







Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

---

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

---

Un Estudio de la Materia Activa Dipolar desde un Punto de  
Vista Microscópico y Macroscópico

Tesis presentada al

**Colegio de Física**

como requisito parcial para la obtención del grado de

**LICENCIADO EN FÍSICA**

por

Adrián Juárez Rojas

Asesorado por

Dr. Ramírez Sánchez Roberto

Puebla Pue.  
19 de octubre de 2024





Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

---

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

---

Un Estudio de la Materia Activa Dipolar desde un Punto de  
Vista Microscópico y Macroscópico

Tesis presentada al

**Colegio de Física**

como requisito parcial para la obtención del grado de

**LICENCIADO EN FÍSICA**

por

Adrián Juárez Rojas

Asesorado por

Dr. Ramírez Sánchez Roberto

Puebla Pue.  
19 de octubre de 2024



**Título:** Un Estudio de la Materia Activa Dipolar desde un Punto de Vista Microscópico y Macroscópico

**Estudiante:** ADRIÁN JUÁREZ ROJAS

COMITÉ

---

Dra. Deriabina Alexandra  
Presidente

---

Dra. Bonilla Capilla Beatriz  
Secretario

---

Dra. Mendoza Méndez Patricia  
Vocal

---

Dr. Mena Flores José Eladio  
Vocal

---

Dr. Ramírez Sánchez Roberto  
Asesor





# Índice general

Agradecimientos	XIII
Resumen	XV
<b>1. Ecuación de Smoluchowski</b>	<b>3</b>
1.1. Ecuación de difusión de Fick . . . . .	3
1.1.1. Coeficiente de fricción de Stokes . . . . .	6
1.1.2. Coeficiente de difusión de Einstein . . . . .	9
1.2. Fundamentos de la ecuación de Smoluchowski . . . . .	10
1.2.1. Partículas Coloidales . . . . .	11
1.2.2. Escalas de Tiempo . . . . .	11
1.2.3. Funciones de Densidad de Probabilidad . . . . .	13
1.2.4. Ensamble Canónico . . . . .	13
1.3. Ecuación de Smoluchowski . . . . .	14
1.3.1. Fuerza browniana . . . . .	17
1.4. Ecuación de Smoluchowski para N partículas . . . . .	18
1.4.1. Ecuación de difusión de un micronadador esférico . . . . .	20
1.4.2. Desplazamiento cuadrático medio de un micronadador esférico . . . . .	21
<b>2. Ecuación de Langevin</b>	<b>25</b>
2.1. Fundamentos de la ecuación de Fokker-Planck . . . . .	26
2.1.1. Conceptos en probabilidad . . . . .	26
2.1.2. Procesos estocásticos . . . . .	27
2.1.3. Clasificación de procesos estocásticos . . . . .	27
2.1.4. Ecuación de Chapman-Kolmogorov . . . . .	28
2.2. Ecuación de Fokker-Planck . . . . .	29
2.3. Ecuación de Langevin . . . . .	31
2.4. Coeficientes de fricción y difusión . . . . .	32
2.4.1. Ecuación no lineal de Langevin en varias dimensiones . . . . .	34
2.5. Movimiento Browniano rotacional de una molécula lineal con momento dipolar $\mu$ . . . . .	36
<b>3. Determinación experimental del desplazamiento cuadrático medio para dipolos magnéticos inmersos en un campo magnético externo</b>	<b>39</b>
3.1. Justificación del experimento . . . . .	39
3.2. Diseño experimental . . . . .	40

3.2.1. Objetivo del Experimento . . . . .	40
3.2.2. Materiales . . . . .	41
3.2.3. Procedimiento . . . . .	42
<b>4. Resultados</b>	<b>45</b>
4.1. Movimiento de un dipolo sin interacción con campo magnético externo . . . . .	45
4.1.1. Movimiento de dos dipolos sin interacción con campo magnético externo . . .	46
4.1.2. Movimiento de tres dipolos sin interacción con campo magnético externo . .	47
4.1.3. Movimiento de cuatro dipolos sin interacción con campo magnético externo .	48
4.1.4. Movimiento de cinco dipolos sin interacción con campo magnético externo . .	49
4.1.5. Movimiento de seis dipolos sin interacción con campo magnético externo . . .	50
4.1.6. Movimiento de un dipolo en presencia de un campo magnético externo al sistema . . . . .	52
4.1.7. Movimiento de dos dipolos en presencia de un campo magnético externo al sistema . . . . .	52
4.1.8. Movimiento de tres dipolos en presencia de un campo magnético externo al sistema . . . . .	53
4.1.9. Movimiento de cuatro dipolos en presencia de un campo magnético externo al sistema . . . . .	54
4.1.10. Movimiento de cinco dipolos en presencia de un campo magnético externo al sistema . . . . .	55
4.1.11. Movimiento de seis dipolos en presencia de un campo magnético externo al sistema . . . . .	56
4.1.12. Ampliación de resultados . . . . .	59
4.2. Comparación de resultados del primer, segundo y tercer capítulo . . . . .	61
<b>5. Conclusiones</b>	<b>65</b>
<b>A. Integración por partes</b>	<b>67</b>
<b>B. Momento de inercia</b>	<b>69</b>
B.1. Cascarón esférico . . . . .	69
B.2. Esfera sólida . . . . .	69
<b>C. Transformadas de Fourier y Laplace</b>	<b>71</b>
C.1. Transformada de Fourier . . . . .	71
C.1.1. Primera convención . . . . .	71
C.1.2. Segunda convención . . . . .	71
C.2. Transformada de Laplace . . . . .	71
C.3. Integral Gaussiana . . . . .	72
C.3.1. Integral de exponencial compleja . . . . .	72
C.3.2. Integral Gaussiana . . . . .	73
C.3.3. Método alternativo de solución para $P(x, t)$ . . . . .	74
<b>D. Triple rotacional actuando sobre <math>\mathbf{u}</math></b>	<b>77</b>
D.1. Triple rotacional actuando sobre $\mathbf{u}$ . . . . .	77

<b>E. Componentes del vector de estrés</b>	<b>79</b>
E.0.1. Componentes del tensor de estrés . . . . .	80
E.1. Teorema integrales de Gauss y Stokes e integración parcial . . . . .	80
E.2. Coeficientes de fricción y difusión . . . . .	83
E.3. Ecuación no lineal de Langevin en varias dimensiones . . . . .	85
E.4. Tabla de posiciones de un dispositivo Hexbug sin influencia de campo magnético externo . . . . .	86
E.4.1. Medición 1 . . . . .	86
<b>Bibliografía</b>	<b>89</b>



# Índice de figuras

1.1.	Evolución temporal de $P(x, t)$ para una partícula browniana en espacio libre. . . . .	5
1.2.	Representación del flujo de un fluido alrededor de una esfera. . . . .	6
1.3.	Superficie tridimensional cerrada con flujo de partículas coloidales, indicado por flechas hacia afuera y hacia adentro. $\hat{n}ds$ denota un vector unitario perpendicular a un elemento de superficie de área $ds$ . . . . .	14
1.4.	Curva cerrada $\partial\Lambda$ sobre una esfera unitaria. $\hat{n}_{\partial\Lambda}$ es el vector normal unitario y $\hat{l}$ es el tangencial. . . . .	15
1.5.	Espermatozoide. Imagen proporcionada por el Centro para el Control y la Prevención de Enfermedades (CDC), dominio público. . . . .	20
1.6.	Bacteria E. coli, amplificada. Foto por fkfkrErbe, colorización digital por Christopher Pooley. Dominio público. . . . .	20
1.7.	Gráfica del desplazamiento cuadrático medio en función del tiempo para tiempos cortos. . . . .	24
1.8.	Gráfica del desplazamiento cuadrático medio en función del tiempo para tiempos largos. . . . .	24
3.1.	Imagen de un <i>Hexbug</i> , un microrobot con motor de vibración utilizado en el experimento para simular el movimiento de partículas autopropulsadas. . . . .	41
3.2.	Diseño de montura para imán. . . . .	42
3.3.	Arandela exterior con altura de 8 mm. . . . .	42
3.4.	Arandela interior con altura de 4 mm. . . . .	42
3.5.	Circuito de dos bobinas de Helmholtz conectadas en serie. . . . .	42
4.1.	Trayectoria del dispositivo Hexbug a lo largo de 50 segundos. . . . .	45
4.2.	Gráfica del logaritmo natural del desplazamiento cuadrático medio (DCM) contra el logaritmo natural del tiempo de retardo $\tau$ correspondiente a un dipolo sin la interacción de campos magnéticos externos. . . . .	46
4.3.	Trayectorias de dos dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados. La trayectoria en rosa se denomina “Primera trayectoria”, mientras que la trayectoria en azul se denomina “Segunda trayectoria”. . . . .	46
4.4.	Desplazamiento cuadrático medio de dos dipolos mutuamente interactuantes sin influencia de campo magnético externo. . . . .	47

4.5. Trayectorias de tres dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados: en rosa, “Primera trayectoria”; en azul, “Segunda trayectoria”; en blanco, “Tercera trayectoria” . . . . .	47
4.6. Desplazamiento cuadrático medio de tres dipolos mutuamente interactuantes sin influencia de campo magnético externo. . . . .	48
4.7. Trayectorias de cuatro dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados. . . . .	48
4.8. Gráfica $\ln(\text{DCM})$ vs. $\ln(\tau)$ del primer dipolo. . . . .	49
4.9. Gráfica $\ln(\text{DCM})$ vs. $\ln(\tau)$ del segundo dipolo. . . . .	49
4.10. Gráfica $\ln(\text{DCM})$ vs. $\ln(\tau)$ del tercer dipolo. . . . .	49
4.11. Gráfica $\ln(\text{DCM})$ vs. $\ln(\tau)$ del cuarto dipolo. . . . .	49
4.12. DCM de cuatro dipolos mutuamente interactuantes sin campo magnético externo. . . . .	49
4.13. Trayectorias de cinco dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados sin interacción con campo magnético externo. . . . .	49
4.14. DCM de cinco dipolos mutuamente interactuantes sin campo magnético externo. . . . .	50
4.15. Trayectorias de seis dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados sin interacción con campo magnético externo. . . . .	50
4.16. Desplazamiento cuadrático medio de seis dipolos mutuamente interactuantes sin influencia de campo magnético externo. . . . .	51
4.17. Trayectoria de un dispositivo Hexbug con dipolo magnético incorporado a lo largo de 50 segundos. . . . .	52
4.18. Gráfica log-log de DCM contra $\tau$ correspondiente a un dipolo con influencia de campo magnético externo. . . . .	52
4.19. Trayectorias de dos dipolos magnéticos con campo magnético externo. . . . .	52
4.20. Desplazamiento cuadrático medio de dos dipolos mutuamente interactuantes con influencia de campo magnético externo. . . . .	53
4.21. Trayectorias de tres dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados: en rosa, “Primera trayectoria”; en azul, “Segunda trayectoria”; en blanco, “Tercera trayectoria” . . . . .	53
4.22. Desplazamiento cuadrático medio de tres dipolos mutuamente interactuantes con influencia de campo magnético externo. . . . .	54
4.23. Trayectorias de cuatro dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados. . . . .	54
4.24. Gráfica $\ln(\text{DCM})$ vs. $\ln(\tau)$ del primer dipolo. . . . .	55
4.25. Gráfica $\ln(\text{DCM})$ vs. $\ln(\tau)$ del segundo dipolo. . . . .	55
4.26. Gráfica $\ln(\text{DCM})$ vs. $\ln(\tau)$ del tercer dipolo. . . . .	55
4.27. Gráfica $\ln(\text{DCM})$ vs. $\ln(\tau)$ del cuarto dipolo. . . . .	55
4.28. Desplazamiento cuadrático medio de cuatro dipolos mutuamente interactuantes con influencia de campo magnético externo. . . . .	55
4.29. Trayectorias de cinco dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados. . . . .	55
4.30. Desplazamiento cuadrático medio de cinco dipolos mutuamente interactuantes con influencia de campo magnético externo. . . . .	56
4.31. Trayectorias de seis dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados. . . . .	57
4.32. Desplazamiento cuadrático medio de seis dipolos mutuamente interactuantes con influencia de campo magnético externo. . . . .	57

4.33. Valores del exponente $\alpha$ . Las barras azules ilustran las agrupaciones de dipolos en el sistema sin la presencia de un campo magnético externo, mientras que las barras rojas reflejan las agrupaciones de dipolos sometidas a la influencia de un campo magnético externo. . . . .	58
4.34. Porcentaje de regiones a las que pertenecen los dispositivos locomotores. . . . .	59
4.35. Veinticinco mediciones del desplazamiento cuadrático medio . . . . .	61
4.36. Veinte mediciones del DCM bajo interacción con campo magnético producido por bobinas . . . . .	62
C.1. Curva sobre el plano complejo recorrida en sentido antihorario. . . . .	72





# Agradecimientos

Encontrar las palabras adecuadas para expresar mi gratitud hacia aquellos que han hecho posible la culminación de este proyecto resulta un desafío. Sin el apoyo incondicional y la inspiración de tantas personas queridas, este trabajo no habría alcanzado el nivel que hoy tiene.

En primer lugar, quiero expresar mi más sincero agradecimiento a mi director de tesis, Roberto Ramírez Sánchez. Su orientación experta, paciencia infinita y fe inquebrantable en mis capacidades han sido la luz que ha guiado mi viaje académico. Su dedicación y entusiasmo han dejado una huella indeleble en mi desarrollo profesional y personal, por lo cual estaré eternamente agradecido.

A mi familia, las palabras no pueden captar la magnitud de mi gratitud. Su amor incondicional, paciencia y ánimo constante han sido mi mayor fuente de fortaleza. En cada momento de duda o cansancio, su apoyo me ha impulsado a seguir adelante con renovada determinación.

A todos ustedes, mi más profundo agradecimiento. Este logro es tan mío como de cada uno de ustedes, quienes han hecho este camino más fácil y, sobre todo, mucho más significativo.



# Resumen

En este trabajo se presenta un análisis de la ecuación de difusión de Fick y su relación con la ecuación de Smoluchowski. Se deduce dicha ecuación y se muestra su aplicación para la determinación del desplazamiento cuadrático medio traslacional de un micronadador, para tiempos  $t$  que satisfacen las condiciones  $t \ll \frac{1}{D_r}$  y  $t \gg \frac{1}{D_r}$ , donde  $D_r$  representa el coeficiente de difusión rotacional. Se presenta una comparativa del desplazamiento cuadrático medio a tiempos cortos y largos para distintos microorganismos.

Adicionalmente, se realiza un análisis teórico de los procesos estocásticos involucrados en el desarrollo de la ecuación de Fokker-Planck y su relación con la ecuación de Langevin, lo cual permite obtener la ecuación de movimiento rotacional de una molécula lineal con momento dipolar  $\mu$ .

Finalmente, se presentan resultados extrapolados a la región macroscópica concernientes al movimiento de un dipolo magnético montado en un dispositivo *Hexbug*, inmerso en un campo magnético producido por dos bobinas. Mostrando el desplazamiento cuadrático medio para cada dipolo en el sistema considerado.

Palabras claves: *Movimiento browniano, ecuación de Fick para la difusión, coeficiente de difusión, dinámica de partículas coloidales, escalas temporales en procesos de difusión, ecuación de Smoluchowski, función de densidad de probabilidad, comportamiento de micronadadores esféricos, ecuación de Langevin, interacción entre dipolos magnéticos, desplazamiento cuadrático medio (MSD), efectos de campos magnéticos.*



# Introducción

La examinación del óvulo vegetal no impregnado, cuya descripción se publicó a principios de 1826, condujo a Robert Brown a dirigir su atención a la estructura del polen. En 1828, Brown redactó un panfleto titulado “*A brief Account of Microscopical Observations made in the Months of June, July, and August, 1827, on the Particles contained in the Pollen of Plants; and on the general Existence of active Molecules in Organic and Inorganic Bodies.*” [7], cuya publicación oficial nunca fue realizada, aunque sí impresa en 1828 por el “*Edinburgh Journal of Science*”. Según Brown, sus investigaciones surgieron como un intento de encontrar el modo de acción del polen en el proceso de impregnación. La primera planta examinada fue *Clarkia Pulchella*, cuyo polen contiene partículas cuyo tamaño va desde  $\frac{1}{400}$  pulgadas hasta  $\frac{1}{500}$  pulgadas [8].

Mientras examinaba el polen de la planta bajo el microscopio, Brown observó que las partículas de polen exhibían un movimiento constante y caótico en el agua. Este movimiento parecía ocurrir independientemente de cualquier influencia externa detectable, como corrientes de agua u otras perturbaciones identificables en ese momento. Como lo expresa Brown, [7, p. 2], “*While examining the form of these particles immersed in Water, I observed many of them very evidently in motion; their motion consisting not only of a change of place in the fluid, manifested by alterations in their relative positions, but also not unfrequently of a change of form in the particle itself; a contraction or curvature taking place repeatedly about the middle of one side accompanied by a corresponding swelling or convexity on the opposite side of the particle. In a few instances the particle was seen to turn on its longer axis. These motions were such as to satisfy me, after frequently repeated observation, servation, that they arose neither from currents in the fluid, nor from its gradual evaporation, but belonged to the particle itself.*”

Brown destacó dos características fundamentales de este fenómeno. La primera se refiere al movimiento incesante de los granos de polen, incluso después de mantenerlos aislados en un contenedor durante un largo período de tiempo. La segunda se refiere a la replicabilidad de este movimiento incesante en objetos inanimados. Brown concluyó que dicho movimiento no se originaba en la vida, sino en las partículas mismas [10].

Entre los años de 1905 y 1908, Einstein publicó cinco artículos relacionados con el movimiento browniano. El primer artículo incluye los fundamentos de su teoría, mientras que el cuarto artículo, publicado en 1907, Einstein menciona las dificultades experimentales de medir las velocidades del movimiento browniano. En los artículos publicados en 1905 y 1906, Einstein aborda las causas y propiedades del movimiento browniano. En particular, el artículo de 1905 titulado *On the Movement of Small Particles Suspended in Stationary Liquids Required by the Molecular-Kinetic Theory of Heat* examina cómo los cuerpos de tamaño microscópico suspendidos en un líquido exhiben movimiento debido a los movimientos térmicos moleculares, sugiriendo una posible relación con el movimiento browniano [15, 10].

---

Marian Ritter von Smolan Smoluchowski fue uno de los primeros científicos en utilizar con éxito la teoría cinética para estudiar el movimiento browniano. Smoluchowski comenzó su trabajo sobre el movimiento browniano en 1900, pero no publicó sus resultados hasta 1906, en parte debido a la publicación del trabajo de Einstein en 1905. Smoluchowski esperaba disponer de más datos experimentales para respaldar su teoría. En su artículo *On the Kinetic Theory of the Brownian Molecular Motion and of Suspensions*, Smoluchowski determinó el coeficiente de difusión utilizando un enfoque cualitativo basado en el concepto de camino libre medio. Este enfoque llevó a una discrepancia con los resultados obtenidos por Einstein en 1905, con una diferencia de un factor de  $\frac{64}{27}$ . Adicionalmente, Smoluchowski calculó el segundo momento del desplazamiento, el cual difirió por un factor de  $\sqrt{\frac{64}{27}}$  en comparación con el resultado de Einstein.

Entre 1913 y 1915, Smoluchowski estudió el movimiento browniano en el espacio de configuración para partículas bajo la influencia de una fuerza externa. Particularmente, las fuerzas fueron de tipo constante (e.g. gravedad) y de lineales de tipo restaurativo [29, 10].

