{ij} = -\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{B}_i(\mathbf{r}_j) \quad (\text{A.7})$$

Insertando la Ec. A.6 en esta expresión, se obtiene

$$U_{ij} = \frac{\mu}{4\pi} \left[\frac{\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] \quad (\text{A.8})$$

Por otro lado, la fuerza de $\mathbf{m}_j$ sobre $\mathbf{m}_i$ se obtiene de

$$\mathbf{F}_{ij} = -\nabla_i U_{ij} \quad (\text{A.9})$$

Haciendo uso de la Ec. A.8, se obtiene

$$\mathbf{F}_{ij} = -\frac{3\mu}{4\pi r_{ij}^5} \left[(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})\mathbf{m}_j + (\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})\mathbf{m}_i + (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j)\mathbf{r}_{ij} - 5 \frac{(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \mathbf{r}_{ij} \right] \quad (\text{A.10})$$

Los primeros términos en los corchetes son paralelos a $\mathbf{m}_j$ y $\mathbf{m}_i$, respectivamente. Por lo tanto, $\mathbf{F}_{ij}$ no es una fuerza central -es decir, no es paralela a $\mathbf{r}_{ij}$, en general-. Debido a la simetría entre i y j , las Ecs. A.8 y A.10 implican que

$$U_{12} = U_{21} \quad (\text{A.11})$$

y

$$\mathbf{F}_{12} = -\mathbf{F}_{21} \quad (\text{A.12})$$

demostrando que se cumple la tercera ley de Newton para las fuerzas entre dipolos. Esto demuestra que se conserva el momento lineal en un sistema aislado de dos dipolos.

Ahora examinemos la torca $\boldsymbol{\tau}_{ij}$ que el dipolo $\mathbf{m}_j$ produce sobre $\mathbf{m}_i$. Esta torca es la suma de dos contribuciones

$$\boldsymbol{\tau}_{ij} = \boldsymbol{\tau}_{ij}^A + \boldsymbol{\tau}_{ij}^B \quad (\text{A.13})$$

La primera viene de $\mathbf{m}_i$ estando inmerso en el campo magnético de $\mathbf{m}_j$, y está dada por

$$\boldsymbol{\tau}_{ij}^A = \mathbf{m}_i \times \mathbf{B}_j(\mathbf{r}_i) \quad (\text{A.14})$$

Usando la Ec. A.6, se tiene

$$\boldsymbol{\tau}_{ij}^A = \frac{\mu}{4\pi} \left[\frac{3(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{m}_i \times \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} - \frac{\mathbf{m}_i \times \mathbf{m}_j}{r_{ij}^3} \right] \quad (\text{A.15})$$

La suma de estas contribuciones emparejadas es, en general, diferente de cero

$$\boldsymbol{\tau}_{12}^A + \boldsymbol{\tau}_{21}^A = \frac{3\mu}{4\pi r_{12}^5} [(\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{r}_{12})(\mathbf{m}_2 \times \mathbf{r}_{12}) + (\mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{r}_{12})(\mathbf{m}_1 \times \mathbf{r}_{12})] \quad (\text{A.16})$$

Por tanto, a diferencia de las fuerzas emparejadas $\mathbf{F}_{12}$ y $\mathbf{F}_{21}$, estas torcas emparejadas no son iguales y opuestas, en general. La segunda contribución en la Ec. A.13 surge de la fuerza que ejerce el dipolo $\mathbf{m}_j$ sobre $\mathbf{m}_i$:

$$\boldsymbol{\tau}_{ij}^B = \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_{ij} \quad (\text{A.17})$$

Usando la Ec. A.10, se obtiene

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}_{ij}^B = \frac{3\mu}{4\pi r_{ij}^5} \left[5 \frac{(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} (\mathbf{r}_i \times \mathbf{r}_j) \right. \\ \left. - (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{r}_i \times \mathbf{m}_j) - (\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{r}_j \times \mathbf{m}_i) - (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j)(\mathbf{r}_i \times \mathbf{r}_j) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

APÉNDICE A. CÁLCULOS SUPLEMENTARIOS

A.2. ECUACIÓN DE SMOLUCHOWSKI

Dado que $\mathbf{F}_{ij}$ no es central, la suma de torcas emparejadas

$$\boldsymbol{\tau}_{12}^B + \boldsymbol{\tau}_{21}^B = \mathbf{r}_{12} \times \mathbf{F}_{21} \quad (\text{A.19})$$

tampoco es igual a cero de forma general. No obstante, usando las Ecs. A.16 y A.19 y algo de álgebra vectorial, la torca neta se desvanece idénticamente

$$\boldsymbol{\tau}_{12}^A + \boldsymbol{\tau}_{21}^A + \boldsymbol{\tau}_{12}^B + \boldsymbol{\tau}_{21}^B = \mathbf{0} \quad (\text{A.20})$$

De esta forma, la torca aportada por $\boldsymbol{\tau}_{12}^A$ y $\boldsymbol{\tau}_{21}^A$ se cancela con la torca aportada por $\boldsymbol{\tau}_{12}^B$ y $\boldsymbol{\tau}_{21}^B$ y el momento angular se conserva. Así, un sistema aislado conformado por dos dipolos no rota espontáneamente.