La expresión provista por Smoluchowski tiene la siguiente forma:

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left\{ e^{-\frac{U(x)}{k_B T}} \frac{\partial}{\partial x} \left[ e^{\frac{U(x)}{k_B T}} f(x, t) \right] \right\}$$

donde  $f(x, t)$  representa el número de partículas por unidad de volumen,  $U(x)$  es el potencial de la fuerza en consideración y  $D$  es el coeficiente de difusión.

El trabajo de Smoluchowski se centró en la medición de la distribución espacial de las partículas brownianas, confirmando que la teoría desarrollada por él y por Einstein se ajustaba al comportamiento del movimiento browniano.

En 1908, Paul Langevin publicó un artículo titulado *On the Theory of Brownian Motion*, en el cual aplicó la segunda ley de Newton al estudio del movimiento browniano, identificando dos tipos de fuerzas involucradas. La primera se refiere a la fuerza ejercida por las colisiones de las moléculas sobre la partícula browniana, modelada estocásticamente como una fuerza aleatoria markoviana. La segunda fuerza está relacionada con la viscosidad del fluido en el que se encuentran inmersas las partículas brownianas, modelada utilizando la expresión de fuerza de viscosidad propuesta por Stokes. La ecuación proporcionada por Langevin en su artículo tiene la forma  $m \frac{d^2 x}{dt^2} = -6\pi\mu a \frac{dx}{dt} + X$  y su solución conduce al mismo coeficiente de difusión  $D$  hallado por Einstein [24, 10].

# Capítulo 1

## Ecuación de Smoluchowski

### 1.1. Ecuación de difusión de Fick

La ecuación de difusión de Fick es fundamental para el entendimiento de los procesos de difusión en sistemas libres de campos externos. Esta ecuación establece una base conceptual esencial para el análisis de la difusión en condiciones isotrópicas. Su integración en el estudio permite una comprensión detallada de los mecanismos básicos de la difusión, creando un marco teórico sólido sobre el cual se pueden incorporar efectos adicionales, como los campos magnéticos, que afectan al sistema. De este modo, la ecuación de Fick proporciona el fundamento necesario para el desarrollo de teorías más complejas y la investigación de fenómenos de difusión bajo influencias externas. A partir de estas consideraciones, se procede a estudiar la ecuación de difusión en un espacio sin restricciones espaciales, es decir, en un entorno libre.

Considérese un conjunto de  $n$  partículas brownianas suspendidas en un fluido. Para un intervalo de tiempo  $\tau$ , que es breve en comparación con el período total de observación, pero lo suficientemente largo como para que los desplazamientos de las partículas sean observables en intervalos consecutivos, se define  $\Delta$ . En este contexto,  $\Delta$  representa la distancia recorrida a lo largo del eje unidimensional  $x$  durante el tiempo  $\tau$ .

Consecutivamente, se define  $dn = n\phi(\Delta)d\Delta$  como el número de partículas brownianas cuyo desplazamiento está dentro del intervalo  $(\Delta, \Delta + d\Delta)$ . En la expresión precedente,  $n$  representa el número de partículas brownianas,  $\phi(\Delta)$  representa la función de densidad de probabilidad de que la partícula se encuentre a una distancia  $\Delta$  respecto de su posición inicial después de que haya transcurrido un tiempo  $\tau$ .

Se establecen dos propiedades fundamentales para la función de densidad de probabilidad  $\phi(\Delta)$ :

1. La función de densidad de probabilidad  $\phi(\Delta)$  debe ser simétrica respecto a los desplazamientos de la partícula, i.e.:  $\phi(\Delta) = \phi(-\Delta)$ .
2. La función de densidad de probabilidad debe ser normalizable, i.e.:  $\int_{-\infty}^{\infty} \phi(\Delta)d\Delta = 1$

La primera propiedad refleja la ausencia de preferencia en la dirección del desplazamiento de la partícula a lo largo del eje unidimensional  $x$ , indicando que la probabilidad de que la partícula se desplace hacia el lado positivo o negativo del eje es idéntica. (Esta propiedad será fundamental en etapas posteriores.)

Sea  $f(x, t)$  el número de partículas por unidad de volumen, contenido por el sistema. Dada la conservación del número de partículas contenidas por el sistema, la evolución de la distribución de las partículas entre  $x + \Delta x$  para un tiempo que va de  $t$  a  $t + \tau$  se expresa como:

$$f(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x + \Delta, t) \phi(\Delta) d\Delta \quad (1.1)$$

Con base en la variable  $\tau$ , se realiza la siguiente expansión en serie de Taylor para  $f(x, t + \tau)$ :

$$f(x, t + \tau) \approx f(x, t) + \tau \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + \dots \quad (1.2)$$

Dado que  $\tau$  es un escalar de magnitud menor al tiempo total de observación, los términos de orden mayor o igual a dos son despreciables.

Análogamente, con base en la variable  $\Delta$ , se realiza la siguiente expansión en serie de Taylor para  $f(x + \Delta, t)$ :

$$f(x + \Delta, t) \approx f(x, t) + \Delta \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\Delta^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \dots \quad (1.3)$$

La sustitución de las expresiones 1.2 y 1.3 en la ecuación 1.1 conduce a la siguiente expresión:

$$f(x, t) + \tau \frac{\partial f}{\partial t} \approx f(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\Delta) d\Delta + \frac{\partial f}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta \phi(\Delta) d\Delta + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta^2 \phi(\Delta) d\Delta + \dots \quad (1.4)$$

Considerando que la función de densidad de probabilidad  $\phi(\Delta)$  está normalizada, la integral que multiplica el primer término del lado derecho es igual a 1. Además, la integral que multiplica el segundo término consecutivo presenta un integrando impar. Esto se deduce del hecho de que la función de densidad de probabilidad es par, es decir,  $\phi(\Delta) = \phi(-\Delta)$  y el factor que multiplica a esta función de densidad de probabilidad es  $\Delta$ , que puede adoptar valores positivos para desplazamientos de la partícula hacia el lado positivo del eje unidimensional  $x$ , y valores negativos para desplazamientos hacia el lado negativo del eje  $x$ .

La eliminación de las integrales con  $\Delta$  elevada a las consecuentes potencias impares se repite. Adicionalmente, los términos con  $\Delta$  elevada a potencias pares mayores que dos son insignificantes debido a la magnitud del escalar  $\Delta$ .

Denotando por la letra  $D$  al coeficiente de difusión, tal que  $D = \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{2} \phi(\Delta) d\Delta$ , se deduce la ecuación de difusión de Fick:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \left[ \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta^2}{2} \phi(\Delta) d\Delta \right] \Leftrightarrow \frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (1.5)$$

La ecuación de difusión también puede formularse en términos de la función de densidad de probabilidad  $P(x, t)$  como  $\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}$ . Definiendo  $j_B \equiv -D \frac{\partial P(x, t)}{\partial x}$  como el flujo o densidad de corriente, la ecuación de difusión de Fick puede expresarse como  $\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial j_B}{\partial x}$ . La solución correspondiente se presenta en dos formas distintas. El primer método de solución consiste en la aplicación de transformadas de Fourier e integración sobre el plano complejo, mientras que el segundo consiste en la aplicación tanto de transformadas de Fourier como de Laplace y la respectiva integración sobre el plano complejo. El primer método se muestra a continuación (para ver el desarrollo alterno, consultar el Apéndice C.3).



Considérese un conjunto de partículas en movimiento browniano con una posición inicial  $x_0$  y sin dispersión en el medio. Esta condición inicial se describe mediante la función de distribución  $P(x, t = 0) = \delta(x - x_0)$ , donde  $\delta$  es la función delta de Dirac.

De acuerdo con las transformadas directas e inversas de Fourier establecidas en las ecuaciones C.1 y C.2, correspondientes a la primera convención del Apéndice C.1, se procede a aplicar la transformada de Fourier a la ecuación de difusión. Este enfoque facilita el tratamiento de las derivadas parciales presentes en la ecuación original, permitiendo su reformulación en términos de las variables de frecuencia.

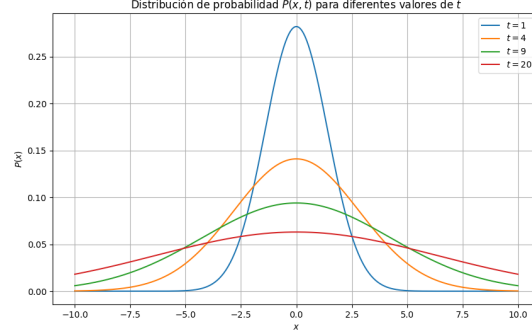


Figura 1.1: Evolución temporal de  $P(x, t)$  para una partícula browniana en espacio libre.

$$\mathcal{F} \left\{ \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} \right\} = \mathcal{F} \left\{ D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \right\} \Leftrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} e^{ikx} dx = D \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} e^{ikx} dx \quad (1.6)$$

Al aplicar la integración por partes dos veces sucesivas a la integral en el lado derecho de la ecuación 1.6, se deduce que:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} P(x, t) e^{ikx} dx = -Dk^2 \int_{-\infty}^{\infty} P(x, t) e^{ikx} dx \Leftrightarrow \frac{\partial P(k, t)}{\partial t} = -Dk^2 P(k, t) \quad (1.7)$$

La solución a la ecuación 1.7 es de la forma  $P(k, t) = P_0 e^{-Dk^2 t}$ , con  $P_0$  una constante sujeta a la condición inicial  $P(x, 0) = \delta(x - x_0)$ . Dado que  $P(k, t = 0) = \int_{-\infty}^{\infty} P(x, 0) e^{ikx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) e^{ikx} dx = e^{ikx_0}$ , se deduce que  $P_0 = e^{ikx_0}$ . Por consiguiente:

$$P(k, t) = e^{-Dk^2 t + ikx_0} \quad (1.8)$$

En virtud de la transformada de Fourier inversa (ver la ecuación C.2), se obtiene que:

$$P(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dk^2 t + ikx_0 - ikx} dk \quad (1.9)$$

La solución de la ecuación (1.9) (véase el desarrollo en el Apéndice C.3, ecuación (C.14)) es:

$$P(x, t) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dt \left[ k + i \frac{(x-x_0)}{2Dt} \right]^2} dk = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}} \quad (1.10)$$

La gráfica de la función de densidad de probabilidad para distintos valores del tiempo  $t$  se muestra en la Figura 1.1.

Partiendo de la expresión hallada para  $P(x, t)$ , mostrada en la ecuación 1.10, se deduce que el desplazamiento cuadrático medio tiene una expresión de la forma [22]:

$$\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (x - x_0)^2 P(x, t | x_0) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (x - x_0)^2 \left[ \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}} \right] dx = 2Dt \quad (1.11)$$

Dado que el coeficiente de difusión  $D$  aparece tanto en la expresión de la función de densidad de probabilidad como en el desplazamiento cuadrático medio, se presenta un método para deducir este coeficiente. A continuación, se detalla la deducción del coeficiente de fricción de Stokes, que es esencial para la expresión del coeficiente de difusión  $D$  hallada por Einstein.

### 1.1.1. Coeficiente de fricción de Stokes

Considérese un flujo incompresible constante bidimensional sujeto a la ecuación  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ , donde  $\mathbf{u} = (u_x, u_y, 0)$  es un campo vectorial que representa la velocidad del fluido.

Imponiendo la existencia de una función real  $\psi$  que satisfaga las condiciones  $\frac{\partial \psi}{\partial y} = u_x$ ,  $-\frac{\partial \psi}{\partial x} = u_y$  y partiendo de la ecuación  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ , entonces:

$$\frac{\partial}{\partial x} (u_x) + \frac{\partial}{\partial y} (u_y) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( -\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = 0 \quad (1.12)$$

La función  $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  describe el flujo de un fluido a lo largo de cualquier curva que conecta a dos puntos  $P_1$  y  $P_2$  definidos sobre el plano  $xy$  y se denomina función de flujo (Ver Figura 1.2). Tal función satisface las siguientes propiedades:

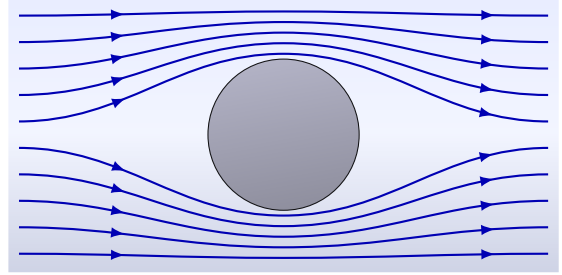


Figura 1.2: Representación del flujo de un fluido alrededor de una esfera.

1.  $\psi$  es constante a lo largo de una línea de corriente de fluido.
2. La tasa de cambio es igual a la diferencia entre los valores de las funciones de flujo respectivas.

Dado un vector  $\mathbf{v}$  tangente a una línea de flujo bidimensional dada por  $y = f(x)$ , donde las componentes cartesianas del vector son  $\mathbf{v} = (v_x, v_y)$ . Por la relación de triángulos semejantes existente entre las diferenciales  $dx$ ,  $dy$  y las respectivas componentes del vector  $\mathbf{v}$ ,  $v_x$  y  $v_y$ , se deduce la relación<sup>1</sup>:  $\frac{dy}{dx} = \frac{v_y}{v_x}$ , por lo tanto,  $v_x dy - v_y dx = 0$ . Partiendo de las relaciones instauradas para las componentes  $v_x$  y  $v_y$ , es decir,  $\frac{\partial \psi}{\partial y} = u_x$ ,  $-\frac{\partial \psi}{\partial x} = u_y$ , entonces:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} dx + \frac{\partial \psi}{\partial y} dy = 0 \quad (1.13)$$

Dada  $\psi$  una función real continua, se cumple que  $d\psi = \frac{\partial \psi}{\partial x} dx + \frac{\partial \psi}{\partial y} dy$ , cuya comparación con la ecuación anterior implica que  $d\psi = 0$ , por lo tanto  $\psi = cte$  a lo largo de la línea de corriente.

Se parte de la ecuación de Navier-Stokes  $\mu \nabla^2 \mathbf{u} = \nabla p$ , así como de la ecuación de incompresibilidad del fluido  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$  para deducir la forma de la función de flujo  $\psi$  y en consecuencia calcular la fuerza hidrodinámica de arrastre del fluido sobre la partícula coloidal.

---

<sup>1</sup>Considérese un triángulo rectángulo cuya hipotenusa es la magnitud del vector  $\mathbf{v}$  y cuyos catetos están dados por las componentes  $v_x$  y  $v_y$ . Análogamente, se consideran las diferenciales  $dx$  y  $dy$ , correspondientes a los catetos de un triángulo semejante de mejor tamaño al anteriormente mencionado. Por triángulos semejantes, se deduce que  $\frac{dy}{dx} = \frac{v_y}{v_x}$

Estableciendo la condición de que el campo vectorial de velocidad del fluido  $\mathbf{u}$  sea bidimensional, con componentes  $\mathbf{u} = (u_r(r, \theta), u_\theta(r, \theta), 0)$  y utilizando la incompresibilidad del fluido,  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ , se deduce que:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 u_r) + \frac{1}{r \text{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta}(\text{sen} \theta u_\theta) = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial r}(r^2 \text{sen} \theta u_r) + \frac{\partial}{\partial \theta}(r \text{sen} \theta u_\theta) = 0 \quad (1.14)$$

Para la satisfacción de la ecuación 1.14, se establece que  $u_r = \frac{1}{r^2 \text{sen} \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta}$  y  $u_\theta = -\frac{1}{r \text{sen} \theta} \frac{\partial \psi}{\partial r}$ , donde la función de flujo  $\psi$  se introduce como parte de las componentes para dar solución a la ecuación 1.14.

Para una esfera inmersa en un campo vectorial de velocidad del fluido, se establecen las siguientes condiciones de frontera:

1. El fluido no se desliza alrededor de la esfera, es decir,  $u_\theta(r, \theta) |_{r=R} = 0$ .

$$\Leftrightarrow -\frac{1}{R \text{sen} \theta} \frac{\partial \psi}{\partial r} |_{r=R} = 0 \quad (1.15)$$

2. No hay penetración del fluido al interior de la esfera, es decir,  $u_r(r, \theta) |_{r=R} = 0$ .

$$\Leftrightarrow \frac{1}{R^2 \text{sen} \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} |_{r=R} = 0 \quad (1.16)$$

3. Para  $r \rightarrow \infty$ , el flujo sea uniforme con rapidez  $u_\infty [1]$ .

La tercera condición de frontera establece que para  $r$  tendiendo al infinito, las componentes  $u_r \sim u_\infty \cos \theta$  y  $u_\theta \sim -u_\infty \sin \theta$  respecto a la base unitaria en coordenadas esféricas,  $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\boldsymbol{\theta}}$ , respectivamente. Por lo tanto,

$$u_r(r, \theta) |_{r \rightarrow \infty} = u_\infty \cos \theta = \frac{1}{r^2 \text{sen} \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \quad \text{y} \quad u_\theta(r, \theta) |_{r \rightarrow \infty} = -u_\infty \text{sen} \theta = -\frac{1}{r \text{sen} \theta} \frac{\partial \psi}{\partial r} \quad (1.17)$$

Resolviendo para  $\psi$  en la ecuación para la componente  $u_r$ , se obtiene que  $\psi(r, \theta) = \frac{1}{2} u_\infty r^2 \text{sen}^2 \theta + c_1$  (esto implica que  $\frac{\partial \psi}{\partial \theta} = u_\infty r^2 \text{sen} \theta + c_1$ ).

Por otra parte, resolviendo para  $\psi$  en la ecuación para la componente  $u_\theta$ , se obtiene (como paso intermedio) que  $\frac{\partial \psi}{\partial r} = u_\infty r \text{sen}^2 \theta$ , por lo que  $\psi(r, \theta) = \frac{1}{2} u_\infty r^2 \text{sen}^2 \theta + c_2$ . Por lo tanto, cuando  $r \rightarrow \infty$ , la función  $\psi$  cumple con la siguiente relación de proporción:

$$\psi(r, \theta) |_{r \rightarrow \infty} \sim \frac{1}{2} u_\infty r^2 \text{sen}^2 \theta \quad (1.18)$$

Partiendo de la existencia de una función indeterminada  $f(r)$ , se propone que la función  $\psi$  sea de la forma  $\psi(r, \theta) = f(r) \text{sen}^2 \theta$ .

Adicionalmente, se sabe de la ecuación de Navier-Stokes que  $\nabla p = \mu \nabla^2 \mathbf{u}$ . Dado el desconocimiento que se tiene sobre la función escalar de la presión  $p$ , se aplica el operador rotacional a ambos lados de la ecuación, por lo que  $\nabla \times \nabla p = \mu \nabla \times \nabla^2 \mathbf{u}$ . Debido a que el rotacional del gradiente de una función escalar es  $\mathbf{0}$ , entonces  $\nabla \times \nabla^2 \mathbf{u} = \mathbf{0}$ . Partiendo de la identidad para campos vectoriales  $\nabla^2 \mathbf{u} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u})$  y con base en la condición de incompresibilidad ( $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ ), su sustitución en la ecuación anterior implica que  $\nabla \times [\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u})] = 0$ , donde  $\mathbf{u} = (u_r(r, \theta), u_\theta(r, \theta), 0) = \left(\frac{1}{r^2 \text{sen} \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta}, -\frac{1}{r \text{sen} \theta} \frac{\partial \psi}{\partial r}, 0\right)$ .