A.2. Ecuación de Smoluchowski

Una forma alternativa de describir la dinámica de los micronadadores es mediante el formalismo de Smoluchowski [37]. La base de este formalismo es la ecuación de movimiento para la función de densidad de probabilidad del sistema (*pdf*, por sus siglas en inglés), en lugar de las ecuaciones de movimiento de las coordenadas de posición y orientación del sistema. Esta sección se centra en la pdf de un solo cuerpo $p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)$, que describe la probabilidad de encontrar un micronadador en el microestado $(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}})$ en el instante t . La pdf debe satisfacer la condición de normalización

$$\int_{\mathbb{R}^2} d\mathbf{r} \int_{\mathbb{S}^1} d\hat{\mathbf{u}} p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) = 1 \quad (\text{A.21})$$

en cualquier instante. Se tiene que $d\mathbf{r} = dx dy$, $\mathbb{R}^2$ indica que se integra sobre todo el plano cartesiano, $d\hat{\mathbf{u}} = d\phi$ y $\mathbb{S}^1$ indica que se integra sobre todos los puntos de una circunferencia unitaria, por lo que $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{S}^1$ es el espacio de configuraciones del sistema. La ecuación de movimiento para una pdf como la del problema que se analiza tiene la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) = \hat{\mathcal{L}} p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \quad (\text{A.22})$$

donde $\hat{\mathcal{L}}$ es el operador de evolución temporal, que es un operador diferencial sobre las variables $\mathbf{r}$ y $\hat{\mathbf{u}}$. Distintas condiciones iniciales pueden ser fijadas: por ejemplo, si se asume que la partícula tiene una posición $\mathbf{r}_0$ y una orientación $\hat{\mathbf{u}}_0$ en $t = 0$, la condición inicial es

$$p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t = 0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\hat{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{u}}_0) \quad (\text{A.23})$$

donde δ es la distribución delta de Dirac. Para un micronadador sin campo externo o micronadadores no interactuantes, la ecuación de movimiento es

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) = -\nabla \cdot [\mathbf{v} p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)] - \hat{\mathcal{R}} \cdot [\boldsymbol{\Omega} p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)] \quad (\text{A.24})$$

donde ∇ es el operador nabla respecto a las componentes de $\mathbf{r}$ y $\hat{\mathcal{R}} = \hat{\mathbf{u}} \times \nabla_{\hat{\mathbf{u}}}$ es el operador de rotación con $\nabla_{\hat{\mathbf{u}}}$, el operador nabla respecto a las componentes de la orientación, $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$ es la velocidad traslacional y $\boldsymbol{\Omega} = \hat{\mathbf{u}} \times d\hat{\mathbf{u}}/dt$, la velocidad angular. Esta ecuación es un resultado exacto dado que expresa una ecuación de continuidad para probabilidades. La ecuación de Smoluchowski es una aproximación en la escala de tiempo difusiva, cuando la velocidad traslacional $\mathbf{v}$ y angular $\boldsymbol{\Omega}$ son funciones de las coordenadas de posición y orientación debido a que las fuerzas y las torcas están en equilibrio. Sin campo externo, sobre un micronadador actúan dos pares de fuerzas y torcas: (1) la fuerza hidrodinámica $\mathbf{F}^h$ y la torca $\boldsymbol{\tau}^h$ por parte del solvente, (2) la fuerza browniana $\mathbf{F}^{\text{Br}}$ y la torca $\boldsymbol{\tau}^{\text{Br}}$, propias de la escala de tiempo difusiva. Se cumple, entonces

$$\begin{aligned} \mathbf{0} &= \mathbf{F}^h + \mathbf{F}^{\text{Br}} \\ \mathbf{0} &= \boldsymbol{\tau}^h + \boldsymbol{\tau}^{\text{Br}} \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

APÉNDICE A. CÁLCULOS SUPLEMENTARIOS
A.3. DESPLAZAMIENTO CUADRÁTICO MEDIO EN EL FORMALISMO DE
SMOLUCHOWSKI

Sin tomar en cuenta las interacciones hidrodinámicas, las fuerzas y torcas hidrodinámicas no son más que las fuerzas de fricción de una esfera en el solvente:

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_j^h &= -\gamma_t(\mathbf{v} - v_0\hat{\mathbf{u}}) \\ \boldsymbol{\tau}^h &= -\gamma_r\boldsymbol{\Omega}\end{aligned}\tag{A.26}$$

Por tanto, usando las Ecs. A.25, las velocidades pueden expresarse como

$$\begin{aligned}\mathbf{v} &= v_0\hat{\mathbf{u}} + \frac{1}{\gamma_t}\mathbf{F}^{\text{Br}} \\ \boldsymbol{\Omega} &= \frac{1}{\gamma_r}\boldsymbol{\tau}^{\text{Br}}\end{aligned}\tag{A.27}$$

La fuerza y torca browniana se encuentran mediante la condición de equilibrio $t \rightarrow \infty$, $\partial p / \partial t \rightarrow 0$ en la Ec. A.24, en el cual la pdf del ensamble canónico es $p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}) = \exp(-U(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}})/k_B T)/Q$. Se obtiene

$$\begin{aligned}\mathbf{F}^{\text{Br}} &= -k_B T \nabla \ln p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \\ \boldsymbol{\tau}^{\text{Br}} &= -k_B T \hat{\mathcal{R}} \ln p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)\end{aligned}\tag{A.28}$$

Finalmente, sustituyendo en la Ec. A.27 y, a su vez, en la Ec. A.24, se obtiene la ecuación de Smoluchowski para un micronadador esférico,

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) = -v_0(\hat{\mathbf{u}} \cdot \nabla) p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) + D_t^{(0)} \nabla^2 p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) + D_r^{(0)} \hat{\mathcal{R}}^2 p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)\tag{A.29}$$

A partir de esta ecuación pueden obtenerse ecuaciones de movimiento para el promedio de cualquier cantidad física f relevante del sistema, considerando la definición del promedio

$$\langle f(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}^2} d\mathbf{r} \int_{\mathbb{S}^1} d\hat{\mathbf{u}} f(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}) p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)\tag{A.30}$$

La importancia de dichos promedios es que son cantidades experimentalmente accesibles. De esta manera, el formalismo de Smoluchowski conecta la descripción microscópica del movimiento activo y las observables macroscópicas.

A.3. Desplazamiento cuadrático medio en el formalismo de Smoluchowski

Una cantidad experimentalmente accesible es el desplazamiento cuadrático medio que, para este caso, caracteriza desplazamientos traslacionales y rotacionales. En este apéndice se muestra el cálculo obtenido de los formalismos de Smoluchowski para el caso en dos dimensiones.

A.3.1. Traslacional

El desplazamiento traslacional cuadrático medio es

$$W_t(t) = \langle |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t=0)|^2 \rangle = \langle r(t)^2 \rangle\tag{A.31}$$

considerando que $\mathbf{r}(t=0) = \mathbf{0}$.

En el régimen difusivo, para una partícula sin actividad ($v_0 = 0$) en dos dimensiones ($\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}}$), se obtiene

$$W_{t0}(t) = 4D_t^{(0)}t\tag{A.32}$$

APÉNDICE A. CÁLCULOS SUPLEMENTARIOS
A.3. DESPLAZAMIENTO CUADRÁTICO MEDIO EN EL FORMALISMO DE
SMOLUCHOWSKI

Multiplicando ambos lados de la ecuación de Smoluchowski A.29 por r^2 , e integrando parcialmente se obtiene una ecuación de movimiento para $W_t(t)$ de la forma

$$\begin{aligned} \frac{dW_t(t)}{dt} = & - \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} r^2 \nabla \cdot [v_0 \hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)] + D_t \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} r^2 \nabla^2 P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \\ & + D_r^{(0)} \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} r^2 \hat{\mathcal{R}}^2 P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

Para simplificar cada término a la derecha de la ecuación, son necesarias las siguientes identidades de integrales de los operadores diferenciales ∇ y $\hat{\mathcal{R}}$, obtenidas de los teoremas de Stokes y Gauss:

$$\int d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r} \mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot \nabla f(\mathbf{r}) \quad (\text{A.34a})$$

$$\int d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \nabla^2 g(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r} g(\mathbf{r}) \nabla^2 f(\mathbf{r}) \quad (\text{A.34b})$$

$$\oint d\hat{\mathbf{u}} f(\hat{\mathbf{u}}) \hat{\mathcal{R}}^2 g(\hat{\mathbf{u}}) = \oint d\hat{\mathbf{u}} g(\hat{\mathbf{u}}) \hat{\mathcal{R}}^2 f(\hat{\mathbf{u}}) \quad (\text{A.34c})$$

$$\oint d\hat{\mathbf{u}} f(\hat{\mathbf{u}}) \hat{\mathcal{R}} \cdot \mathbf{G}(\hat{\mathbf{u}}) = - \oint d\hat{\mathbf{u}} \mathbf{G}(\hat{\mathbf{u}}) \cdot \hat{\mathcal{R}} f(\hat{\mathbf{u}}) \quad (\text{A.34d})$$