En virtud de la expresión  $\nabla \times [\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u})] = 0$  desarrollada en coordenadas esféricas, se obtiene como consecuencia el siguiente resultado<sup>2</sup>:

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\text{sen}\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right]^2 \psi = 0 \quad (1.20)$$

Se había propuesto  $\psi(r, \theta) = f(r)\text{sen}^2\theta$ , cuya inserción en la ecuación 1.20 conduce a:

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} (f(r)\text{sen}^2\theta) + \frac{\text{sen}\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (f(r)\text{sen}^2\theta) \right) \right]^2 = 0 \quad (1.21)$$

$$\Rightarrow \left[ \text{sen}^2\theta \frac{\partial^2 f(r)}{\partial r^2} + \frac{\text{sen}\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{1}{\text{sen}\theta} 2\text{sen}\theta \cos\theta f(r) \right) \right]^2 = 0 \quad (1.22)$$

$$\Rightarrow \left[ \text{sen}^2\theta \frac{d^2 f(r)}{dr^2} - \text{sen}^2\theta \frac{2f(r)}{r^2} \right]^2 = 0 \Rightarrow \left[ \frac{d^2 f(r)}{dr^2} - \frac{2f(r)}{r^2} \right]^2 = 0 \quad (1.23)$$

Proponiendo  $f(r) \propto c_n r^n$  con  $c_n$  una constante y  $n \in \mathbb{R}$ , la primera derivada es  $f' = nc_n r^{n-1}$  y  $f'' = n(n-1)c_n r^{n-2}$ , entonces:

$$\left[ \frac{d^2 f(r)}{dr^2} - \frac{2f(r)}{r^2} \right] = [n(n-1)c_n r^{n-2} - 2c_n r^{n-2}] = c_n r^{n-2} [(n+1)(n-2)] \equiv g(r) \quad (1.24)$$

Aplicando nuevamente el mismo operador tomando en consideración que  $g' = c_n(n-2)r^{n-3}[(n+1)(n-2)]$  y  $g'' = c_n(n-2)(n-3)r^{n-4}[(n+1)(n-2)]$ :

$$\left[ \frac{d^2 g(r)}{dr^2} - \frac{2g(r)}{r^2} \right] = c_n r^{n-4} [(n-2)(n-3)(n+1)(n-2) - 2(n+1)(n-2)] = 0 \quad (1.25)$$

$$\Leftrightarrow \left[ \frac{d^2 g(r)}{dr^2} - \frac{2g(r)}{r^2} \right] = (n+1)(n-2)(n-1)(n-4)c_n r^{n-4} = 0 \quad (1.26)$$

De donde se deduce que  $n = -1$ ,  $n = 2$ ,  $n = 1$  y  $n = 4$ , por lo tanto:

$$\psi = \left[ \frac{c_{-1}}{r} + c_1 r + c_2 r^2 + c_4 r^4 \right] \text{sen}^2\theta \quad (1.27)$$

Para garantizar la compatibilidad de esta ecuación con la ecuación 1.18, se requiere que  $c_4 = 0$ ,  $c_2 = \frac{u_\infty}{2}$ . Adicionalmente, para satisfacer las condiciones impuestas sobre  $u_r$  y  $u_\theta$  presentadas en 1.15 y 1.16, se requiere que:

$$u_\theta = \frac{1}{r \text{sen}\theta} \frac{\partial \psi}{\partial r} \Big|_{r=R} = 0 \Rightarrow \frac{df(r)}{dr} \Big|_{r=R} = 0 \Leftrightarrow \frac{df(r)}{dr} \Big|_{r=R} = [-c_{-1}r^{-2} + c_2 + 2c_3r] \Big|_{r=R} = 0 \quad (1.28)$$

---

<sup>2</sup>Consultar el apéndice D.1, ecuación D.9, para ver el desarrollo completo.

Tras desarrollar  $\nabla \times [\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u})] = 0$  en coordenadas esféricas, se obtiene la siguiente expresión:

$$\hat{\varphi} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\text{sen}\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right]^2 \psi = 0 \quad (1.19)$$

Debido a que la base vectorial  $\hat{\varphi}$  es distinta de  $\mathbf{0}$ , entonces el escalar que la multiplica es cero.

Por lo tanto,  $c_{-1}R^{-2} + c_2 + 2c_3R = 0$ . Análogamente,

$$u_r = \frac{1}{r^2 \text{sen}\theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \Big|_{r=R} = 0 \Rightarrow f(r) \Big|_{r=R} = 0 \Rightarrow c_{-1}R^{-1} + c_2R + c_3R^2 = 0 \quad (1.29)$$

Por lo tanto,  $c_{-1}R^{-1} + c_2R + c_3R^2 = 0$ , que en conjunción con la ecuación  $c_{-1}R^{-2} + c_2 + 2c_3R = 0$ , se obtiene como solución  $c_{-1} = \frac{c_3R^3}{2}$ . Y como  $c_3 = \frac{u_\infty}{2}$ , entonces  $c_{-1} = \frac{1}{4}u_\infty R^3$ . Similarmente,  $c_2 = \frac{-3}{4}u_\infty R$ . La sustitución de estos coeficientes en la ecuación 1.27, conduce a la expresión:

$$\psi(r, \theta) = \left[ u_\infty \frac{1}{4} \frac{R^3}{r} - u_\infty \frac{3Rr}{4} + u_\infty \frac{r^2}{2} \right] \text{sen}^2 \theta \quad (1.30)$$

Por lo que se concluye que la función de flujo es:

$$\psi = \frac{u_\infty}{2} \left[ r^2 + \frac{R^3}{2r} - \frac{3Rr}{2} \right] \sin^2 \theta \quad (1.31)$$

Con base en las ecuaciones para  $u_r$  y  $u_\theta$  presentadas en 1.17, y tomando las derivadas parciales con respecto a  $\theta$  y  $r$  de  $\psi$  en 1.31, se deduce que:

$$u_r = u_\infty \left[ 1 - \frac{3R}{2r} + \frac{1}{2} \frac{R^3}{r^3} \right] \cos \theta \quad \text{y} \quad u_\theta = -u_\infty \left[ 1 - \frac{3R}{4r} - \frac{1}{4} \frac{R^3}{r^3} \right] \text{sen} \theta \quad (1.32)$$

La ecuación de la presión<sup>3</sup> del fluido está dada por la expresión  $P = P_\infty - \frac{3}{2} \frac{\mu u_\infty R}{r^2} \cos \theta$ . Similarmente, las componentes del tensor de tensiones sobre una esfera son<sup>4</sup>  $t_{rr} = -P + 2\mu \frac{\partial u_r}{\partial r}$ ,  $t_{\theta\theta} = \mu r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_\theta}{r} \right) + \frac{\mu}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta}$  [1, 33].

La tensión en dirección de la fuerza neta que actúa sobre la esfera es  $t = t_{rr} \cos \theta - t_{\theta\theta} \text{sen} \theta = -P_\infty \cos \theta + \frac{3}{2} \frac{\mu u_\infty}{R}$ . Integrando sobre toda la esfera, se obtiene la fuerza total  $F$  que actúa sobre la esfera es:

$$F = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi t R^2 \text{sen} \theta d\theta d\phi = 6\pi \mu R u_\infty \quad (1.33)$$

Se concluye que arrastre sobre la esfera de radio  $R$  (que en este contexto representa a una partícula coloidal), inmersa en un fluido a velocidad constante está dado por  $6\pi \mu R$ , teniendo como consecuencia que  $F = 6\pi \mu R u_\infty$  [20, 37].

A continuación, se llevará a cabo la deducción del coeficiente de difusión según la relación de Stokes-Einstein, utilizando el coeficiente de arrastre derivado en esta sección.

### 1.1.2. Coeficiente de difusión de Einstein

Determinado el coeficiente de fricción de Stokes, el cual es crucial para la expresión definitiva del coeficiente de difusión  $D$ , se expone a continuación la deducción de esta constante.

Considérese un contenedor lleno de agua con una membrana semipermeable de área  $A$  situada en la mitad del contenedor. Al introducir un conjunto de partículas brownianas en el lado izquierdo de la membrana semipermeable, la membrana se desplaza hacia la derecha debido a que la presión en el lado izquierdo de la membrana,  $P_{\text{Izquierda}}$ , es mayor que la presión en el lado derecho,  $P_{\text{Derecha}}$ .

---

<sup>3</sup>Ver el apéndice E para la deducción de dicha ecuación.

<sup>4</sup>Consular el apéndice E para el desarrollo de las expresiones mostradas a continuación

Para restablecer la membrana a su posición inicial, se aplica una fuerza de magnitud  $F_{\text{Equilibrio}} = (P_{\text{Izquierda}} - P_{\text{Derecha}})A$ , que actúa desde el lado derecho hacia el lado izquierdo de la membrana.

Adicionalmente, considérese un volumen arbitrario de agua  $V = A\Delta x$  (con  $\Delta x$  una distancia definida a lo largo del contenedor), que contiene  $N$  partículas brownianas. Dado que la fuerza de restauración de la membrana,  $F_{\text{Equilibrio}}$ , actúa sobre las partículas, estas se encuentran sometidas a una fuerza promedio expresada como:  $f_E = \frac{1}{N} [P_{\text{Izquierda}} - P_{\text{Derecha}}] A = \frac{1}{NV} [P_{\text{Izquierda}} - P_{\text{Derecha}}] A$ .

Definiendo  $f$  como el número de partículas por unidad de volumen, es decir,  $f = \frac{N}{V}$ , se tiene que  $f_E$  se puede expresar como  $f_E = \frac{1}{N\Delta x A} [P_{\text{Izquierda}} - P_{\text{Derecha}}] A$ . Tomando  $\Delta x \rightarrow 0$ , se deduce la relación  $f_E = \frac{1}{f} \frac{dP}{dx}$  y de acuerdo con la ecuación para gases ideales,  $PV = N_A k_B T$ , entonces  $f_E = \frac{1}{f} k_B T \frac{d}{dx} \left( \frac{N}{V} \right) = \frac{1}{f} k_B T \frac{df}{dx}$ .

En adición a la fuerza  $f_E$  producida por la diferencia de presiones, se sabe que una partícula inmersa en un fluido con velocidad  $\frac{dx}{dt}$ , está sujeta a un arrastre en dirección opuesta a la dirección de la velocidad. Por consiguiente, la fuerza de arrastre,  $f_{\text{Arrastre}}$ , es igual a  $-6\pi\mu R$ .

La ecuación de movimiento para las partículas brownianas se expresa como  $m \frac{d^2x}{dt^2} = f_{\text{Arrastre}} + f_E$ . En condiciones de equilibrio, la aceleración es nula, por lo que se deduce que  $f_E = -f_{\text{Arrastre}}$ . Dado que la fuerza de arrastre está relacionada con la velocidad a través de  $f_{\text{Arrastre}} = -\gamma \frac{dx}{dt}$ , se concluye que  $\frac{f_E}{\gamma} = \frac{dx}{dt}$ .

Las partículas experimentan dos tipos de flujo. El primero se refiere al flujo asociado al número de partículas por unidad de volumen que tienen una velocidad  $\frac{dx}{dt}$ . Este flujo se puede expresar como  $j_{\text{Velocidad}} = f(x) \frac{dx}{dt} = f(x) \frac{f_E}{\gamma} = \frac{k_B T}{f_E} \frac{df}{dx} \frac{f_E}{\gamma}$ . El segundo tipo de flujo,  $j_B$ , está relacionado con la difusión y se expresa como  $j_B = -D \frac{df(x)}{dx}$ .

En el equilibrio,  $J = j_{\text{Velocidad}} + j_B = 0$ , por lo que  $\frac{k_B T}{\gamma} \frac{df(x)}{dx} = D \frac{df(x)}{dx}$ , concluyéndose que el coeficiente de difusión  $D$  cumple con la relación  $D = \frac{k_B T}{6\pi\mu R}$ .

## 1.2. Fundamentos de la ecuación de Smoluchowski

La ecuación de Smoluchowski, concebida por Marian Smoluchowski en 1906, emerge como un instrumento fundamental en la descripción de la dinámica de partículas inmersas en un medio líquido, particularmente en el contexto de partículas coloidales. Esta ecuación diferencial parcial describe la evolución temporal de la función de densidad de probabilidad  $P_n(x|x_0)$ , que representa la probabilidad de que una partícula browniana, partiendo de una posición inicial  $x_0$ , se encuentre en la posición  $x$  después de  $n$  pasos [36]. Esta ecuación incorpora consideraciones relevantes como la difusión y la mutua interacción de partículas bajo la influencia de un potencial de interacción. Su formulación matemática se presenta como una ecuación de convección-difusión<sup>5</sup>.

La incorporación de esta ecuación permite analizar la dinámica de micronadadores sujetos a movimiento browniano bajo la influencia de campos externos así como en ausencia de esta.

La dinámica del sistema se estudia bajo tres consideraciones requeridas para el uso del formalismo de Smoluchowski. El primer requerimiento se denomina “Límite sobreamortiguado” (*Overdamped limit*) y consiste en la despreciabilidad de la inercia de las partículas en comparación con las fuerzas de fricción que actúan sobre ellas. El segundo requisito se refiere a la escala de tiempo en la que se estudia el movimiento browniano. Este consiste en describir la posición de las partículas en un

<sup>5</sup>La convección se refiere al transporte advectivo de partículas inducido por un flujo, mientras que la difusión describe el movimiento aleatorio de las partículas en su entorno.

tiempo mayor que el tiempo de relajación del momento traslacional  $\tau_{P_r}$ , el cual está dado por la expresión  $\tau_{P_r} = \frac{M}{\gamma}$ , donde  $M$  representa la masa de la partícula y  $\gamma$  es el coeficiente de fricción. Finalmente, el tercer requisito es que el número de Reynolds sea bajo, lo que sugiere que el flujo es laminar. En este régimen, las fuerzas viscosas predominan sobre las fuerzas inerciales.

### 1.2.1. Partículas Coloidales

Una partícula coloidal es una sustancia sólida o líquida finamente dividida con dimensiones que suelen oscilar entre 1 nanómetro y 1 micrómetro, dispersa en un medio continuo (gas, líquido o sólido). Estas partículas exhiben movimiento browniano y están estabilizadas contra la agregación mediante diversas fuerzas, como la repulsión electrostática, el impedimento estérico o las fuerzas de van der Waals [21].

Manifestándose en un estado intermedio entre soluciones genuinas y suspensiones gruesas, las partículas coloidales se caracterizan por el movimiento browniano, resultado de encuentros incessantes con moléculas solventes. Este comportamiento dinámico, dirigido por la agitación térmica, desempeña un papel fundamental en la estabilidad coloidal y la regulación de fenómenos de transporte.

En resumen, las partículas coloidales emergen como componentes esenciales dentro de sistemas a escala nanométrica, delineando propiedades distintivas que enlazan de manera fluida las escalas molecular y macroscópica.

### 1.2.2. Escalas de Tiempo

En el marco de la dinámica coloidal, la expresión “escala de tiempo” se emplea para describir el lapso temporal durante el cual se desenvuelven los fenómenos y procesos inherentes a las partículas coloidales. Este término encapsula la duración en la cual se manifiestan eventos cruciales, como el movimiento Browniano, la segregación y la difusión, dentro del sistema coloidal.

La diversidad de intervalos temporales en los que se desenvuelven las partículas coloidales del soluto en una solución puede ser clasificada en dos grupos distintos, uno asociado con la inercia de masa de los coloides y otro que abarca periodos de difusión.

#### Tiempo de Relajación del Momento Traslacional

Considérese una partícula coloidal inmersa en un solvente de comportamiento continuo, que tiene una velocidad inicial  $\mathbf{v}_0$  y un momento inicial  $\mathbf{P}_0 = m\mathbf{v}_0$  en el tiempo  $t = 0$ . Suponiendo que la partícula está libre de interacciones causadas por colisiones con otras partículas coloidales y de fuerzas originadas por campos externos, la única fuerza que actúa sobre ella es la fuerza de fricción con el fluido, dada por  $\mathbf{F}_\gamma = -\gamma\mathbf{v}$ , cuya relación se puede expresar equivalentemente por  $\frac{d}{dt}[m\mathbf{v}(t)] = -\gamma\mathbf{v}$ , la cual, a partir de las bases  $\hat{\mathbf{i}}$ ,  $\hat{\mathbf{j}}$  y  $\hat{\mathbf{k}}$  se descompone en las siguientes tres ecuaciones:  $\frac{d}{dt}[mv_x] = -\gamma v_x$ ,  $\frac{d}{dt}[mv_y] = -\gamma v_y$  y  $\frac{d}{dt}[mv_z] = -\gamma v_z$  y la solución para partículas coloidales con masa  $m$  constante y coeficiente de fricción  $\gamma$  constante se expresa mediante la expresión  $v_i = v_{0,i}e^{-\frac{\gamma}{m}t}$ , para  $i = 1, 2, 3$ , respectivamente.

Introduciendo la notación  $\tau_{P_r} = \frac{m}{\gamma}$ , designada como el tiempo de relajación del momento traslacional, la ecuación anterior puede ser expresada de la siguiente manera:

$$v_i = v_{0,i}e^{-\frac{t}{\tau_{P_r}}} \tag{1.34}$$

El decremento en el momento de una partícula coloidal se ve influenciado por el tiempo de relajación del momento,  $\tau_{P_r}$ . Esta magnitud se define a partir de la siguiente expresión para una esfera con radio  $R$ , densidad de masa  $\rho$  y coeficiente de fricción de Stokes  $\gamma = 6\pi\eta R$ , donde  $\eta$  representa la viscosidad del fluido:

$$\tau_{P_r} = \frac{\frac{4\pi}{3}R^3\rho}{6\pi\eta R} = \frac{2\rho R^2}{9\eta} \quad (1.35)$$

Las constantes de tiempo  $\tau_{P_r}$ , que caracterizan el comportamiento dinámico de partículas coloidales con radios en el rango de nanómetros a micrómetros, presentan valores convencionales del orden de un nanosegundo.

En la práctica, el diámetro de una partícula coloidal está en el rango de 1 nm a 1000 nm. Particularmente, para una partícula de radio 100 nm, densidad de masa  $\rho = 2\frac{\text{g}}{\text{ml}} = 2000\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ , inmersa en agua con viscosidad de  $\eta = 0,89 \text{ cP} = 0,00089 \text{ Pa} \cdot \text{s}$  y temperatura  $T = 298 \text{ K}$ , el tiempo de relajación del momento traslacional tiene el valor aproximado  $\tau_{P_r} \sim 4,9 \times 10^{-9} \text{ s}$ . Es evidente que  $\tau_{P_r}$  es del orden de nanosegundos [37].

### Tiempo de Relajación del Momento Angular

La noción de tiempo de relajación del momento angular hace referencia al lapso temporal en el cual el movimiento rotacional de las partículas coloidales logra alcanzar un estado de equilibrio. La significancia de este parámetro en los sistemas de partículas coloidales radica en su papel fundamental al describir el movimiento Browniano rotacional, el cual es inducido por las fluctuaciones térmicas del entorno circundante.

Considerando una esfera con velocidad angular inicial  $\Omega_0$  en el instante  $t = 0$ , inmersa en un solvente que aplica una fuerza de fricción  $\mathbf{F}_\zeta$  sobre la partícula, la segunda ley de Newton conduce a la siguiente relación dinámica:

$$\frac{d}{dt} [I\Omega(t)] = -\zeta\Omega \quad (1.36)$$

Tal ecuación puede expresarse de forma equivalente mediante las siguientes tres ecuaciones:  $\frac{d}{dt} [I\Omega_x] = -\zeta\Omega_x$ ,  $\frac{d}{dt} [I\Omega_y] = -\zeta\Omega_y$  y  $\frac{d}{dt} [I\Omega_z] = -\zeta\Omega_z$ . La solución general correspondientes a estas ecuaciones tiene la siguiente expresión:

$$\Omega_i = \Omega_{o,i} e^{-\frac{\zeta}{I}t} \quad (1.37)$$

donde  $i = 1, 2, 3$ , respectivamente.