donde f y g son funciones escalares del vector indicado, mientras que $\mathbf{F}$ es una función vectorial. Usando las Ecs. A.34a-c sobre el primer, segundo y tercer término de la Ec. A.33, respectivamente, se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{dW_t(t)}{dt} = & \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} [v_0 \hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)] \cdot \nabla r^2 + D_t^{(0)} \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \nabla^2 r^2 \\ & + D_r^{(0)} \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \hat{\mathcal{R}}^2 r^2 \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

donde el último término es cero, pues las parciales de $\hat{\mathcal{R}}$ se aplican respecto a componentes de $\hat{\mathbf{u}} = \cos \theta \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \hat{\mathbf{y}}$. Usando las identidades

$$\nabla r^2 = 2\mathbf{r} \quad (\text{A.36a})$$

$$\nabla^2 r^2 = 4 \quad (\text{A.36b})$$

y de la definición del promedio, la Ec. A.35 se simplifica a

$$\frac{dW(t)}{dt} = 2v_0 \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle(t) + 4D_t^{(0)} \quad (\text{A.37})$$

con la condición inicial $W(t=0) = 0$. Ahora es necesaria una ecuación de movimiento para el promedio $\langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle(t)$. De modo análogo a como se hizo para la Ec. A.33, se multiplica la ecuación de Smoluchowski A.29 por $\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r}$, e integrando se obtiene, se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle(t)}{dt} = & - \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} (\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r}) \nabla \cdot [v_0 \hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)] + D_t^{(0)} \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} (\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r}) \nabla^2 P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \\ & + D_r^{(0)} \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} (\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r}) \hat{\mathcal{R}}^2 P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

Usando la Ec. A.34a-c sobre el primer, segundo y tercer término, respectivamente, se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle(t)}{dt} = & \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} [v_0 \hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)] \cdot \nabla (\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r}) + D_t^{(0)} \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \nabla^2 (\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r}) \\ & + D_r^{(0)} \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \hat{\mathcal{R}}^2 (\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

Usando los resultados

$$\nabla(\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r}) = \hat{\mathbf{u}} \quad (\text{A.40a})$$

$$\nabla^2(\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r}) = 0 \quad (\text{A.40b})$$

$$\hat{\mathcal{R}}^2(\hat{\mathbf{u}}) = -\hat{\mathbf{u}} \quad (\text{A.40c})$$

y de la definición del promedio, la Ec. A.39 se simplifica a

$$\frac{d\langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle(t)}{dt} = v_0 - D_r^{(0)} \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle(t) \quad (\text{A.41})$$

Esta es una ecuación diferencial lineal de primer orden no homogénea. Usando variación de parámetros sobre la solución general de la ecuación homogénea asociada, se tiene

$$\langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle(t) = K(t) \exp\left(-D_r^{(0)}t\right) \quad (\text{A.42})$$

Sustituyendo esta función en la Ec. A.41, resolviendo la ecuación resultante y usando la condición inicial $\langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle(t=0) = 0$, se obtiene

$$K(t) = \frac{v_0}{D_r^{(0)}} \left[\exp\left(D_r^{(0)}t\right) - 1 \right] \quad (\text{A.43})$$

Por tanto,

$$\langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle(t) = \frac{v_0}{D_r^{(0)}} \left[1 - \exp\left(-D_r^{(0)}t\right) \right] \quad (\text{A.44})$$

Finalmente, este resultado cierra la Ec. A.37. Sustituyéndolo, integrando sobre el tiempo y usando la condición inicial $W_t(t=0) = 0$, se obtiene

$$W_t(t) = 4 \left(D_t^{(0)} + \frac{v_0^2}{2D_r^{(0)}} \right) t + \frac{2v_0^2}{D_r^{(0)^2}} \left[\exp\left(-D_r^{(0)}t\right) - 1 \right] \quad (\text{A.45})$$

Este es el MSD traslacional bidimensional de una partícula coloidal activa disuelta en un solvente sin campos externos.

A.3.2. Rotacional

El desplazamiento rotacional cuadrático medio es

$$W_r(t) = \langle |\hat{\mathbf{u}}(t) - \hat{\mathbf{u}}(0)|^2 \rangle = 2[1 - \langle \hat{\mathbf{u}}(t) \rangle \cdot \hat{\mathbf{u}}(0)] \quad (\text{A.46})$$

considerando la orientación inicial $\hat{\mathbf{u}}(t=0) = \hat{\mathbf{u}}(0)$. En el régimen difusivo, a tiempos cortos, para una partícula sin actividad ($v_0 = 0$) en dos dimensiones ($\hat{\mathbf{u}} = u_x \hat{\mathbf{x}} + u_y \hat{\mathbf{y}}$), se obtiene

$$W_{r0}(t) \approx 2D_r^{(0)}t \quad (\text{A.47})$$

Multiplicando ambos lados de la ecuación de Smoluchowski A.29 por $2[1 - \hat{\mathbf{u}}(t) \cdot \hat{\mathbf{u}}(0)]$, se obtiene una ecuación de movimiento para $W_t(t)$ de la forma

$$\begin{aligned} \frac{dW_r(t)}{dt} = & - \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} \{ 2[1 - \hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{u}}(0)] \} \nabla \cdot [v_0 \hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)] \\ & + D_t^{(0)} \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} \{ 2[1 - \hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{u}}(0)] \} \nabla^2 P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \\ & + D_r^{(0)} \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} \{ 2[1 - \hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{u}}(0)] \} \hat{\mathcal{R}}^2 P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \end{aligned} \quad (\text{A.48})$$