El tiempo de disipación del momento angular debido a la fricción de la esfera con el solvente se puede expresar mediante la expresión  $\tau_{P_\theta} = \frac{I}{\zeta}$ . Por ende, la solución a la ecuación 1.37 se puede expresar como:

$$\Omega_i = \Omega_{o,i} e^{-\frac{t}{\tau_{P_\theta}}} \quad (1.38)$$

La disminución en el momento angular de una partícula coloidal se encuentra influida por el tiempo de relajación del momento,  $\tau_{P_\theta}$ . Esta magnitud se define a través de la expresión para una esfera con radio  $R$ , densidad de masa  $\rho$  y coeficiente de fricción  $\zeta$ . Al emplear el resultado  $I = \frac{2}{3}R^2$  para un cascarón esférico (ver el apéndice B, ecuación B.1) y considerar que el coeficiente de fricción es  $\zeta = 8\pi\eta R^3$ , se deduce que  $\tau_{P_\theta} = \frac{\frac{2}{3}mR^2}{8\pi\eta R^3}$ . Expresando la masa con base en la densidad de masa  $\rho$ ,



se obtiene que  $m = \rho \cdot \frac{4}{3}\pi R^3$ , entonces  $I = \frac{2}{5} \left( \rho \cdot \frac{4}{3}\pi R^3 \right) R^2 = \frac{8}{15}\pi\rho R^5$ .

$$\Rightarrow \tau_{P_\theta} = \frac{\frac{8}{15}\pi\rho R^5}{8\pi\eta R^3} = \frac{\rho R^2}{15\eta} \quad (1.39)$$

Comparando con el tiempo de relajación del momento traslacional, se llega a la conclusión de que traslaciones y rotaciones de la esfera decaen en la misma escala de tiempo [37].

### 1.2.3. Funciones de Densidad de Probabilidad

La función de densidad de probabilidad, comúnmente conocida como PDF por sus siglas en inglés, se denota por  $P(\chi, t)$ . Su definición requiere que  $P(\chi, t)d\chi$  represente la probabilidad de que una variable aleatoria  $\chi$  asuma un valor en el intervalo  $(\chi, \chi + d\chi)$  para un instante de tiempo  $t$ .

La PDF es fundamental para modelar la distribución estadística de las partículas coloidales en términos de posición y orientación a lo largo del tiempo, por lo que debe cumplir con requisitos clave, como la normalización, asegurando que la integral sobre todo el espacio de posibles valores sea igual a 1, reflejando la certeza de la existencia de la partícula en alguna ubicación y orientación.

Sea  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$  definido como  $\mathbf{r} = x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k}$ , donde  $\mathbf{r}$  representa el vector de posición del centro de masa de una única partícula coloidal en cualquier instante de tiempo  $t$ . La relación entre la función de densidad de probabilidad y el vector de posición del centro de masa,  $\mathbf{r}$ , se expresa como  $P = P(\mathbf{r}, t)$ . La expresión matemática dada,  $P(\mathbf{r}, t)d\mathbf{r} \equiv P(x, y, z, t)dx dy dz$  representa la probabilidad, en el instante de tiempo  $t$ , de hallar al centro de masa dentro del elemento de volumen  $d\mathbf{r}$  cuya posición es  $\mathbf{r}$ .

El promedio de cualquier función  $f(\mathbf{r})$  se calcula por:

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle(t) = \int d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) P(\mathbf{r}, t) \quad (1.40)$$

donde  $\mathbf{r}$  denota la variable asociada a la función  $f(\mathbf{r})$  y la integral se lleva a cabo sobre todos los posibles estados de posición del centro de masa  $\mathbf{r}$  de la partícula coloidal.

Sea  $\hat{\mathbf{u}} \in \mathbb{R}^3$  definido como  $\hat{\mathbf{u}} = \sin\theta\cos\phi\hat{i} + \sin\theta\sin\phi\hat{j} + \cos\theta\hat{k}$ , tal que  $0 \leq \theta \leq \pi$  y  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ . Este vector  $\hat{\mathbf{u}}$  representa la orientación de una sola partícula coloidal y está definido para cada instante de tiempo  $t$ . La relación de la función de densidad de probabilidad con la orientación  $\hat{\mathbf{u}}$  de la partícula coloidal se expresa como  $P = P(\hat{\mathbf{u}}, t)$ , donde  $P(\hat{\mathbf{u}}, t)d\hat{\mathbf{u}} \equiv P(\hat{\mathbf{u}}, t)\sin\theta d\theta d\phi$  representa la probabilidad, en el instante de tiempo  $t$ , de hallar a la orientación dentro del elemento de área  $d\hat{\mathbf{u}} = \sin\theta d\theta d\phi$ .

El promedio de cualquier función  $f(\hat{\mathbf{u}})$  se calcula por,

$$\langle f(\hat{\mathbf{u}}) \rangle(t) = \int d\hat{\mathbf{u}} f(\hat{\mathbf{u}}) P(\hat{\mathbf{u}}, t) \quad (1.41)$$

donde  $\hat{\mathbf{u}}$  representa la variable asociada a la función  $f(\hat{\mathbf{u}})$  y la integral se realiza sobre todos los posibles estados de orientación  $\hat{\mathbf{u}}$  de la partícula coloidal.

### 1.2.4. Ensamble Canónico

El ensemble constituye un concepto holístico que engloba sistemas macroscópicos idénticos, los cuales se encuentran en todos los estados posibles bajo condiciones especificadas. Estas condiciones

abarcan factores externos, como volumen y temperatura, así como características internas, tales como el número de partículas de cada tipo. La naturaleza intrínseca del ensemble se ve determinada por sus interacciones con el entorno, definiendo así las condiciones, entendidas como un conjunto de variables independientes, que regulan los sistemas macroscópicos dentro del conjunto.

Un ensemble canónico en el contexto de la mecánica estadística es un constructo teórico utilizado para caracterizar el comportamiento estadístico de un sistema que está en equilibrio térmico con un reservorio infinito de calor a temperatura constante. Dentro de este ensemble, se le permite al sistema intercambiar energía con el reservorio mientras se mantiene aislado de cualquier otra influencia externa. La función de distribución de probabilidad para el ensemble canónico se define por la distribución de Boltzman, que especifica la probabilidad de que el sistema ocupe un microestado particular a una temperatura determinada [43].

### 1.3. Ecuación de Smoluchowski

Considerando una colección infinita de sistemas macroscópicos idénticos, aislados del entorno, donde cada sistema contiene el mismo número de moléculas de un fluido y mantiene temperatura y volumen constantes, y que incorpora una única partícula coloidal inmersa en el solvente, denominaremos a esta configuración como un ensemble NVT. La aislación del ensemble con respecto a su entorno implica la ausencia de intercambio de calor, masa o volumen entre el ensemble y su entorno. Postúlese  $\mathbf{r}$  como el vector de posición del centro de masa de una sola partícula coloidal en relación con el sistema macroscópico al que pertenece. Para un determinado instante de tiempo  $t$ , la posición del centro de masa para cada partícula coloidal en su respectivo sistema del ensemble canónico se puede representar mediante una distribución de puntos en  $\mathbb{R}^3$ .

Sea  $\Phi_1 : D \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$  la parametrización de una superficie, donde  $D$  es algún dominio de  $\mathbb{R}^2$ . La imagen de  $\Phi_1$  está dada por la expresión  $\Phi_1(D) = \Upsilon$ . El volumen encerrado por la frontera  $\partial\Upsilon$  será representado por  $\Upsilon$ . Consultar la Figura 1.3.

Adicionalmente, considérese  $\hat{\mathbf{u}}$  como el vector de orientación de una sola partícula coloidal en su respectivo sistema macroscópico. Para un determinado instante de tiempo  $t$ , la orientación para cada partícula coloidal en su respectivo sistema del ensemble canónico se puede representar por una distribución de puntos en  $\mathbb{R}^2$  definida sobre una esfera unitaria.

Sea  $\Phi_2 : D' \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$  la parametrización de una superficie, donde  $D'$  es algún dominio de  $\mathbb{R}^2$ . La imagen de  $\Phi_2$  está dada por la expresión  $\Phi_2(D') = \Lambda$ . Sobre esta superficie, se introduce la frontera arbitraria  $\partial\Lambda$ , la cual está definida como un subconjunto del plano bidimensional  $\mathbb{R}^2$  y se sitúa sobre la superficie esférica unitaria. Consultar la Figura 1.4.

Sea  $N(t)$  una función de  $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  que describe el número de puntos  $N$  dentro de un volumen  $\Upsilon$  en relación con el tiempo  $t$ . La conexión con la función de densidad de probabilidad  $P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)$  se establece mediante la siguiente expresión integral, donde  $d\hat{\mathbf{u}}$  denota un elemento diferencial de área sobre la superficie esférica (y no un vector):

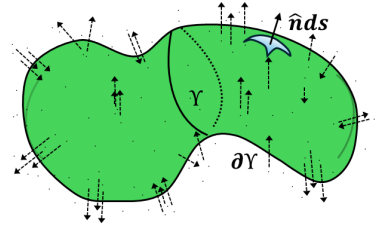


Figura 1.3: Superficie tridimensional cerrada con flujo de partículas coloidales, indicado por flechas hacia afuera y hacia adentro.  $\hat{\mathbf{n}}ds$  denota un vector unitario perpendicular a un elemento de superficie de área  $ds$ .

$$N(t) = \int_{\Upsilon} d\mathbf{r} \int_{\Lambda} d\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \quad (1.42)$$

Por lo que la evolución temporal del número de partículas contenidas por el volumen es:

$$\frac{dN(t)}{dt} = \int_{\Upsilon} d\mathbf{r} \int_{\Lambda} d\hat{\mathbf{u}} \frac{\partial P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)}{\partial t} \quad (1.43)$$

Sea  $j(\mathbf{r}, t)$  el vector cuya magnitud corresponde al número de puntos que atraviesan una unidad de área superficial en  $\partial\Upsilon$  por unidad de tiempo. La superficie es perpendicular a la dirección de  $j$ , y el vector se orienta a lo largo de la velocidad térmica local promedio de las partículas, cuya expresión es la siguiente:

$$j(\mathbf{r}, t) = \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)P(\mathbf{r}, t) \quad (1.44)$$

Debido a que la componente perpendicular al vector normal definido sobre la frontera  $\partial\Upsilon$  no contribuye al flujo de puntos tanto al interior como al exterior de la precedente, se considera la proyección de  $j(\mathbf{r}, t)$  sobre el vector normal a la frontera  $\partial\Upsilon$ . Se define:

$$j_{\text{tras}}(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{n}}_{\partial\Upsilon} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)P(\mathbf{r}, t) \quad (1.45)$$

Adicionalmente, se define  $j(\hat{\mathbf{u}}, t)$  como el vector cuya magnitud representa al número de puntos que atraviesan una unidad de longitud por unidad de tiempo respecto la frontera arbitraria  $\partial\Lambda$  definida sobre la esfera unitaria. Su expresión se describe como,

$$j(\hat{\mathbf{u}}, t) = \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial t} P(\hat{\mathbf{u}}, t) \quad (1.46)$$

Considerando que la componente perpendicular al vector normal, definido sobre la frontera  $\partial\Lambda$ , tiene una influencia marginal en el flujo de puntos tanto hacia el interior como hacia el exterior de la región previamente mencionada, se procede a considerar la proyección de  $j(\hat{\mathbf{u}}, t)$  sobre el vector normal a dicha frontera  $\partial\Lambda$ . Esta proyección se define de la siguiente manera:

$$j_{\text{rot}}(\hat{\mathbf{u}}, t) = \hat{\mathbf{n}}_{\partial\Lambda} \cdot \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial t} P(\hat{\mathbf{u}}, t) \quad (1.47)$$

Sea  $\hat{\mathbf{I}}$  un vector unitario tangente a la frontera  $\partial\Lambda$  orientado en sentido antihorario. Dado el vector unitario de orientación  $\hat{\mathbf{u}}$ , se cumple la relación  $\hat{\mathbf{n}}_{\partial\Lambda} = \hat{\mathbf{I}} \times \hat{\mathbf{u}}$ . Por consiguiente,

$$j_{\text{rot}}(\hat{\mathbf{u}}, t) = \left( \hat{\mathbf{I}} \times \hat{\mathbf{u}} \right) \cdot \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial t} P(\hat{\mathbf{u}}, t) \quad (1.48)$$

Sea un conjunto de tres vectores distintos cualesquiera, representados por  $\vec{u}, \vec{v}, \vec{w}$ , se utiliza la identidad  $(\vec{u} \times \vec{v}) \cdot \vec{w} = \vec{u} \cdot (\vec{v} \times \vec{w})$ . Por consiguiente:

$$j_{\text{rot}}(\hat{\mathbf{u}}, t) = \hat{\mathbf{I}} \cdot \left( \hat{\mathbf{u}} \times \frac{d\hat{\mathbf{u}}}{dt} \right) P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \quad (1.49)$$

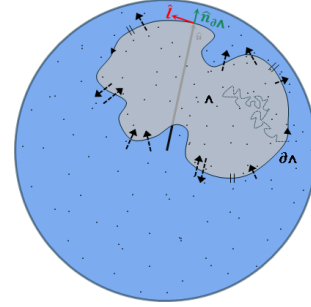


Figura 1.4: Curva cerrada  $\partial\Lambda$  sobre una esfera unitaria.  $\hat{\mathbf{n}}_{\partial\Lambda}$  es el vector normal unitario y  $\hat{\mathbf{l}}$  es el tangencial.

La ecuación 1.43 es equivalente a:

$$\frac{dN(t)}{dt} = - \oint_{\partial\Upsilon} dS \int_{\Lambda} d\hat{u} [j_{\text{tras}}] - \int_{\Upsilon} d\mathbf{r} \oint_{\partial\Lambda} dl [j_{\text{rot}}] \quad (1.50)$$

Donde el signo negativo que precede a ambas integrales tiene su origen en el decremento de probabilidad de hallar a la partícula tanto al interior de la frontera  $\partial\Upsilon$  como de la frontera  $\partial\Lambda$ .

Derivado de las ecuaciones 1.47 y 1.49, se obtiene:

$$\frac{dN(t)}{dt} = - \oint_{\partial\Upsilon} dS \int_{\Lambda} d\hat{u} [\hat{\mathbf{n}}_{\partial\Upsilon} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) P(\mathbf{r}, t)] - \int_{\Upsilon} d\mathbf{r} \oint_{\partial\Lambda} dl \left[ \hat{\mathbf{l}} \cdot \left( \mathbf{u} \times \frac{d\hat{\mathbf{u}}}{dt} \right) P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \right] \quad (1.51)$$

$$\Leftrightarrow \frac{dN(t)}{dt} = - \int_{\Lambda} d\hat{u} \oint_{\partial\Upsilon} dS (\hat{\mathbf{n}}_{\partial\Upsilon}) \cdot (\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) P(\mathbf{r}, t)) - \int_{\Upsilon} d\mathbf{r} \oint_{\partial\Lambda} dl \hat{\mathbf{l}} \cdot \left( \mathbf{u} \times \frac{d\hat{\mathbf{u}}}{dt} \right) P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \quad (1.52)$$

Al aplicar el teorema de Stokes, se deduce<sup>6</sup> que:

$$\begin{aligned} \frac{dN(t)}{dt} &= - \int_{\Lambda} d\hat{u} \oint_{\partial\Upsilon} dS (\hat{\mathbf{n}}_{\partial\Upsilon}) \cdot (\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) P(\mathbf{r}, t)) - \int_{\Upsilon} d\mathbf{r} \int_{\Lambda} \nabla_{\hat{\mathbf{u}}} \times \left( \hat{\mathbf{u}} \times \frac{d\hat{\mathbf{u}}}{dt} \right) P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \cdot (\hat{\mathbf{u}}) d\hat{u} \quad (1.53) \\ &= - \int_{\Lambda} d\hat{u} \oint_{\partial\Upsilon} dS (\hat{\mathbf{n}}_{\partial\Upsilon}) \cdot (\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) P(\mathbf{r}, t)) - \int_{\Upsilon} d\mathbf{r} \int_{\Lambda} \hat{\mathbf{u}} \cdot \left[ \nabla_{\hat{\mathbf{u}}} \times \left( \hat{\mathbf{u}} \times \frac{d\hat{\mathbf{u}}}{dt} \right) \right] P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) d\hat{u} \end{aligned}$$

En virtud de la propiedad  $\vec{A} \cdot (\nabla \times \vec{B}) = (\vec{A} \times \nabla) \cdot \vec{B}$ , se establece:

$$\frac{dN(t)}{dt} = - \int_{\Lambda} d\hat{u} \oint_{\partial\Upsilon} dS (\hat{\mathbf{n}}_{\partial\Upsilon}) \cdot (\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) P(\mathbf{r}, t)) - \int_{\Upsilon} d\mathbf{r} \int_{\Lambda} \left[ (\hat{\mathbf{u}} \times \nabla_{\hat{\mathbf{u}}}) \cdot \left( \hat{\mathbf{u}} \times \frac{d\hat{\mathbf{u}}}{dt} \right) \right] P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) d\hat{u} \quad (1.54)$$

Se define el operador de rotación como  $\hat{\mathbf{R}} \equiv \hat{\mathbf{u}} \times \nabla_{\hat{\mathbf{u}}}$ . De manera análoga, la velocidad térmica de rotación promediada será denotada por  $\hat{\mathbf{\Omega}} \equiv \hat{\mathbf{u}} \times \frac{d\hat{\mathbf{u}}}{dt}$ . Por consiguiente:

$$\frac{dN(t)}{dt} = - \int_{\Lambda} d\hat{u} \oint_{\partial\Upsilon} dS (\hat{\mathbf{n}}_{\partial\Upsilon}) \cdot (\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) P(\mathbf{r}, t)) - \int_{\Upsilon} d\mathbf{r} \int_{\Lambda} (\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{\Omega}}) P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) d\hat{u} \quad (1.55)$$

Al aplicar el teorema de la divergencia, se deduce que:

$$\frac{dN(t)}{dt} = - \int_{\Lambda} d\hat{u} \int_{\Upsilon} \nabla \cdot [\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) P(\mathbf{r}, t)] d\mathbf{r} - \int_{\Upsilon} d\mathbf{r} \int_{\Lambda} (\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{\Omega}}) P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) d\hat{u} \quad (1.56)$$

$$\Rightarrow \frac{dN(t)}{dt} = - \int_{\Upsilon} d\mathbf{r} \int_{\Lambda} d\hat{u} \left\{ \nabla \cdot [\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) P(\mathbf{r}, t)] + (\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{\Omega}}) P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \right\} \quad (1.57)$$

<sup>6</sup>Para establecer la igualdad, definimos al operador rotacional por:  $\nabla_{\hat{\mathbf{u}}} \equiv \frac{\partial}{\partial u_x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial u_y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial u_z} \hat{k}$

Comparando con la ecuación 1.43, se concluye que [18, 14]:

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot [\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)P(\mathbf{r}, t)] - \hat{\mathbf{R}} \cdot [\boldsymbol{\Omega}P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)] \quad (1.58)$$

Con base en la ecuación de continuidad 1.58 para una velocidad térmica de rotación promediada  $\boldsymbol{\Omega} = 0$ , se deduce que, para obtener la ecuación de difusión de Fick, es decir,  $\frac{\partial P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)}{\partial t} = D\nabla^2 P(\mathbf{r}, t)$ , se debe cumplir la igualdad  $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)P(\mathbf{r}, t) = -D\nabla P(\mathbf{r}, t)$ .

En el formalismo de Smoluchowski, se argumenta que la presencia de una fuerza  $F(x)$  genera una corriente advectiva, denotada por  $j_{\text{Ad}}$ , dada por el producto de la función de densidad de probabilidad y la velocidad promedio de la partícula coloidal, es decir,  $j_{\text{Ad}} = \langle \dot{x} \rangle P$ . Esta corriente, junto con la corriente browniana  $j_B$ , obtenida en la deducción de la ecuación de difusión de Fick, constituyen un flujo neto denotado por  $J$ , de manera que  $J = j_{\text{Ad}} + j_B = -D\frac{\partial P}{\partial x} + \langle \dot{x} \rangle P$ .

Sea  $\mathbf{F}$  el conjunto de fuerzas que actúan sobre una partícula coloidal, excluyendo las fuerzas inerciales y de fricción. Entonces,  $\mathbf{F}^{\text{Tot}} = \mathbf{F} - \zeta\mathbf{v} = 0$ . La velocidad promedio de la partícula bajo la influencia de la fuerza  $\mathbf{F}$  es  $\mathbf{v} = \frac{\mathbf{F}}{\zeta}$ . Por lo tanto, se deduce que  $J = -D\frac{\partial P(x,t)}{\partial x} + \frac{\mathbf{F}}{\zeta}P(x,t)$ . Dada la ecuación de difusión de Fick en la forma  $\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x}$ , se deduce que

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -D\frac{\partial}{\partial x} \left[ -\frac{\partial P}{\partial x} - \frac{1}{\zeta D} \frac{\partial v(x)}{\partial x} P \right],$$

donde la igualdad  $\zeta D = k_B T$  se deriva de la mecánica estadística, como se mostrará en la siguiente subsección. Por lo tanto:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -D\frac{\partial}{\partial x} \left[ -\frac{\partial P(x,t)}{\partial x} - \frac{1}{k_B T} \frac{\partial v(x)}{\partial x} P(x,t) \right]. \quad (1.59)$$

Esta ecuación se conoce como la ecuación de Smoluchowski en una dimensión. Para extenderla a tres dimensiones, se deduce que  $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = -D[\nabla P(\mathbf{r}, t) + \beta P(\mathbf{r}, t)\nabla V(\mathbf{r})]$ , donde  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ . Sustituyendo esta expresión en la ecuación 1.58 para  $\boldsymbol{\Omega} = 0$  se obtiene:

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D\nabla \cdot [\nabla P(\mathbf{r}, t) + \beta P(\mathbf{r}, t)\nabla V(\mathbf{r})]. \quad (1.60)$$

### 1.3.1. Fuerza browniana

Es fundamental destacar que la escala de tiempo difusiva permite ignorar a las fuerzas inerciales que actúan sobre las partículas coloidales consideradas. La fuerza neta ejercida sobre la partícula browniana puede tomarse como la fuerza de fricción ejercida sobre tal partícula, por lo que:

$$\mathbf{F}^{\text{neta}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = -\zeta\mathbf{v}(t) \Leftrightarrow \mathbf{v}(t) = -\frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)}{\zeta} \quad (1.61)$$

Donde  $\mathbf{v}(t)$  es la velocidad traslacional promedio de las partículas coloidales. Partiendo de la ecuación 1.58 con un vector de orientación  $\hat{\mathbf{u}}$  igual al vector nulo, se obtiene que:

$$\frac{P(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot \left[ -\frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)}{\zeta} P(\mathbf{r}, t) \right] \quad (1.62)$$

Partiendo de la ecuación de difusión de Fick para  $P(\mathbf{r}, t)$ , representada por la ecuación  $\frac{\partial P(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D\nabla \cdot \nabla P(\mathbf{r}, t)$  y comparando con la ecuación 1.62, se deduce que:

$$\nabla \cdot \left[ -\frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)}{\zeta} P(\mathbf{r}, t) \right] = D\nabla \cdot \nabla P(\mathbf{r}, t) \Rightarrow D\nabla P(\mathbf{r}, t) = -\frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)}{\zeta} P(\mathbf{r}, t) \quad (1.63)$$

$$\Rightarrow \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = -(D\zeta) \frac{1}{P(\mathbf{r}, t)} \nabla P(\mathbf{r}, t) \quad (1.64)$$

Finalmente:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \equiv \mathbf{F}^{Br}(\mathbf{r}, t) = -(D\zeta) \nabla [\ln P(\mathbf{r}, t)] \quad (1.65)$$

Para describir las fuerzas que actúan sobre una partícula en movimiento browniano, excluyendo las influencias de campos externos, se utiliza la notación  $\mathbf{F}^{Br}$ . Estas fuerzas se denominan fuerzas brownianas. Para analizar la influencia de una fuerza ejercida sobre la partícula coloidal, inducida por un campo externo al sistema, se parte del supuesto de que dicha fuerza es derivable a partir de un potencial. La adición de esta fuerza junto con la fuerza browniana  $\mathbf{F}^{Br}$  permite considerar todas las fuerzas relevantes que actúan sobre la partícula. Este enfoque posibilita, en ciertos casos, la determinación de la función de densidad de probabilidad  $P(\mathbf{r}, t)$ .

Considérese un campo eléctrico de magnitud constante que actúa sobre una partícula browniana en dirección del eje  $z$ , descrito por la expresión  $\mathbf{E} = E_0 \hat{\mathbf{k}}$ . La fuerza producida por el campo eléctrico sobre la partícula browniana se expresa como  $\mathbf{F}_q = qE_0 \hat{\mathbf{k}} = -q\nabla(E_0 z)$ . Por lo tanto, la fuerza neta que actúa sobre el sistema es  $\mathbf{F}(z, t) = -\zeta D\nabla \ln P(z, t) - q\nabla(E_0 z)$ , cuya sustitución en la ecuación 1.62 permite deducir que:

$$\frac{\partial P(z, t)}{\partial t} = \nabla \cdot \left[ D\nabla \ln P(z, t) + \frac{q}{\zeta} \nabla(E_0 z) \right] \quad (1.66)$$

La solución de la ecuación 1.66, bajo las condiciones  $\frac{\partial P_{eq}}{\partial t} = 0$  y  $D\nabla \ln P_{eq}(z, t) + \frac{q}{\zeta} \nabla(E_0 z) = 0$  [22], se obtiene de la siguiente manera. Dado que  $D\nabla \ln P_{eq}(z) = -\frac{q}{\zeta} \nabla(E_0 z)$ , se sigue que  $\frac{\partial \ln P_{eq}}{\partial z} = -\frac{qE_0}{D\zeta}$ . Por lo tanto,  $P_{eq}(z) = \frac{1}{z'} e^{-\frac{qE_0 z}{D\zeta}}$ , donde  $z'$  es una constante de normalización.

Por otra parte, en la mecánica estadística, la probabilidad dada por la aproximación de Boltzmann es  $P_{eq} \sim e^{-\beta\phi(\vec{r}, t)} = \frac{1}{z} e^{-\beta\phi(\vec{r}, t)}$ , donde  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ,  $\phi(\vec{r}, t)$  es un potencial arbitrario y  $z$  es una constante de normalización. La comparación de  $P_{eq}(z) = \frac{1}{z'} e^{-\frac{qE_0 z}{D\zeta}}$  con  $P_{eq} = \frac{1}{z} e^{-\beta\phi(\vec{r}, t)}$  permite deducir que el coeficiente de difusión cumple con la relación  $D = \frac{k_B T}{\zeta}$ . Esta relación coincide con el valor hallado por Einstein para  $D$ . Por lo tanto, se concluye que  $P_{eq}(z) \sim e^{-\frac{qE_0 z}{k_B T}}$ .

## 1.4. Ecuación de Smoluchowski para N partículas

Considerando una colección infinita de sistemas macroscópicos idénticos, aislados del entorno, donde cada sistema contiene el mismo número de moléculas de un fluido y mantiene temperatura y volumen constantes, y que incorpora N partículas coloidales inmersas en el solvente, denominaremos a esta configuración como un ensamble. La aislación del ensamble con respecto a su entorno implica la ausencia de intercambio de calor, masa o volumen entre el ensamble y su entorno.

Postúlese  $\mathbf{r}^N$  como el vector de posición del centro de masa de la N-ésima partícula coloidal en el sistema macroscópico al que pertenece.

Similarmente, considérese  $\hat{\mathbf{u}}^N$  como el vector de orientación de la N-ésima partícula coloidal uniaxial en relación con el sistema macroscópico al que pertenece.

La ecuación de Smoluchowski para N partículas es [18]:

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}})}{\partial t} = - \sum_{j=1}^N \left\{ \nabla_j \cdot [\mathbf{v}_j P(\mathbf{r}^N, \hat{\mathbf{u}}^N, t)] + \hat{R}_j \cdot [\boldsymbol{\Omega}_j P(\mathbf{r}^N, \hat{\mathbf{u}}^N, t)] \right\} \quad (1.67)$$

En la escala difusiva, las coordenadas del momento traslacional y angular están en equilibrio con el baño térmico de las moléculas del solvente. Se tiene que las fuerzas y torcas que actúan sobre la partícula cumplen con:

$$m \frac{d\mathbf{v}_j}{dx} = \mathbf{F}_j^H + \mathbf{F}_j^I + \mathbf{F}_j^{Br} = 0 \quad (1.68)$$

$$m \frac{d\boldsymbol{\Omega}_j}{dx} = \tau_j^H + \tau_j^I + \tau_j^{Br} = 0 \quad (1.69)$$

Considerando que las fuerzas adoptan una configuración específica, se establecen las siguientes expresiones para las fuerzas actuantes en el sistema:  $\mathbf{F}_j^H = -\gamma_t \mathbf{v}_j$ ,  $\mathbf{F}_j^I = -\nabla_j \Phi(\mathbf{r}^N, \hat{\mathbf{u}}^N)$ ,  $\mathbf{F}_j^{Br} = -k_B T \nabla_{\mathbf{r}_j} \ln P$ .

De manera análoga, se establecen las siguientes definiciones para los momentos de la fuerza presentes en el sistema:  $\tau_j^H = -\gamma_r \boldsymbol{\Omega}_j$ ,  $\tau_j^I = -\hat{\mathbf{R}}_j \Phi(\mathbf{R}^N, \hat{\mathbf{u}}^N)$  y  $\tau_j^{Br} = -k_B T \hat{\mathbf{R}}_j \ln P$ .

En primer lugar, se presenta la ecuación:

$$-\gamma_t \mathbf{v}_j - \nabla_j \Phi(\mathbf{r}^N, \hat{\mathbf{u}}^N) - k_B T \nabla_{\mathbf{r}_j} \ln P = 0 \quad (1.70)$$

La cual es equivalente a:

$$\mathbf{v}_j = \beta D_t [-\nabla_j \Phi(\mathbf{r}^N, \hat{\mathbf{u}}^N) - k_B T \nabla_{\mathbf{r}_j} \ln P] \quad (1.71)$$

donde se han introducido las constantes  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  y  $D_t = \frac{k_B T}{\gamma_t}$ .

De forma análoga,

$$-\gamma_r \boldsymbol{\Omega}_j - \hat{\mathbf{R}}_j \Phi(\mathbf{R}^N, \hat{\mathbf{u}}^N) - k_B T \hat{\mathbf{R}}_j \ln P = 0 \quad (1.72)$$

De esta deducción se obtiene la expresión:

$$\boldsymbol{\Omega}_j = \beta D_r (-\hat{\mathbf{R}}_j \Phi - k_B T \hat{\mathbf{R}}_j \ln P) \quad (1.73)$$

La dinámica del sistema se expresa mediante la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}^N, \hat{\mathbf{u}}^N, t)}{\partial t} = \sum_{j=1}^N \left\{ D_t \nabla_{\mathbf{r}_j} \cdot [\beta \nabla_{\mathbf{r}_j} \Phi(\mathbf{r}^N, \hat{\mathbf{u}}^N, t) + \nabla_{\mathbf{r}_j}] + D_r \hat{\mathbf{R}}_j \cdot [\beta \hat{\mathbf{R}}_j \Phi(\mathbf{r}^N, \hat{\mathbf{u}}^N, t) + \hat{\mathbf{R}}_j] \right\} P(\mathbf{r}^N, \hat{\mathbf{u}}^N, t) \quad (1.74)$$

Donde se introduce el operador  $\mathcal{L}_s$  de la siguiente manera:

$$\mathcal{L}_s(\mathbf{r}^N, \hat{\mathbf{u}}) = \sum_{j=1}^N \left\{ D_t \nabla_{\mathbf{r}_j} \cdot [\beta \nabla_{\mathbf{r}_j} \Phi(\mathbf{r}^N, \hat{\mathbf{u}}^N, t) + \nabla_{\mathbf{r}_j}] + D_r \hat{\mathbf{R}}_j \cdot [\beta \hat{\mathbf{R}}_j \Phi(\mathbf{r}^N, \hat{\mathbf{u}}^N, t) + \hat{\mathbf{R}}_j] \right\} \quad (1.75)$$

Finalmente, se obtiene la relación expresada de manera compacta:

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}^N, \hat{\mathbf{u}}^N, t)}{\partial t} = \mathcal{L}_s P(\mathbf{r}^N, \hat{\mathbf{u}}, t) \quad (1.76)$$

### 1.4.1. Ecuación de difusión de un micronadador esférico

La locomoción y el transporte de microorganismos en fluidos son aspectos fundamentales de la vida. La capacidad de moverse permite a los microorganismos buscar alimentos, evitar depredadores y formar colonias, siendo esencial para su supervivencia. En la microescala, el movimiento de los micronadadores ocurre en condiciones de bajos números de Reynolds, donde la viscosidad y la fricción del fluido predominan sobre la inercia.

Entre los ejemplos destacados de micronadadores se encuentran los espermatozoides, bacterias como *Escherichia coli*, *Euglena*, rotíferos y diversos protozoos como *Paramecium* y *Amoeba* (consultar las Figuras 1.5 y 1.6). Estos organismos unicelulares presentan tamaños que varían desde unos pocos hasta varias decenas de micrómetros. Su morfología y dimensiones están adaptadas para optimizar la eficiencia en la locomoción a través de fluidos viscosos.

Los mecanismos de movimiento de estos microorganismos son variados y complejos. Las bacterias utilizan flagelos para impulsarse, mientras que los espermatozoides se desplazan gracias a la ondulación de su cola. Los protozoos, como los paramecios, emplean cilios para nadar. Estos métodos de locomoción son esenciales para la quimiotaxis, el movimiento dirigido en respuesta a gradientes de sustancias químicas, permitiendo a los microorganismos localizar fuentes de alimento. Además de la quimiotaxis, otros fenómenos como la gravitaxis y la fototaxis juegan roles cruciales en la adaptación de los microorganismos a su entorno. La gravitaxis es el movimiento en respuesta a la gravedad, mientras que la fototaxis es el movimiento hacia áreas con mayor iluminación, importante para organismos fotosintéticos [16].

La comprensión de la locomoción de los micronadadores no solo es fundamental para la biología y la ecología, sino que también tiene aplicaciones en medicina y ingeniería, como el desarrollo de microrobots y sistemas de entrega de fármacos a nivel celular. Además, el movimiento de los micronadadores puede ser influenciado por el movimiento browniano, que describe la trayectoria aleatoria de partículas suspendidas en un fluido debido a las colisiones con las moléculas del líquido. Este comportamiento estocástico es relevante en la microescala y es descrito matemáticamente por el modelo de Smoluchowski, permitiendo analizar y predecir el comportamiento de los micronadadores en diversas condiciones.

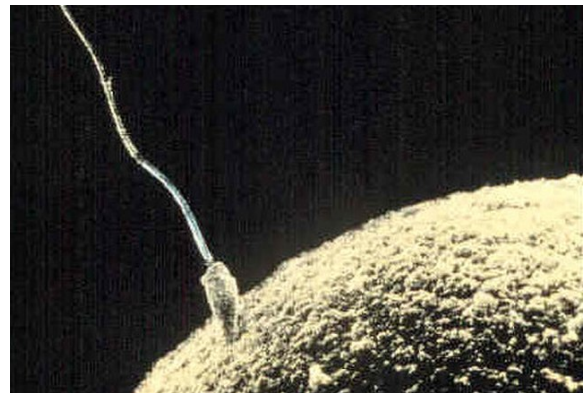


Figura 1.5: Espermatozoide. Imagen proporcionada por el Centro para el Control y la Prevención de Enfermedades (CDC), dominio público.



Figura 1.6: Bacteria *E. coli*, amplificada. Foto por ftkfrErbe, colorización digital por Christopher Pooley. Dominio público.



Las partículas brownianas activas, a diferencia de las pasivas, se alejan del equilibrio debido a su propio impulso. Estos procesos biológicos que tienen lugar en sistemas no equilibrados pueden ser analizados efectivamente a través de la teoría de micronadadores, proporcionando una comprensión más profunda de sus dinámicas en ambientes complejos.

Considerando la fuerza de fricción que actúa sobre la partícula en el fluido,  $\mathbf{F}^h = -\zeta\mathbf{v} + \zeta v_0\hat{\mathbf{u}}$ , y la fuerza browniana  $\mathbf{F}^{Br} = -\left(\frac{k_B T}{\zeta}\right)\zeta\nabla\ln P$ , el equilibrio entre ambas fuerzas conduce a la siguiente expresión:

$$-\zeta(\mathbf{v} - v_0\hat{\mathbf{u}}) - k_B T \nabla \ln P = 0 \quad (1.77)$$

Postulando:

$$\mathbf{v} = v_0\hat{\mathbf{u}} - D_t \nabla \ln P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \quad (1.78)$$

donde  $D_t = \frac{k_B T}{\zeta}$  denota el coeficiente de difusión traslacional.

Adicionalmente, el balance de momentos de fuerza se expresa como:

$$\tau^T = \tau^{Br} + \tau^h = -K_B T \hat{\mathbf{R}} \ln P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) - \gamma_r \boldsymbol{\Omega} = 0 \quad (1.79)$$

$$\boldsymbol{\Omega} = \left(\frac{-K_B T}{\gamma_t}\right) \hat{\mathbf{R}} \ln P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) = D_r \left(\frac{1}{P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)}\right) \hat{\mathbf{R}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \quad (1.80)$$

Sustituyendo en la ecuación<sup>7</sup> 1.58:

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot (v_0 P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \hat{\mathbf{u}} - D_t \nabla P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)) - \hat{\mathbf{R}} \cdot \left[ -D_r \left(\frac{1}{P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)}\right) \hat{\mathbf{R}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \right] P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t). \quad (1.82)$$

Esta ecuación corresponde a la ecuación de difusión para un micronadador esférico.