APÉNDICE A. CÁLCULOS SUPLEMENTARIOS
A.3. DESPLAZAMIENTO CUADRÁTICO MEDIO EN EL FORMALISMO DE
SMOLUCHOWSKI

Para simplificar cada término a la derecha de la ecuación, son necesarias las siguientes identidades de integrales de los operadores diferenciales A.34a-c sobre el primer, segundo y tercer término, respectivamente, se obtiene

$$\frac{dW_r(t)}{dt} = -2D_r^{(0)} \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \hat{\mathcal{R}}^2(\hat{\mathbf{u}}) \cdot \hat{\mathbf{u}}(0) \quad (\text{A.49})$$

donde el último término es cero, pues las parciales de $\hat{\mathcal{R}}$ se aplican respecto a componentes de $\hat{\mathbf{u}} = \cos\theta\hat{\mathbf{x}} + \sin\theta\hat{\mathbf{y}}$. Usando la identidad A.40c

$$\hat{\mathcal{R}}^2(\hat{\mathbf{u}}) \cdot \hat{\mathbf{u}}(0) = -\hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{u}}(0) \quad (\text{A.50a})$$

y la definición del promedio, la Ec. A.49 se simplifica a

$$\frac{dW_r(t)}{dt} = -\langle \hat{\mathbf{u}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{u}}(0) \quad (\text{A.51})$$

con la condición inicial $W_r(t=0) = 0$. Ahora es necesaria una ecuación de movimiento para el promedio $\langle \hat{\mathbf{u}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{u}}(0)$. De modo análogo a como se hizo para la Ec. A.48, se multiplica la ecuación de Smoluchowski A.29 por $\hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{u}}(0)$ y se obtiene

$$\frac{d\langle \hat{\mathbf{u}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{u}}(0)}{dt} = D_r^{(0)} \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} [\hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{u}}(0)] \hat{\mathcal{R}}^2 P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \quad (\text{A.52})$$

Usando las Ecs. A.34a-c sobre el primer, segundo y tercer término, respectivamente, se obtiene

$$\frac{d\langle \hat{\mathbf{u}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{u}}(0)}{dt} = D_r^{(0)} \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \hat{\mathcal{R}}^2(\hat{\mathbf{u}}) \cdot \hat{\mathbf{u}}(0) \quad (\text{A.53})$$

Usando la identidad A.40c y la definición del promedio, esta se simplifica a

$$\frac{d\langle \hat{\mathbf{u}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{u}}(0)}{dt} = -D_r^{(0)} \langle \hat{\mathbf{u}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{u}}(0) \quad (\text{A.54})$$

con la condición inicial $\langle \hat{\mathbf{u}}(t=0) \rangle \cdot \hat{\mathbf{u}}(0) = 1$. Esta es una ecuación diferencial lineal de primer orden homogénea cuya solución es simplemente

$$\langle \hat{\mathbf{u}} \rangle \cdot \hat{\mathbf{u}}(0) = \exp\left(-D_r^{(0)}t\right) \quad (\text{A.55})$$

Finalmente, este resultado cierra la Ec. A.51. Sustituyéndolo, integrando sobre el tiempo y usando la condición inicial $W_r(t=0) = 0$, se obtiene

$$W_r(t) = 2 \left[1 - \exp\left(-D_r^{(0)}t\right) \right] \quad (\text{A.56})$$

Este es el MSD rotacional bidimensional de una partícula coloidal activa un solvente sin campos externos.

Apéndice B

Información suplementaria del procesamiento de datos

B.1. Manejo de datos

Para guardar la gran cantidad de información generada con el poder de cómputo disponible, se implementa un procesamiento por lotes (*batch processing*) para guardar un número m de filas por cada tabla asociada a las coordenadas x , y y ϕ , que contienen los valores de las coordenadas de las **iterations** repeticiones, para los N micronadadores, en los **steps** pasos del modelo. La relación de recurrencia que corresponde a solución en diferencias finitas de la ecuación de Langevin, viene dado por las Ecs. 2.12. Esta función recurre a la función auxiliar `calculate_forces_torques` para calcular los términos de fuerzas y torcas relacionados con las interacciones entre micronadadores debido a esfera dura o al momento dipolar magnético. Esta función usa el decorador `@njit` del compilador JIT para Python, Numba, para optimizar el tiempo de cálculo haciendo uso de cómputo paralelo.