### 1.4.2. Desplazamiento cuadrático medio de un micronadador esférico

Multiplicando por  $r^2$  a la partial con respecto a  $t$  de la función de densidad de probabilidad  $P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)$  y realizando una integración respecto a las variables  $\mathbf{r}$  y  $\hat{\mathbf{u}}$ , respectivamente:

$$\int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} r^2 \frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) = \frac{d}{dt} \left[ \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} r^2 P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \right] \equiv \frac{d \langle r^2 \rangle (t)}{dt} \quad (1.83)$$

La igualdad precedente equivale a la siguiente expresión:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle r^2 \rangle (t) \equiv \frac{d}{dt} W(t) = - \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} r^2 \nabla \cdot [v_0 \hat{\mathbf{u}} P] + D_t \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} r^2 \nabla^2 P + D_r \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} r^2 \hat{\mathbf{R}}^2 P \quad (1.84)$$

---

<sup>7</sup>La ecuación de Smoluchowski:

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)) - \hat{\mathbf{R}} \cdot (\boldsymbol{\Omega} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)) \quad (1.81)$$

En virtud de la ecuación<sup>8</sup> E.14, la ecuación<sup>9</sup> E.21 y la ecuación<sup>10</sup> E.32 (mostradas en el Apéndice E.1 sobre los teoremas integrales de Stokes y Gauss):

$$\Rightarrow \frac{dW(t)}{dt} = \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} v_0 \hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \cdot \nabla r^2 + D_t \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \nabla^2 r^2 + D_r \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \hat{R}^2 r^2 \quad (1.85)$$

Desarrollando la expresión  $\nabla r^2$ :

$$\frac{\partial}{\partial r_k} [r_i r_i] e_k = (r_i \delta_{ki} + r_i \delta_{ki}) e_k = 2r_i \delta_{ki} e_k = 2r_k e_k \quad (1.86)$$

Adicionalmente:

$$\nabla_r^2 r^2 = \frac{\partial^2}{\partial r_k^2} r_i r_i = \frac{\partial}{\partial r_k} \left( \frac{\partial (r_i r_i)}{\partial r_l} \right) = 6 \quad (1.87)$$

$$\Rightarrow \frac{dW(t)}{dt} = \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} (v_0 \hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)) \cdot \nabla r^2 + D_t \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) (6) + D_r \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \hat{R}^2 r^2 \quad (1.88)$$

$$\Rightarrow \frac{dW(t)}{dt} = 2v_0 \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} (\hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r}) P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) + 6D_t \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \quad (1.89)$$

Por lo tanto:

$$\frac{dW(t)}{dt} = 2v_0 \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle (t) + 6D_t \quad (1.90)$$

Partiendo de la ecuación 1.82:

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot [v_0 \hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)] + D_t \nabla^2 P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) + D_r \hat{R}^2 P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \quad (1.91)$$

Multiplicando ambos lados de la ecuación por  $\langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle$  e integrando con respecto a  $\mathbf{r}$  y  $\hat{\mathbf{u}}$ , respectivamente:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle (t) &= -v_0 \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle \nabla \cdot [\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)] \\ &\quad + D_t \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle \nabla^2 P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \\ &\quad + D_r \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle \hat{R}^2 P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \end{aligned} \quad (1.92)$$

En el primer término del lado derecho de la ecuación 1.92, se definen  $\mathbf{G}(\mathbf{r}) \equiv [\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)]$  y  $f = \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle$ . En virtud de la ecuación E.14,  $\langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle \nabla \cdot [\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)] = -[\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t)] \nabla \cdot \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle$ . Análogamente, para el segundo término de la ecuación 1.92, se parte de la ecuación E.21, concluyendo que  $\langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle \nabla^2 P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) = P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \nabla^2 \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle$ . Para el último término, se parte de la ecuación E.32. Por consiguiente:

$$= v_0 \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \cdot \nabla \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle + D_t \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \nabla^2 \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle + D_r \int d\mathbf{r} \oint d\hat{\mathbf{u}} P(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{u}}, t) \hat{R}^2 \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle \quad (1.93)$$

<sup>8</sup>  $f(\mathbf{r}) \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}) = -\mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot \nabla f(\mathbf{r})$

<sup>9</sup>  $g(\mathbf{r}) \nabla^2 f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) \nabla^2 g(\mathbf{r})$

<sup>10</sup>  $g(\hat{\mathbf{u}}) \hat{R}^2 f(\hat{\mathbf{u}}) = f(\hat{\mathbf{u}}) \hat{R}^2 g(\hat{\mathbf{u}})$

Tomando en cuenta que  $\hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{u}} = -2\hat{\mathbf{u}}$ :

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle (t) = v_0 - 2D_r \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle (t) \quad (1.94)$$

Se asume que en  $t = 0$ , la partícula coloidal está en el origen:

$$\frac{d \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle (t)}{v_0 - 2D_r \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle (t)} = dt \Leftrightarrow \frac{d [-2D_r \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle (t)]}{-2D_r [v_0 - 2D_r \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle (t)]} = dt \quad (1.95)$$

$$\Rightarrow \int_0^t d \left[ -\frac{1}{2D_r} \ln (v_0 - 2D_r \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle (t)) \right] = \int_0^t dt \quad (1.96)$$

$$\Rightarrow [\ln (v_0 - 2D_r \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle (t))] \Big|_0^t = -2D_r t \Leftrightarrow \ln (v_0 - 2D_r \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle (t)) - \ln (v_0) = -2D_r t \quad (1.97)$$

$$\ln \left[ \frac{v_0 - 2D_r \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle (t)}{v_0} \right] = -2D_r t \Leftrightarrow \frac{v_0 - 2D_r \langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle (t)}{v_0} = e^{-2D_r t} \quad (1.98)$$

Finalmente:

$$\langle \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} \rangle (t) = \frac{v_0}{2D_r} [1 - e^{-2D_r t}] \quad (1.99)$$

Sustituyendo en la ecuación 1.90 para el desplazamiento cuadrático medio:

$$\frac{dW(t)}{dt} = 6D_t + \frac{v_0^2}{D_r} (1 - e^{-2D_r t}) \quad (1.100)$$

$$W(t) = \int_0^t \left[ 6D_t + \frac{v_0^2}{D_r} (1 - e^{-2D_r t}) \right] dt \rightarrow W(t) = \left[ 6D_t + \frac{v_0^2}{D_r} \right] t \Big|_0^t + \frac{v_0^2}{2D_r^2} (e^{-2D_r t}) \Big|_0^t \quad (1.101)$$

La expresión completa del desplazamiento cuadrático medio es:

$$W(t) = \left[ 6D_t + \frac{v_0^2}{D_r} \right] t + \frac{v_0^2}{2D_r^2} \{ e^{-2D_r t} - 1 \} \quad (1.102)$$

Considerando tiempos pequeños, de magnitud  $t \ll \frac{1}{D_r}$ , se puede expandir en serie de Taylor<sup>11</sup> la ecuación 1.102 y despreciar los términos con exponente de orden mayor a dos, entonces:

$$W(t) = \left[ 6D_t + \frac{v_0^2}{D_r} \right] t + \frac{v_0^2}{2D_r^2} \left[ \left( 1 + (-2D_r t) + \frac{1}{2} (-2D_r t)^2 \right) + \dots - 1 \right] \quad (1.103)$$

$$= 6D_t t + \frac{v_0^2}{D_r} t + \frac{v_0^2}{2D_r^2} \left[ 1 - 2D_r t + \frac{4D_r^2 t^2}{2} + \dots - 1 \right] \quad (1.104)$$

---

<sup>11</sup>La expansión en serie de Taylo de la exponencial centrada en 0 es:  $e^x = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \dots$

$$\Rightarrow W(t) = 6D_t t + \frac{v_0^2}{D_r} t - \frac{v_0^2(2D_r t)}{2D_r^2} + \frac{v_0^2}{2D_r^2} \frac{4D_r^2 t^2}{2} + \dots = 6D_t t + \frac{v_0^2}{D_r} t - \frac{v_0^2}{D_r} t + v_0^2 t^2 + \dots \quad (1.105)$$

El desplazamiento cuadrático medio  $W(t)$  para tiempos  $t \ll \frac{1}{D_r}$ , donde la partícula no ha tenido tiempo de ejercer rotaciones, tiene la siguiente expresión:

$$W(t) = 6D_t t + v_0^2 t^2 + \dots \quad (1.106)$$

Para tiempos grandes, de magnitud  $t \gg \frac{1}{D_r}$ , se consideran los primeros términos de la ecuación 1.102 (pues el número uno al final está multiplicado por el cociente  $\frac{1}{D_r} \ll t$ ), por lo tanto:

$$W(t) = \left[ 6D_t + \frac{v_0^2}{D_r} \right] t \equiv 6D_{Eff} t \quad (1.107)$$

Entre los ejemplos destacados de micronadadores fueron mencionados los espermatozoides, que se desplazan a una velocidad promedio de entre 30 y 100  $\mu\text{m/s}$  [27], con una velocidad típica de 75  $\mu\text{m/s}$ ; las bacterias como *Escherichia coli*, que nadan a velocidades que varían entre 10 y 30  $\mu\text{m/s}$  [4], con un valor promedio de 20  $\mu\text{m/s}$ ; *Euglena* [5], un protista flagelado que puede moverse a velocidades de 100 a 200  $\mu\text{m/s}$ , alcanzando una velocidad típica de 150  $\mu\text{m/s}$ ; los rotíferos, que presentan velocidades de entre 200 y 500  $\mu\text{m/s}$  [17], con una velocidad promedio de 350  $\mu\text{m/s}$ ; los protozoos como *Paramecium*, que nadan a velocidades de 100 a 500  $\mu\text{m/s}$  [13], con un valor típico de 300  $\mu\text{m/s}$ ; y *Amoeba*, que se mueve mediante pseudópodos a velocidades de 10 a 20  $\mu\text{m/s}$  [26], con un promedio de 15  $\mu\text{m/s}$ . Estos organismos unicelulares presentan tamaños que varían desde unos pocos hasta varias decenas de micrómetros. Su morfología y dimensiones están adaptadas para optimizar la eficiencia en la locomoción a través de fluidos viscosos. Para el caso presente, todos estos organismos se modelan como esferas inmersas en un fluido a una temperatura de  $T = 303$  K y con una viscosidad del fluido de corte de  $\eta = 1 \times 10^3$  kg/m·s. Las gráficas correspondientes a las expresiones presentadas en las ecuaciones 1.106 y 1.107 se muestran en las figuras 1.7 y 1.8, respectivamente.

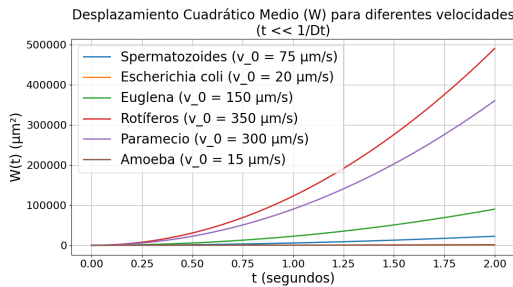


Figura 1.7: Gráfica del desplazamiento cuadrático medio en función del tiempo para tiempos cortos.

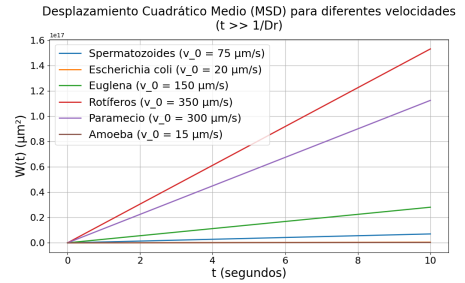


Figura 1.8: Gráfica del desplazamiento cuadrático medio en función del tiempo para tiempos largos.

## Capítulo 2

# Ecuación de Langevin

La ecuación de Langevin ofrece una descripción detallada del movimiento de partículas al combinar efectos deterministas con fuerzas aleatorias originadas por el entorno térmico. En el contexto del movimiento Browniano bajo la influencia de campos externos, esta ecuación se adapta para incluir el impacto de dichos campos en las partículas en movimiento.

El empleo de la ecuación de Langevin permite analizar cómo los campos magnéticos afectan el comportamiento difusional y las propiedades estadísticas del movimiento browniano. Este enfoque teórico proporciona una base sólida para examinar los efectos emergentes y las características dinámicas de los sistemas en presencia de campos externos, facilitando así una comprensión más profunda de la dinámica de las partículas en estos entornos.

Sin embargo, aunque la ecuación de Langevin proporciona una descripción precisa del movimiento individual de las partículas, en muchos casos es más útil estudiar cómo cambia la distribución de probabilidad de la posición y velocidad de estas partículas a lo largo del tiempo. Aquí es donde la ecuación de Fokker-Planck resulta fundamental. Esta ecuación describe la evolución temporal de la distribución de probabilidad de encontrar una partícula en un estado particular.

La ecuación de Fokker-Planck permite pasar de una descripción centrada en las trayectorias individuales de las partículas a una más amplia, enfocada en cómo se distribuyen estas trayectorias en el espacio de fases. Esto es particularmente útil para entender el comportamiento colectivo de un gran número de partículas y sus respuestas a influencias externas, como los campos. Proporcionando una visión estadística del movimiento de las partículas, la ecuación de Fokker-Planck facilita el análisis de fenómenos complejos y la predicción de comportamientos en sistemas fuera del equilibrio.

Una de las razones para introducir la ecuación de Fokker-Planck antes de la ecuación de Langevin en el presente trabajo es que la ecuación de Fokker-Planck se utilizará como método de comparación para verificar algunos resultados de la teoría de la ecuación de Langevin. Este enfoque comparativo permitirá validar y corroborar los hallazgos teóricos obtenidos mediante la ecuación de Langevin

## 2.1. Fundamentos de la ecuación de Fokker-Planck

### 2.1.1. Conceptos en probabilidad

#### Espacio muestral

Sea  $\Omega$  el espacio muestral asociado a un experimento.  $\Omega$  es el conjunto de todos los posibles resultados del experimento. Dada  $\omega \in \Omega$ , donde  $\Omega$  representa el espacio muestral asociado a un experimento aleatorio, los elementos individuales  $\omega$  se denominan eventos elementales, resultados elementales o resultados muestrales.

Sea  $B \subseteq \Omega$ , un subconjunto denominado evento. Con base en dos eventos  $B, C \subseteq \Omega$ , el conjunto de elementos pertenecientes a  $B$  y  $C$  se denota por  $BC$  y se denomina intersección.

Por último, el complemento del conjunto  $C$  se representa por  $\bar{C}$ , y se define como  $\bar{C} = \Omega - C$  [30].

#### Probabilidad condicional

Cada vez que se observa nueva evidencia, se adquiere información que puede incidir en el grado de creencia o incertidumbre que se tiene sobre la ocurrencia de un evento. La probabilidad condicional aborda la pregunta: ¿Cómo debe actualizarse la creencia en función de la evidencia observada personalmente?.

La probabilidad condicional de que el evento  $B$  ocurra dado que el evento  $C$  ha ocurrido con  $P(C) > 0$ , se cuantifica mediante la expresión  $P(B | C) = \frac{P(BC)}{P(C)}$  si y solo si  $P(BC) = P(B|C)P(C)$ .

#### Eventos independientes

Sean  $B, C \subseteq \Omega$  dos eventos. Estos eventos se consideran independientes si y solo si la probabilidad de su intersección es igual al producto de sus probabilidades individuales. Simbólicamente,  $P(BC) = P(B)P(C)$  o  $P(BC) = P(B)$ .

Dados  $B, C, D \subseteq \Omega$ , los tres eventos son independientes si la probabilidad de su intersección es igual al producto de sus probabilidades individuales.  $P(BCD) = P(B)P(C)P(D)$ .

#### Variable aleatoria

Dado un experimento con espacio muestral  $\Omega$  compuesto por eventos elementales  $\omega$  (es decir,  $w \in \Omega$ ), se define por variable aleatoria a una función  $\mathbf{X} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ . La variable aleatoria asigna un número a un evento, es decir,  $\mathbf{X}(\omega) = x$ .

#### Media, varianza y momento

La media de una variable aleatoria  $\mathbf{X}$  se define como el valor esperado de  $\mathbf{X}$  y se denota como  $E[\mathbf{X}]$ ,  $\mu$  o  $\langle \mathbf{X} \rangle$ . Para una variable discreta, se calcula como la suma ponderada de cada valor posible de  $\mathbf{X}$  multiplicado por su probabilidad. Para una variable continua, se integra el producto de  $\mathbf{X}$  y su función de densidad de probabilidad. Poniendo énfasis en una variable continua, el valor esperado de  $\mathbf{X}$  estará dado por:  $\langle \mathbf{X} \rangle = \int xp(x)dx$ , donde  $p(x)$  denota a la función de distribución de probabilidad de la variable aleatoria  $\mathbf{X}$ .

La varianza de una variable aleatoria  $\mathbf{X}$  mide cuánto se extienden los valores de  $\mathbf{X}$  alrededor de su media. Se denota como  $\text{Var}(\mathbf{X})$  o  $\sigma^2$ . Para una variable continua, se integra el cuadrado de

la diferencia entre  $\mathbf{X}$ ) y la media, multiplicada por la función de densidad de probabilidad, i.e., la varianza está dada por la expresión:  $\sigma^2 = [\mathbf{X} - \langle \mathbf{X} \rangle]^2 = \langle \mathbf{X}^2 \rangle - \langle \mathbf{X} \rangle^2$ . Para cada variable aleatoria  $\mathbf{X}$ , si  $\mathbf{X}$  es integrable,  $E[\mathbf{X}]^k < \infty$ , donde  $k$  un entero positivo, entonces el  $k$ -ésimo momento de  $\mathbf{X}$  está dado por  $E(\mathbf{X})^k$ , también denotado por  $\langle \mathbf{X}^k \rangle$  [23]. Particularmente, los momentos centrales serán denotados por  $\mu$  y estarán dados por:  $\mu = \langle (\mathbf{X} - \langle \mathbf{X} \rangle)^k \rangle$ .

### 2.1.2. Procesos estocásticos

Sea  $\mathbf{X}_\gamma : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  una variable aleatoria distinta para cada valor de  $\gamma \in S \subset \mathbb{R}$ . La función  $\mathbf{X} : S \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  dada por  $\mathbf{X}_\gamma(\omega) \equiv \mathbf{X}(\omega, \gamma)$  se denomina proceso estocástico con conjunto indexante  $S$  y se denota por  $\mathbf{X} = \{\mathbf{X}_\gamma; \gamma \in S\}$ . Un proceso estocástico es una familia de variables aleatorias indexadas por una variable real.

Sea  $t_n \in \mathbb{R}$  con  $n \in \mathbb{N}$ . Para cada valor distinto ascendente de  $n$ , se asigna un valor decreciente a la variable  $t$ , es decir<sup>1</sup>,  $t_1 > t_2 > \dots > t_{n-1} > t_n$ . Partiendo de una familia de variables aleatorias  $\mathbf{X}(\omega, t_1), \mathbf{X}(\omega, t_2), \mathbf{X}(\omega, t_3), \dots, \mathbf{X}(\omega, t_n)$ , la funciones de distribución de probabilidades relacionadas con los valores  $x_n$  y  $t_n$  correspondientes a la variable aleatoria  $\mathbf{X}(\omega, t_n)$  se denotan por  $p_1(x_1, t_1), p_2(x_1, t_1; x_2, t_2), p_3(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3), \dots, p_n(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3; \dots; x_n, t_n)$ , respectivamente.

Se tiene que  $p_1(x_1, t_1)dx_1$  representa la probabilidad de que la variable aleatoria  $\mathbf{X}(\omega, t_1)$  tenga el valor  $x_1$  en el rango  $dx_1$ . Análogamente,  $p_2(x_1, t_1; x_2, t_2)dx_1dx_2$  representa la probabilidad conjunta de que las variables aleatorias  $\mathbf{X}(\omega, t_1)$  y  $\mathbf{X}(\omega, t_2)$  tengan los valores  $x_1$  y  $x_2$  en el rango de  $dx_1$  y  $dx_2$ , respectivamente [30].

Una de las propiedades de las funciones de distribución de probabilidades es la compatibilidad de las probabilidades de índice inferior  $j$  con la de índice superior  $j + 1$ . Tal propiedad se denomina criterio de compatibilidad y se expresa mediante la expresión:

$$p_j(x_1, t_1; \dots, x_j, t_j) = \int p_{j+1}(x_1, t_1; \dots, x_j, t_j; x_{j+1}, t_{j+1})dx_{j+1} \quad (2.1)$$

Las funciones de densidad probabilidad conjunta se definen mediante la expresión:

$$p_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) = p_{k, n-k}(x_1, t_1; \dots; x_k, t_k \mid x_{k+1}, t_{k+1}; \dots; x_n, t_n)p_{n-k}(x_{k+1}, t_{k+1}; \dots; x_n, t_n) \quad (2.2)$$

### 2.1.3. Clasificación de procesos estocásticos

#### Proceso completamente aleatorio

Un proceso completamente aleatorio es una colección de variables aleatorias indexadas por un parámetro, elemento de los reales, comúnmente el tiempo, tal que para cualquier conjunto limitado de valores temporales  $t_n$ , las variables aleatorias asociadas son independientes entre sí. Simbólicamente,  $p_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) = p_1(x_1, t_1)p_1(x_2, t_2)\dots p_1(x_n, t_n)$ .

La probabilidad condicional para un proceso completamente aleatorio se expresa mediante la expresión:  $p_{1, n-1}(x_1, t_1 \mid x_2, t_2, \dots, x_n, t_n) = p_1(x_1, t_1)$ .

<sup>1</sup>Se ha tomado la convención de denotar los tiempos más grandes por un subíndice que corresponde a los primeros números naturales, siendo los tiempos más pequeños los que tienen un subíndice que corresponde al valor más grande del conjunto considerado.

### Proceso estacionario

Un proceso estocástico se denomina estacionario si su función de distribución es independiente del origen del tiempo [30], es decir:

$$p_j(x_1, t_1 + s; x_1, t_2 + s; \dots; x_j, t_j + s) = p_j(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_j, t_j) \text{ para toda } j \quad (2.3)$$

### Proceso estacionario en sentido estricto

Un proceso estocástico  $X(\omega, t_n)$  es considerado estacionario en sentido estricto, abreviado como SSS por su sigla en inglés (*Strict Sense Stationary*), si sus propiedades estadísticas son independientes de cualquier desplazamiento en el origen del tiempo. Esto implica que para que un proceso sea denominado estacionario en sentido estricto, es necesario que  $X(\omega, t_n)$  y  $X(\omega, t_n + s)$  tengan las mismas estadísticas para cualquier valor de  $s$  [35].

De esta definición, se sigue que la función de distribución es independiente del origen del tiempo, es decir:

$$p_j(x_1, t_1 + s; x_1, t_2 + s; \dots; x_j, t_j + s) = p_j(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_j, t_j) \quad (2.4)$$

### Proceso de Markov

Un proceso de Markov es un proceso estocástico con una memoria condicionada a cualquier instante de tiempo inmediato precedente al argumento temporal consecuente. La memoria de un proceso de Markov que considera a un sólo valor del tiempo inmediato condicionado al precedente del tiempo equivale a decir que el futuro del proceso es independiente del pasado. Tal propiedad se ejemplifica mediante la expresión<sup>2</sup>:

$$p_{1,1}(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}) = p_{1,n-1}(x_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) \quad (2.5)$$

Sin embargo, en este texto se toma la convención de tomar los tiempos como  $t_n < t_{n-1} < \dots < t_2 < t_1$ , por lo que se utiliza la expresión:  $p_{1,1}(x_1, t_1 | x_2, t_2) = p_{1,n-1}(x_1, t_1 | x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)$ .  $p_{1,n-1}(x_1, t_1 | x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) = p_{1,1}(x_1, t_1 | x_2, t_2)$ , donde  $t_2$  es el tiempo inmediato precedente al tiempo a  $t_1$  [30].

La función de distribución de probabilidades conjuntas se expresa mediante la relación:

$$p_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) = p_{1,1}(x_1, t_1 | x_2, t_2) p_{1,1}(x_2, t_2 | x_3, t_3) \dots p_{1,1}(x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n) \quad (2.6)$$

Que expresa la dependencia de la función de distribución de probabilidad en argumentos consecutivos del tiempo, sin considerar más allá del primer tiempo.

#### 2.1.4. Ecuación de Chapman-Kolmogorov

Dada una función de distribución de probabilidades conjuntas para tres tiempos distintos, denotados por  $t_1$ ,  $t_2$  y  $t_3$ , ordenados de izquierda a derecha en orden descendente, se parte de la ecuación

<sup>2</sup>Según la obra titulada "STOCHASTIC PROCESSES IN PHYSICS AND CHEMISTRY" escrita por N.G. Van Kampen, se define un proceso de Markov como un tipo de proceso estocástico que exhibe la propiedad donde, para cualquier secuencia de  $n$  tiempos sucesivos ( $t_1 < t_2 < \dots < t_n$ )



2.2 y de la propiedad  $p_{1,1}(x_1, t_1 | x_2, t_2) = p_{1,n-1}(x_1, t_1 | x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)$  para obtener la relación:

$$\begin{aligned} p_3(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3) \\ &= p_{1,2}(x_1, t_1 | x_2, t_2; x_3, t_3)p_2(x_2, t_2; x_3, t_3) \\ &= p_{1,1}(x_1, t_1 | x_2, t_2)p_{1,1}(x_2, t_2 | x_3, t_3)p_1(x_3, t_3) \end{aligned} \quad (2.7)$$

En virtud del criterio de compatibilidad expresado en la ecuación 2.1, se realiza una integración en el lado derecho de a precedente ecuación respecto al valor  $x_2$  y se utiliza la ecuación 2.2:

$$\Rightarrow p_2(x_1, t_1; x_3, t_3) = p_{1,1}(x_1, t_1 | x_3, t_3)p_1(x_3, t_3) \quad (2.8)$$

Aquello debe ser igual a la integración del lado izquierdo de la ecuación 2.7:

$$\begin{aligned} \Rightarrow p_{1,1}(x_1, t_1 | x_3, t_3)p_1(x_3, t_3) \\ &= \int p_{1,2}(x_1, t_1 | x_2, t_2; x_3, t_3)p_2(x_2, t_2; x_3, t_3)dx_2 \\ &= \int p_{1,1}(x_1, t_1 | x_2, t_2)p_{1,1}(x_2, t_2 | x_3, t_3)p_1(x_3, t_3)dx_2 \end{aligned}$$

Por consiguiente, se deduce la ecuación de Chapman-Kolmogorov:

$$p_{1,1}(x_1, t_1 | x_3, t_3) = \int p_{1,1}(x_1, t_1 | x_2, t_2)p_{1,1}(x_2, t_2 | x_3, t_3)dx_2 \quad (2.9)$$

La cual es válida para tiempos discretos y continuos.

## 2.2. Ecuación de Fokker-Planck

Sea  $\mathbf{X} = \{\mathbf{X}(t); t > 0\}$  un procesos estocástico de Markov con valores de  $t_n$  ordenados de derecha a izquierda en orden ascendente,  $t_1 > t_2 > t_3$ . Por ser un proceso de Markov, la función de distribución de probabilidad satisface la propiedad  $p_{1,1}(x_1, t_1 | x_2, t_2; x_3, t_3) = p_{1,1}(x_1, t_1 | x_2, t_2)$ .

Adicionalmente, se asume que  $\mathbf{X}(t)$  es un proceso homogéneo en el tiempo  $t$ , es decir,  $p_{1,1}(x_1, t_1 + s; x_2, t_2 + s) = p_{1,1}(x_1, t_1; x_2, t_2)$ .

Partiendo de los argumentos de la función de distribución de probabilidad presentada en la ecuación 2.9, se definen  $x_1 \equiv y, x_2 \equiv z$  y  $x_3 \equiv x$ . Análogamente, se definen  $t_1 \equiv 0, t_2 \equiv t$  y  $t_3 \equiv t + \Delta t$ .

En virtud de las definiciones precedentes e invirtiendo el orden de los argumentos de  $p$ , se obtiene la siguiente relación:

$$p_{1,1}(x, t + \Delta t | y, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} p_{1,1}(z, t | y, 0)p_{1,1}(x, t + \Delta t | z, t)dz \quad (2.10)$$

Denotando  $p_{1,1}(x, t + \Delta t | z, t) \equiv p_{1,1}(x, \Delta t | z)$ , entonces:

$$p_{1,1}(x, \Delta t | y, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} p_{1,1}(z, t | y, 0)p_{1,1}(x, \Delta t | z, 0)dz \quad (2.11)$$

Sea  $\eta(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  una función arbitraria que satisface las condiciones:  $\lim_{x \rightarrow -\infty} \eta(x) = 0$ ,  $\lim_{x \rightarrow +\infty} \eta(x) = 0$  y cuya n-ésima derivada  $\frac{d^n \eta(x)}{dx^n}$  existe para  $x \rightarrow \pm\infty$ .

Se parte de la siguiente expresión [9]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \eta(x) \frac{\partial p_{1,1}(x, t | y)}{\partial t} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x) \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left( \frac{p_{1,1}(x, t + \Delta t | y) - p_{1,1}(x, t | y)}{\Delta t} \right) dx \quad (2.12)$$

Realizando un intercambio (no trivial) del límite con la integral:

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x) \frac{\partial p_{1,1}(x, t | y)}{\partial t} dx = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{-\infty}^{\infty} (p_{1,1}(x, t + \Delta t | y) - p_{1,1}(x, t | y)) dx \quad (2.13)$$

Utilizando la identidad de Champman-Kolmogorov presentada en la ecuación 2.9:

$$= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x) p_{1,1}(z, t | y) p_{1,1}(x, t + \Delta t | z, t) dz - \eta(x) p_{1,1}(x, t | y) \right\} dx \right] \quad (2.14)$$

Utilizando la convención  $p_{1,1}(x, t + \Delta t | z, t) \equiv p_{1,1}(x, \Delta t | z)$ :

$$= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x) p_{1,1}(z, t | y) p_{1,1}(x, \Delta t | z) dz - \eta(x) p_{1,1}(x, t | y) \right\} dx \right] \quad (2.15)$$

Realizando un cambio en el orden de integración para el primer término de la ecuación anterior y requiriendo que  $x \rightarrow z$  en el segundo término:

$$= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x) p_{1,1}(z, t | y) p_{1,1}(x, \Delta t | z) dx \right\} dz - \int_{-\infty}^{\infty} \eta(z) p_{1,1}(z, t | y) dz \right] \quad (2.16)$$

En virtud de la normalización requerida para  $p_{1,1}(x, \Delta t | z)$ , tal que  $\int_{-\infty}^{\infty} p_{1,1}(x, \Delta t | z) dx = 1$ :

$$= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ p_{1,1}(z, t | y) \int_{-\infty}^{\infty} p_{1,1}(x, \Delta t | z) (\eta(x) - \eta(z)) dx \right\} dz \right] \quad (2.17)$$

Considerando la expansión en serie de Taylor de  $\eta(x)$  alrededor del punto  $x = z$ :

$$\eta(x) = \eta(z) + (x - z) \frac{d\eta(x)}{dx} \Big|_{x=z} + \frac{(x - z)^2}{2!} \frac{d^2\eta(x)}{dx^2} \Big|_{x=z} + \dots \quad (2.18)$$

y sustituyendo en la ecuación 2.17:

$$= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} p_{1,1}(z, t | y) \int_{-\infty}^{\infty} p_{1,1}(x, \Delta t | z) \left\{ \eta(z) + (x - z) \frac{d\eta(x)}{dx} \Big|_{x=z} + \frac{(x - z)^2}{2!} \frac{d^2\eta(x)}{dx^2} \Big|_{x=z} + \dots - \eta(z) \right\} dx dz \right] \quad (2.19)$$

$$= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} p_{1,1}(z, t | y) \int_{-\infty}^{\infty} p_{1,1}(x, \Delta t | z) \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(x - z)^n}{n!} \left( \frac{d^n \eta(x)}{dx^n} \right) \Big|_{x=z} \right\} dx dz \right] \quad (2.20)$$

Sea  $a_n(z, \Delta t) = \int_{-\infty}^{\infty} (x - z)^n p_{1,1}(x, \Delta t | z) dx$  y sea  $D^n(z) \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{n! \Delta t} a_n(z, \Delta t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{-\infty}^{\infty} p_{1,1}(x, \Delta t | z) \frac{(x-z)^n}{n!} dx$  y requiriendo que  $D^n(z) = 0$  para  $n > 2$ , entonces:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \eta(x) \frac{\partial p_{1,1}(x, t | y)}{\partial t} dx = \int_{-\infty}^{\infty} p_{1,1}(z, t | y) \left[ D^1(z) \frac{d^1 \eta(x)}{dx^1} \Big|_{x=z} + D^2(z) \frac{d^2 \eta(x)}{dx^2} \Big|_{x=z} \right] dz \quad (2.21)$$

Integrando por partes el primer término de la ecuación 2.21 y repidiendo la integración por partes una segunda vez sobre el segundo término (para más detalles referirse al apéndice A.2 y A.6):

$$\begin{aligned} &\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x) \frac{\partial p_{1,1}(x, t | y)}{\partial t} dx = \\ & - \int_{-\infty}^{\infty} \eta(z) \frac{\partial}{\partial z} [p_{1,1}(z, t | y) D^1(z)] dz + \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x) \Big|_{x=z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} [p_{1,1}(z, t | y) D^2(z)] dz \end{aligned} \quad (2.22)$$

### 2.3. Ecuación de Langevin

Una vez introducida la ecuación de Fokker-Planck, se deduce la ecuación de Langevin y se derivan algunos resultados. Es fundamental presentar la ecuación de Fokker-Planck antes de la ecuación de Langevin, ya que la primera se empleará para corroborar ciertos resultados obtenidos posteriormente.

Partiendo de una partícula coloidal en movimiento con velocidad  $\mathbf{v}$ , inmersa en un medio viscoso de viscosidad  $\zeta$ . La fuerza promedio ejercida sobre la partícula debido a la interacción con el medio se denota como  $\mathbf{F}_{\langle \rangle}$  y está dada por la relación  $\mathbf{F}_{\langle \rangle} = -\zeta \mathbf{v}$ . Considerando además una fuerza residual fluctuante denotada por  $\Gamma(t)$ , se cumple, por la segunda ley de Newton, la siguiente relación:

$$M \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\zeta \mathbf{v} + \Gamma(t) \quad (2.23)$$

Se establecen las siguientes hipótesis estadísticas sobre las propiedades de  $\Gamma$ : En primer lugar, se supone que  $\Gamma(t)$  representa una fluctuación respecto a la media, de modo que su valor esperado es cero, es decir,  $\langle \Gamma(t) \rangle = 0$ . En segundo lugar,  $\Gamma(t)$  se considera un proceso estacionario con un tiempo de correlación relativamente pequeño, tal que la correlación entre  $\Gamma(t)$  y  $\Gamma(t + s)$  se describe mediante la relación  $\langle \Gamma(t) \cdot \Gamma(t + s) \rangle = \langle \Gamma^2(t) \rangle \phi(s)$ , con  $\phi(s)$  una función con un pico muy pronunciado alrededor de  $s = 0$  [29].

Al realizar el producto punto del vector de posición  $\mathbf{r}$  con la ecuación 2.23 y calcular el promedio estadístico de ambos lados de la ecuación, se elimina la fluctuación  $\Gamma(t)$ . Como resultado, se obtiene que:

$$M \langle \mathbf{r} \cdot \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} \rangle = -\zeta \langle \mathbf{r} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} \rangle \quad (2.24)$$

Se sabe que  $\frac{d(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r})}{dt} = 2 \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \mathbf{r}$ . Adicionalmente,  $\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} \cdot \mathbf{r} = \frac{1}{2} \frac{d^2(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r})}{dt^2} - \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt}$ , en consecuencia:

$$M \langle \frac{1}{2} \frac{d^2(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r})}{dt^2} - \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} \rangle = -\zeta \langle \frac{1}{2} \frac{d(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r})}{dt} \rangle \Rightarrow M \langle \frac{1}{2} \frac{d^2(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r})}{dt^2} \rangle + \zeta \langle \frac{1}{2} \frac{d(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r})}{dt} \rangle = M \langle \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} \rangle \quad (2.25)$$

Por el teorema de equipartición,  $\langle \frac{1}{2} M v^2 \rangle = \frac{3}{2} kT$ , entonces:

$$M \left\langle \frac{1}{2} \frac{d^2 (\mathbf{r} \cdot \mathbf{r})}{dt^2} \right\rangle + \zeta \left\langle \frac{1}{2} \frac{d (\mathbf{r} \cdot \mathbf{r})}{dt} \right\rangle = 3kT \quad (2.26)$$

Para  $\mathbf{r}$  una función continua y diferenciable sobre el intervalo promediado, se puede definir  $y \equiv \langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{r} \rangle$ , obteniendo la ecuación diferencial  $\frac{d^2 y}{dt^2} + \frac{\zeta}{M} \frac{dy}{dt} - \frac{6kT}{M} = 0$ , cuya solución<sup>3</sup> es  $\langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{r} \rangle = c_1 + c_2 e^{\frac{-\zeta}{M} t} + \frac{6kT/M}{\zeta/M} t$ . Dada la condición inicial de que la solución sea 0 para  $t = 0$ , se concluye que:

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{6kT}{\zeta} t + B(e^{\frac{-\zeta}{M} t} - 1) \quad (2.28)$$

El valor de la constante  $B$  es  $\frac{6Mk_B T}{\zeta^2}$ .

Para tiempos  $t \gg \frac{M}{\zeta}$ , el desplazamiento cuadrático medio sigue la relación aproximada  $\langle r^2(t) \rangle \sim \frac{6kT}{\zeta} t$ , mostrando una dependencia lineal con respecto a  $t$ . Este resultado es comparable al obtenido para el caso unidimensional a partir de la ecuación de difusión de Fick, que se expresa como  $\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = 2Dt$ , como se presenta en la ecuación 1.11. La diferencia en los factores (2 en lugar de 6) se debe a que el resultado con el factor 6 corresponde al caso tridimensional, mientras que el factor 2 corresponde al caso unidimensional.

## 2.4. Coeficientes de fricción y difusión

La ecuación de Langevin más general está dada por la expresión:

$$\frac{d\xi(t)}{dt} = h(\xi(t), t) + g(\xi(t), t)\Gamma(t) \quad (2.29)$$

Si  $g$  es una constante, la ecuación 2.29 se denomina ecuación de Langevin con término de ruido aditivo. Por otro lado, si  $g = g(\xi(t), t)$ , la ecuación 2.29 se denomina ecuación de Langevin con un término de ruido multiplicativo [9].

Denotando la variable  $t$  por  $t'$  y realizando una integración respecto al tiempo  $t'$  para un intervalo  $(t, t + \tau)$  con  $\tau > 0$ , se obtiene:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\tau} \frac{d\xi(t')}{dt'} dt' &= \int_t^{t+\tau} [h(\xi(t'), t') + g(\xi(t'), t')\Gamma(t)] dt' \\ \Rightarrow \xi(t + \tau) - \xi(t) &= \int_t^{t+\tau} [h(\xi(t'), t') + g(\xi(t'), t')\Gamma(t)] dt' \end{aligned} \quad (2.30)$$

---

<sup>3</sup> Sea  $\alpha \equiv \frac{\zeta}{M}$  y  $\beta \equiv \frac{6kT}{M}$ , por lo que  $\frac{d^2 y}{dt^2} + \alpha \frac{dy}{dt} = \beta$ . Asumiendo que  $\beta = 0$ , entonces  $\frac{d^2 y}{dt^2} + \alpha \frac{dy}{dt} = 0$ , por lo que se propone como solución  $y = c_2 e^{-\alpha t}$ . Sin embargo, se ha asumido que  $\beta = 0$ . Así que a continuación se asumen soluciones de tipo constante. De no resultar útil, se procede con la propuesta de una solución lineal, así sucesivamente.