Cada archivo se guarda con el formato de nombre `<coordenada>_<# de iteración>it_<valor de campo en mT>mT.csv`. Para analizar más cómodamente la información, los registros de las tablas se refieren al instante de tiempo (`time`, en s) y las columnas, al valor de la coordenada en ese instante para cada columna (`particle_1`, `particle_2`, etc.), tal y como se muestra en la Tabla B.1. Esta tabla almacena los valores de la coordenada x para todos los micronadadores para una repetición del experimento. También se tienen tablas análogas para las coordenadas y y ϕ

Campo	Tipo	Descripción
time	float	Tiempo de modelado (en segundos)
particle_1	float	Coordenada x del micronadador 1
...	...	...
particle_N	float	Coordenada x del micronadador N

Tabla B.1: Esquema de almacenamiento de coordenadas de micronadadores. Tabla de valores x para alguna repetición del experimento.

Esta organización de datos es óptima para sistemas de muchas partículas puesto que minimiza la cantidad de veces que se hace lectura de ficheros.

APÉNDICE B. INFORMACIÓN SUPLEMENTARIA DEL PROCESAMIENTO
DE DATOS
B.2. VALORES DE PARÁMETROS UTILIZADOS

B.2. Valores de parámetros utilizados

Variable	Valor / Fórmula	Unidades	Descripción
N	100		Número de micronadadores
steps	10^5		Número de pasos
iterations	50		Número de veces que se realiza el experimento
sigma	1	μm	Diámetro de los micronadadores
k	1.38×10^{-23}	J/K	Constante de Boltzmann
T	300	K	Temperatura del solvente
eta	1	$\text{mPa} \cdot \text{s}$	Viscosidad del solvente (agua)
mu	1.257	$\mu\text{H}/\text{m}$	Permeabilidad del medio (agua)
mm	$\{1/\sqrt{10}, 1, \sqrt{10}\} \times 10^{-16}$	J/T	Magnitud de momento dipolar del micronadador
B	0, 0.1, 1, 10	mT	Magnitud de campo magnético
v	10	σ/s	Rapidez del micronadador
grid_spacing	1, 2, 3	σ	Espaciado inicial de rejilla
K0	$k \cdot T$	J	Constante de energía térmica
Dt	$K0/(3 \cdot \pi \cdot \eta \cdot \sigma)$	m^2/s	Coefficiente de difusión traslacional
Dr	$K0/(\pi \cdot \eta \cdot \sigma^3)$	1/s	Coefficiente de difusión rotacional
dt	$1/(\text{Dr} \cdot 10^4)$	μs	Tamaño de paso
gammat	$K0/\text{Dt}$	kg / s	Coefficiente de fricción traslacional
gammar	$K0/\text{Dr}$	J·s	Coefficiente de fricción rotacional
KF	$-(3 \cdot \mu \cdot \text{mm}^2)/(4 \cdot \pi)$	$\text{J} \cdot \text{s}^3$	Constante de fuerza
KTAU	$(\mu \cdot \text{mm}^2)/(4 \cdot \pi)$	$\text{J} \cdot \text{s}^3$	Constante de torca
rc	$2^{1/6} \cdot \sigma$	m	Radio de corte
epsilon	$100 \cdot K0$	J	Pozo de potencial WCA

B.3. Scripts utilizados

Los códigos pueden ser solicitados al autor. Como ejemplo, se muestra el pseudocódigo de la función que calcula el factor de estructura estático

Algorithm 1: Cálculo del factor de estructura con procesamiento por lotes y chunks

Data: N , steps, iterations, separation, sigma, $\{B_i\}$, n_step , v , num_wavevector_steps, batch_size, chunk_size

Result: Archivo CSV con los factores de estructura promediados para cada B_i

Crear directorio de resultados;

Definir ángulos y magnitudes de onda: $\theta \leftarrow linspace(0, 2\pi)$, $q \leftarrow linspace(q_{min}, q_{max})$;

Construir mallas bidimensionales $q_x = q \cos(\theta)$, $q_y = q \sin(\theta)$;

Inicializar **structure_factors** con $q_\sigma = q$;

foreach B en $\{B_i\}$ **do**

Inicializar S_q^{total} en ceros;

Calcular número de lotes $n_{batch} = \lceil iterations / batch_size \rceil$;

for $batch = 1$ **to** n_{batch} **do**

Determinar rango de iteraciones del lote;

foreach *iteración en el lote* **do**

Leer la línea n_step de los archivos **x_file**, **y_file** con

read_specific_line();

Convertir a coordenadas reducidas $(x, y)/\sigma$;

foreach $chunk$ de q_x, q_y de tamaño **chunk_size** **do**

Expandir dimensiones para vectorizar el cálculo de fases;

Calcular fase $\phi = q_x x + q_y y$;

Evaluar $e^{i\phi}$ y sumar sobre partículas;

Promediar sobre iteraciones del lote: $S_q^{chunk} = \langle |\sum e^{i\phi}|^2 / N \rangle$;

Acumular $S_q^{total} \leftarrow S_q^{total} + S_q^{chunk}$;

Calcular promedio angular $S_q^{avg} = \langle S_q^{total} \rangle_\theta$;

Guardar en **structure_factors** bajo clave correspondiente a B ;

Guardar **structure_factors** en CSV;

Apéndice C

Participación en congreso

Parte de los resultados de este trabajo fueron presentados en el Winter Meeting on Statistical Physics LIII que se llevó a cabo del 7 al 10 de enero 2025 en Ciudad de México.



Figura C.1: Constancia de participación.

Bibliografía

- [1] TE VRUGT, M. y WITTKOWSKI, R. (2025) Metareview: a survey of active matter reviews. *Eur. Phys. J. E* 48, 12. DOI: <https://doi.org/10.1140/epje/s10189-024-00466-z>
- [2] SAGUÉS, F. (2022) *Colloidal Active Matter: Concepts, Experimental Realizations, and Models*. CRC Press. DOI: <https://doi.org/10.1201/9781003302292>.
- [3] BUNEA, A. y TABORYSKI, R. (2020) Recent Advances in Microswimmers for Biomedical Applications. *Micromachines*, 11(12), 1048. DOI: <https://doi.org/10.3390/mi11121048>
- [4] PURCELL, E. (1977) Life at low Reynolds number. *Am. J. Phys.* 45(1), 3-11. DOI: <https://doi.org/10.1119/1.10903>
- [5] BISHOP, K., BISWAL, S., BHARTI, B. (2023) Active Colloids as Models, Materials, and Machines. *Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng*, 14, 1-30. DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev-chembioeng-101121-084939>
- [6] SCHMIDT, C., MEDINA, M., EDMONSON, R., SCHMIDT, O. (2020) Engineering microrobots for targeted cancer therapies from a medical perspective. *Nat. Commun.*, 11, 5618. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41467-020-19322-7>
- [7] LANDERS, F. et al. (2025) Clinically ready magnetic microrobots for targeted therapies. *Science*, 390, 710-715. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.adx1708>
- [8] JURADO, B. et al. (2014) Self-Propelled Activated Carbon Janus Micromotors for Efficient Water Purification *Small*. DOI: <https://doi.org/10.1002/smll.201402215>
- [9] LI, Q. et al. (2021) Magnetic field-mediated Janus particles with sustained driving capability for severe bleeding control in perforating and inflected wounds. *Bioact. Mater*, 6(12), 4625-4639. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.bioactmat.2021.05.006>.
- [10] ALSADAAWI, Y., EICHLER-VOLF, A., HEIGL, M., ZAHN, P., ALBRECHT, M. y ERBE, A. (2021) Control over self-assembled Janus clusters by the strength of magnetic field in H₂O₂. *Eur. Phys. J. E*, 44(23). DOI: <https://doi.org/10.1140/epje/s10189-021-00010-3>
- [11] CHAKRABORTY, P. et al. (2025) Smart navigation of microswimmers in Poiseuille flow via reinforcement learning. *Eur. Phys. J. E* 48(30). DOI: <https://doi.org/10.1140/epje/s10189-025-00496-1>
- [12] AMOUDRUZ, L., LITVINOV, S. y KOUMOUTSAKOS, P. (2025) Optimal navigation of magnetic artificial microswimmers in blood capillaries with deep reinforcement learning. *Phys. Fluids*.. 37, 071703. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0274623>
- [13] FILY, Y. y MARCHETTI, M. (2012) Athermal Phase Separation of Self-Propelled Particles with No Alignment. *Phys. Rev. Lett.*, 108, 235702. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.235702>

- [14] OTHMAN, S., MIDYA, J., THORSTEM, A. y GOMPPER, G. (2025) Phase Behavior and Dynamics of Active Brownian Particles in an Alignment Field. *Phys. Rev. E*, 111, 015425. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.111.015425>
- [15] TELEZKI, V. y KLUMPP, S. (2025) Patterns of active dipolar particles in external magnetic fields. *Phys. Rev. E*, 112, 065422. DOI: <https://doi.org/10.1103/836q-7vng>.
- [16] SAKAI, N. y ROYALL, C. (2025) Dipolar colloids in three dimensions: non-equilibrium structure and re-entrant dynamics *Soft Matter*, 21, 5204-5213. DOI: <https://doi.org/10.1039/D5SM00182J>
- [17] DE MACEDO, N., LÖWEN, H., VOIGTMANN, T. y SMALLENBURG, F.. (2018) Static structure of active Brownian hard disks. *J. Phys.: Condens. Matter*, 30 074001. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aaa3bf>
- [18] KAISER, A., POPOWA, K. y LÖWEN, H.. (2015) Active dipole clusters: From helical motion to fission *Phys. Rev. E*, 92, 012301. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.92.012301>
- [19] DHONT, J. (1996) *An Introduction to Dynamics of Colloids*. Elsevier Science B.V.
- [20] RAMÍREZ, R., RUIZ, H. y ALARCÓN, O. (2012) Orientational distribution for dipolar and quadrupolar colloids driven by an external field. *Rev. Mex. Fís.*, 58(1), 104-112. <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=57023526014>
- [21] WAISBORD, N., LEFÈVRE, C., BOCQUET, L., YBERT, C. y COTTIN-BIZONE, G.. (2016) Destabilization of a flow focused suspension of magnetotactic bacteria. *Phys. Rev. Fluids*, 1, 053203. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevFluids.1.053203>
- [22] HOWSE, J., JONES, R., RYAN, A., GOUGH, T., VAFABAKHSH, R. y GOLESTANIAN, R. (2007) Self-Motile Colloidal Particles: From Directed Propulsion to Random Walk. *Phys. Rev. Lett.*, 99, 048102. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.048102>
- [23] VOLPE, G. et al. (2014) Simulation of the active Brownian motion of a microswimmer. *Am. J. Phys.*, 82, 659-664. DOI: <https://doi.org/10.1119/1.4870398>.
- [24] BUTTINONI, I., BIALKÉ, J., KÜMMEL, F., LÖWEN, H., BECHINGER, C. y SPECK, T. (2013) Dynamical clustering and phase separation in suspensions of self-propelled colloidal particles. *Phys. Rev. Lett.*, 110, 238301. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.238301>
- [25] BAUS, M. y COLOT, J. L. (1987) Thermodynamics and structure of a fluid of hard rods, disks, spheres, or hyperspheres from rescaled virial expansions. *Phys. Rev. A*, 36(8), 3912-3925. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.36.3912>
- [26] PALACCI, J., SACANNA, S., PRESKA, A., PINE, D. y CHAIKIN, P. (2013) Living Crystals of Light-Activated Colloidal Surfers. *Science*, 339, 936-940. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1230020>
- [27] TELEZKI, V. y KLUMPP, S. (2020) Simulations of structure formation by confined dipolar active particles. *Soft Matter*, 16, 10537-10547. DOI: <https://doi.org/10.1039/D0SM00926A>
- [28] SCHWANZER, N., COSLOVICH, D. y KAHL, G. (2016) Two-dimensional systems with competing interactions: dynamic properties of single particles and of clusters. *J. Phys.: Condens. Matter*, 28 414015. DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/41/414015>
- [29] PLATTEN, E. (1999) An introduction to numerical methods for stochastic differential equations. *Acta Numer.*, 8, 197-246. DOI: <https://doi.org/10.1017/S0962492900002920>
- [30] CALLEGARI, A. y VOLPE, G. (2019) Numerical Simulations of Active Brownian Particles en Toschi, F y Sega, M. (Ed.), *Flowing Matter* (pp. 221-238). Springer

- [31] DULANEY, A., MALLORY, A. y BRADY, J. (2021) The “isothermal” compressibility of active matter. *J. Chem. Phys.*, 154 014902. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0029364>
- [32] WEEKS, J., CHANDLER, D. y ANDERSEN, H. (1971) Role of Repulsive Forces in Determining the Equilibrium Structure of Simple Liquids. *J. Chem. Phys.*, 54, 5237. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1674820>
- [33] SAXTON, M. (1997) Single-particle tracking: the distribution of diffusion coefficients. *Biophys J.*, 72(4): 1744-53. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0006-3495\(97\)78820-9](https://doi.org/10.1016/S0006-3495(97)78820-9)
- [34] CALANDRINI, V., PELLEGRINI, E., CALLIGARI, P., HINSEN, K. y KNELLER, G. (2011) nMoldyn - Interfacing spectroscopic experiments, molecular dynamics simulations and models for time correlation functions. *Collection SFN, 2011*: 201-232. DOI: <https://doi.org/10.1051/sfn/201112010>
- [35] ZHURAVLYOV, V., GOREE, J., ELVATI, P. y VIOLI, A. (2023) Finite-size effects in the static structure factor $S(k)$ and $S(0)$ for a two-dimensional Yukawa liquid. *Phys. Rev. Lett.*, 108, 035211. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.108.035211>
- [36] EDWARDS, B., RIFFE, D., JI, J. y BOOTH, W. (2017) Interactions between uniformly magnetized spheres. *Am. J. Phys.*, 85, 130. DOI: <https://doi.org/10.1119/1.4973409>
- [37] DHONT, J. y BRIELS, W. (2006) Rod-Like Brownian Particles in Shear Flow en Gompper, G. y Schick, M. (Ed.), *Soft Matter, Vol. 2: Complex Colloidal Suspensions* (pp. 216-219). WILEY-VCH Verlag GmbH & Co.