Proponemos una segunda solución  $y_2 = c$ , con  $c$  una constante. Para la ecuación igualada a  $\beta$ ,  $\frac{d^2 y}{dt^2} + \alpha \frac{dy}{dt} = \beta$ , se observa que la constante  $\beta$  debería ser 0. Como no puede ser posible (a menos que la temperatura sea el 0 absoluto), se procede con la propuesta de una solución  $y_3 = Dt$ , cuya sustitución en la ecuación igualada a  $\beta$  implica que  $D = \frac{\beta}{\alpha}$ , así que una combinación lineal de ambas soluciones conduce a:

$$y = c_1 + c_2 e^{-\alpha t} + \frac{\beta}{\alpha} t \quad (2.27)$$

Se parte de la expansión en serie de Taylor centrada en el tiempo  $t$  para las funciones  $h(\xi(t'), t')$  y  $g(\xi(t'), t')$ , respectivamente, definiendo  $\xi(t') \equiv x' = x(t')$  [31]:

$$h(\xi(t'), t') = h(\xi(t'), t') \Big|_{(x(t), t)} + [\xi(t') - \xi(t)] \frac{\partial h(\xi(t'), t')}{\partial x'} \Big|_{(x(t), t)} + [t' - t] \frac{\partial h(\xi(t'), t')}{\partial t'} \Big|_{(x(t), t)} + \dots \quad (2.31)$$

y

$$g(\xi(t'), t') = g(\xi(t'), t') \Big|_{(x(t), t)} + [\xi(t') - \xi(t)] \frac{\partial g(\xi(t'), t')}{\partial x'} \Big|_{(x(t), t)} + [t' - t] \frac{\partial g(\xi(t'), t')}{\partial t'} \Big|_{(x(t), t)} + \dots \quad (2.32)$$

La sustitución de los desarrollos en serie de Taylor para  $h$  y  $g$  en la expresión mostrada en la ecuación 2.30 conduce a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \xi(t + \tau) - \xi(t) &= \int_t^{t+\tau} \left[ h(\xi(t'), t') \Big|_{(x(t), t)} + [\xi(t') - \xi(t)] \frac{\partial h(\xi(t'), t')}{\partial x'} \Big|_{(x(t), t)} \right. \\ &\quad \left. + [t' - t] \frac{\partial h(\xi(t'), t')}{\partial t'} \Big|_{(x(t), t)} + \dots \right] dt' \\ &\quad + \int_t^{t+\tau} \left[ g(\xi(t'), t') \Big|_{(x(t), t)} + [\xi(t') - \xi(t)] \frac{\partial g(\xi(t'), t')}{\partial x'} \Big|_{(x(t), t)} \right. \\ &\quad \left. + [t' - t] \frac{\partial g(\xi(t'), t')}{\partial t'} \Big|_{(x(t), t)} + \dots \right] \Gamma(t') dt' \end{aligned}$$

Partiendo de la ecuación 2.30 escrita en la forma:

$$\xi(t') - \xi(t) = \int_t^{t'} [h(\xi(t''), t'') + g(\xi(t''), t'')\Gamma(t'')] dt'' \quad (2.33)$$

y sustituyendo en la ecuación 2.4, entonces:

$$\begin{aligned} \xi(t + \tau) - \xi(t) &= \int_t^{t+\tau} \left[ h(\xi(t'), t') \Big|_{(x(t), t)} + \left\{ \int_t^{t'} [h(\xi(t''), t'') + g(\xi(t''), t'')\Gamma(t'')] dt'' \right\} \right. \\ &\quad \left. \frac{\partial h(\xi(t'), t')}{\partial x'} \Big|_{(x(t), t)} + [t' - t] \frac{\partial h(\xi(t'), t')}{\partial t'} \Big|_{(x(t), t)} + \dots \right] dt' \\ &\quad + \int_t^{t+\tau} \left[ g(\xi(t'), t') \Big|_{(x(t), t)} + \left\{ \int_t^{t'} [h(\xi(t''), t'') + g(\xi(t''), t'')\Gamma(t'')] dt'' \right\} \right. \\ &\quad \left. \frac{\partial g(\xi(t'), t')}{\partial x'} \Big|_{(x(t), t)} + [t' - t] \frac{\partial g(\xi(t'), t')}{\partial t'} \Big|_{(x(t), t)} + \dots \right] \Gamma(t') dt' \end{aligned} \quad (2.34)$$

Desarrollando los factores presentes en el integrando, distribuyendo los signos de integración en cada término, multiplicando por el inverso de  $\tau$ , tomando el promedio y evaluando el límite de

ambos lados de la ecuación cuando  $\tau \rightarrow 0$  (para una consulta detallada del desarrollo, refiérase al Apéndice E.2), se deduce que:

$$D^{(1)}(\xi(t), t) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\langle \xi(t + \tau) - \xi(t) \rangle}{\tau} = h(\xi(t), t) + D \frac{\partial g(\xi(t'), t')}{\partial x'} \Big|_{(x(t), t)} g(\xi(t'), t') \quad (2.35)$$

Estos dos términos coinciden con los dos primeros términos que están entre paréntesis en la ecuación de Fokker-Planck en la conversión de Stratonovich.

De manera similar, para determinar el segundo coeficiente  $D^{(2)}(\xi(t), t)$ , se presenta el desarrollo siguiente:

$$D^{(2)}(\xi(t), t) = \frac{1}{2!} \lim_{\tau \rightarrow 0} \left[ \frac{\langle [\xi(t + \tau) - \xi(t)]^2 \rangle}{\tau} \right] = \frac{1}{2!} \lim_{\tau \rightarrow 0} \left[ 2D \int_t^{t+\tau} \int_t^{t+\tau} g(\xi(t'), t) g(\xi(t''), t) \delta(t - t'') dt' dt'' + O(\tau^2) \right] \quad (2.36)$$

Para garantizar la correspondencia con los términos entre corchetes de la segunda expresión sumada en la ecuación  $\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \xi} [h + \frac{1}{2}\Gamma g g'] P + \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} [g^2] P$ , ha de cumplirse que tal límite sea igual a:

$$D^{(2)}(\xi(t), t) = \frac{1}{2!} \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\langle [\xi(t + \tau) - \xi(t)]^2 \rangle}{\tau} = D g^2(\xi(t), t) \quad (2.37)$$

### 2.4.1. Ecuación no lineal de Langevin en varias dimensiones

Partiendo de un conjunto de  $N$  variables aleatoria,  $\{\xi(t)\} = \{\xi_1, \dots, \xi_N\}$ , la ecuación de Langevin asociada a tal conjunto de variables aleatorias toma la forma:

$$\dot{\xi}_i(t) = h_i[\{\xi(t)\}, t] + g_{ij}[\{\xi(t)\}, t] \Gamma_j(t) \quad (2.38)$$

para  $\Gamma_j(t)$  que cumple las siguientes propiedades [9]:  $\langle \Gamma_j(t) \rangle = 0$  y  $\langle \Gamma_i(t) \Gamma_j(t') \rangle = 2D \delta_{ij} \delta(t - t')$ . Intercambiando la variable  $t$  por la variable  $t'$  en la ecuación 2.38 e integrando respecto a la variable  $t'$  sobre el intervalo  $(t, t + \tau)$ :

$$\int_t^{t+\tau} \frac{d\xi_i(t')}{dt'} dt' = \xi_i(t + \tau) - \xi_i(t) = \int_t^{t+\tau} \{h_i[\{\xi(t')\}, t'] + g_{ij}[\{\xi(t')\}, t'] \Gamma_j(t')\} dt' \quad (2.39)$$

Se parte de la expansión en serie de Taylor para las funciones  $h_i[\{\xi(t')\}, t']$  y  $g_{ij}[\{\xi(t')\}, t']$ , respectivamente [9, 31].

Para  $(\{\xi(t)\}, t')$  un punto cercano al punto  $(\{\xi(t')\}, t')$ , la expansión en serie de Taylor de las funciones mencionadas es:

$$h_i[\{\xi(t'), t'\}] = h_i[\{\xi(t'), t'\}] \Big|_{(\xi(t), t')} + [\xi_k(t') - \xi_k(t)] \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi_k(t')} h_i[\{\xi(t')\}, t'] \right\} \Big|_{(\xi(t), t')} + \dots \quad (2.40)$$

Definiendo al conjunto de  $N$  variables  $\{\xi(t)\} = \{\xi_1(t), \xi_2(t), \dots, \xi_n(t)\} \equiv \{\mathbf{x}\}$ , entonces:

$$h_i[\{\xi(t')\}, t'] = h_i[\{\mathbf{x}\}, t'] + [\xi_k(t') - x_k] \frac{\partial}{\partial x_k} h_i[\{\mathbf{x}\}, t'] + \dots \quad (2.41)$$

Análogamente,

$$g_{ij} [\{\xi(t')\}, t'] = g_{ij} [\{\mathbf{x}\}, t'] + [\xi_k(t') - x_k] \frac{\partial}{\partial x_k} g_{ij} [\{\mathbf{x}\}, t'] + \dots \quad (2.42)$$

La sustitución de los desarrollos en serie de Taylor (presentados en las ecuaciones 2.41 y 2.42) en la ecuación 2.39 conduce a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \xi_i(t + \tau) - \xi_i(t) = & \int_t^{t+\tau} \left\{ h_i [\{\mathbf{x}\}, t'] + [\xi_k(t') - x_k] \frac{\partial}{\partial x_k} h_i [\{\mathbf{x}\}, t'] + \dots \right\} dt' \\ & + \int_t^{t+\tau} \left\{ g_{ij} [\{\mathbf{x}\}, t'] + [\xi_k(t') - x_k] \frac{\partial}{\partial x_k} g_{ij} [\{\mathbf{x}\}, t'] + \dots \right\} \Gamma_j(t') dt' \end{aligned} \quad (2.43)$$

Se sustituye la diferencia  $\xi_k(t') - x_k$  con base en la relación presentada en la ecuación 2.39. Por lo que:

$$\begin{aligned} \xi_i(t + \tau) - \xi_i(t) = & \int_t^{t+\tau} \left\{ h_i [\{\mathbf{x}\}, t'] + \left[ \int_t^{t'} \left\{ h_i [\{\xi(t'')\}, t''] + g_{ij} [\{\xi(t'')\}, t''] \Gamma_j(t'') \right\} dt'' \right] \frac{\partial}{\partial x_k} h_i [\{\mathbf{x}\}, t'] \right. \\ & + \dots \left. \right\} dt' \\ & + \int_t^{t+\tau} \left\{ g_{ij} [\{\mathbf{x}\}, t'] + \left[ \int_t^{t'} \left\{ h_i [\{\xi(t'')\}, t''] + g_{ij} [\{\xi(t'')\}, t''] \Gamma_j(t'') \right\} dt'' \right] \right. \\ & \left. \times \frac{\partial}{\partial x_k} g_{ij} [\{\mathbf{x}\}, t'] + \dots \right\} \Gamma_j(t') dt' \end{aligned} \quad (2.44)$$

Distribuyendo los signos de integración para cada término dentro del integrando, multiplicando por el inverso de  $\tau$ , tomando el promedio y tomando el límite en ambos lados de la ecuación cuando  $\tau \rightarrow 0$  (para ver más detalles de este procedimiento, referirse al Apéndice E.3), se deduce que:

$$D^{(1)}(\xi(t), t) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\langle \xi_i(t + \tau) - \xi_i(t) \rangle}{\tau} = \dot{x}_i = h_i(\{\mathbf{x}\}, t) + D g_{kj}(\{\mathbf{x}\}, t) \frac{\partial}{\partial x_k} g_{ij}(\{\mathbf{x}\}, t) \quad (2.45)$$

El desarrollo de la suma implícita sobre k, en la ecuación 2.45, toma la forma:

$$x_i = h_i + D \left\{ g_{1j} \frac{\partial}{\partial x_1} g_{ij} + g_{2j} \frac{\partial}{\partial x_2} g_{ij} + g_{3j} \frac{\partial}{\partial x_3} g_{ij} \right\} \quad (2.46)$$

El desarrollo de la suma implícita sobre el índice j conduce a la expresión final:

$$\begin{aligned} x_i = h_i + D \left\{ \left[ g_{11} \frac{\partial}{\partial x_1} g_{i1} + g_{12} \frac{\partial}{\partial x_1} g_{i2} + g_{13} \frac{\partial}{\partial x_1} g_{i3} \right] \right. \\ + \left[ g_{21} \frac{\partial}{\partial x_2} g_{i1} + g_{22} \frac{\partial}{\partial x_2} g_{i2} + g_{23} \frac{\partial}{\partial x_2} g_{i3} \right] \\ \left. + \left[ g_{31} \frac{\partial}{\partial x_3} g_{i1} + g_{32} \frac{\partial}{\partial x_3} g_{i2} + g_{33} \frac{\partial}{\partial x_3} g_{i3} \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.47)$$

## 2.5. Movimiento Browniano rotacional de una molécula lineal con momento dipolar $\mu$

Considérese una molécula lineal con momento dipolar  $\mu$ , con momento de inercia aproximado a 0 debido a la región difusiva de la que se ha partido desde los primeros capítulos. Se parte de las siguientes ecuaciones dinámicas para la partícula [9]:

$$\dot{\mu} = \omega(t) \times \mu(t) \quad (2.48)$$

donde  $\omega$  representa la velocidad angular de la partícula.

$$I\dot{\omega}(t) + \zeta\omega(t) = \lambda(t) + \mu(t) \times \mathbf{E}(t) \quad (2.49)$$

donde  $I=0$  y  $\lambda$  representa la fuerza fluctuante que actúa sobre la partícula.

$$\zeta\dot{\mu}(t) = \lambda(t) \times \mu(t) + [\mu(t) \times \mathbf{E}(t)] \times \mu(t) \quad (2.50)$$

El desarrollo del primer término en la ecuación 2.50 conduce a la expresión  $\lambda(t) \times \mu(t) = [\lambda_2\mu\xi_3 - \lambda_3\mu\xi_2]\hat{i} + [\lambda_3\mu\xi_1 - \lambda_1\mu\xi_3]\hat{j} + [\lambda_1\mu\xi_2 - \lambda_2\mu\xi_1]\hat{k}$ , que en conjunción con la expresión  $[\mu(t) \times \mathbf{E}(t)] \times \mu(t) = [-\mu_1\mu_3E_3]\hat{i} + [-\mu_2\mu_3E_3]\hat{j} + [\mu_2^2E_3 + \mu_1^2E_3]\hat{k} = [-\mu^2E_3]\hat{i} + [-\mu^2E_3]\hat{j} + [\mu^2E_3 + \mu^2E_3]\hat{k}$ , se obtienen las siguientes componentes:

$$\begin{cases} \mu\dot{\xi}_1(t) = \zeta^{-1} [\lambda_2\mu\xi_3 - \lambda_3\mu\xi_2] - \zeta^{-1}\mu^2E\xi_1(t)\xi_3(t) \\ \mu\dot{\xi}_2(t) = \zeta^{-1} [\lambda_3\mu\xi_1 - \lambda_1\mu\xi_3] - \zeta^{-1}\mu^2E\xi_2(t)\xi_3(t) \\ \mu\dot{\xi}_3(t) = \zeta^{-1} [\lambda_1\mu\xi_2 - \lambda_2\mu\xi_1] - \zeta^{-1}\mu^2E[\xi_2^2 + \xi_1^2] \end{cases} \quad (2.51)$$

Con base en la expresión para  $\xi_1$ , presentada en la ecuación 2.51 y partiendo de la ecuación<sup>4</sup> 2.38, se deduce que  $g_{12}\lambda_2 = \frac{\xi_3}{\zeta}\lambda_2$ ,  $g_{13}\lambda_3 = -\frac{\xi_2}{\zeta}\lambda_3$ ,  $g_{11}\lambda_1 = 0$  y finalmente  $h_1 = -\zeta^{-1}\mu E\xi_1(t)\xi_3(t)$ . Análogamente,  $g_{21}\lambda_1 = -\frac{\xi_3}{\zeta}\lambda_1$ ,  $g_{22}\lambda_2 = 0$ ,  $g_{23}\lambda_3 = \frac{\xi_1}{\zeta}\lambda_3$  y  $h_2 = -\zeta^{-1}\mu E\xi_2(t)\xi_3(t)$ . Por último,  $g_{31}\lambda_3 = \frac{\xi_2}{\zeta}$ ,  $g_{32}\lambda_2 = -\frac{\xi_1}{\zeta}$ ,  $g_{33}\lambda_3 = 0$  y  $h_3 = \zeta^{-1}\mu E[\xi_2^2 + \xi_1^2]$ .

Las expresiones para  $g_{ij}$  se pueden expresar más convenientemente en notación matricial como:

$$\begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\xi_3}{\zeta} & -\frac{\xi_2}{\zeta} \\ -\frac{\xi_3}{\zeta} & 0 & \frac{\xi_1}{\zeta} \\ \frac{\xi_2}{\zeta} & -\frac{\xi_1}{\zeta} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

Partiendo de la ecuación 2.47, de los coeficientes hallados para  $g_{ij}$  expresados en la matriz, la ecuación 2.52 y de las expresiones para  $h_1, h_2$  y  $h_3$ , se obtiene lo siguiente:

$$\begin{cases} \dot{\xi}_1 = -\zeta^{-1}\mu E\xi_1\xi_2 - D\left(2\frac{\xi_1}{\zeta}\right) \\ \dot{\xi}_2 = -\zeta^{-1}\mu E\xi_1\xi_2 - D\left(2\frac{\xi_2}{\zeta}\right) \\ \dot{\xi}_3 = -\zeta^{-1}\mu E(1 - \xi_3^2) - D\left(2\frac{\xi_3}{\zeta}\right) \end{cases} \quad (2.53)$$

<sup>4</sup>Como recordatorio:  $\dot{\xi}_i(t) = h_i[\{\xi(t)\}, t] + g_{ij}[\{\xi(t)\}, t]\Gamma_j(t)$



Para un entorno en dos dimensiones el movimiento de una partícula activa se compone de tres procesos: proceso de difusión aleatoria, fuerza autopropulsada y toca para el caso de partículas con quiralidad.

Una partícula coloidal esférica de radio  $R$  inmersa en un solvente experimenta una difusión traslacional con coeficiente de difusión traslacional:

$$D_t = \frac{K_B T}{6\pi\eta R} \quad (2.54)$$

Para una autopropulsión de la partícula coloidal, un término de velocidad se considera, así como la orientación  $\phi$ . La partícula coloidal con quiralidad experimenta una difusión rotacional con coeficiente de difusión rotacional:

$$D_R = \frac{K_B T}{8\pi\eta R^3} \quad (2.55)$$

La orientación de la partícula coloidal experimenta una velocidad angular  $\Omega$ .

En la mecánica estadística y la termodinámica, la relación de Einstein conecta el coeficiente de difusión  $D$  con la temperatura  $T$ , la constante de Boltzmann  $k$  y la movilidad  $\mu$  de las partículas:  $D = \mu k T$ . La movilidad  $\mu$  es una medida de qué tan rápido se mueve una partícula en respuesta a una fuerza aplicada. Puede definirse como la relación entre la velocidad de deriva de la partícula y la fuerza aplicada. En muchos sistemas físicos, especialmente en el contexto del movimiento browniano, la movilidad  $\mu$  a menudo se considera inversamente proporcional al coeficiente de fricción  $\gamma$ , i.e.,  $\mu = \frac{1}{\gamma}$ . La sustitución de este resultado en la relación de Einstein conduce a la expresión  $D = \frac{kT}{\gamma}$ , tal que  $\gamma$  representa el coeficiente de arrastre de Stokes, donde  $\gamma = 6\pi\eta r$ . En algunos contextos simplificados o idealizados, el coeficiente de fricción  $\gamma$  podría ser absorbido por otras constantes o considerado como unidad para fines de normalización, lo que lleva a la forma simplificada  $D = kT$ .

A continuación se presenta un caso bidimensional correspondiente a las ecuaciones 2.52 y 2.50. Para tal contexto, se utilizará  $D = \frac{kT}{6\pi\eta r}$ .

Considérese [9]  $\omega = \omega \hat{k}$ ,  $\mu = \mu(\xi_1 \hat{i} + \xi_2 \hat{j})$ ,  $\lambda = \lambda \hat{k}$  y  $\mathbf{E} = E \hat{i}$  para la ecuación  $\zeta \dot{\mu}(t) = \lambda(t) \times \mu(t) + [\mu(t) \times \mathbf{E}(t)] \times \mu(t)$ .

El desarrollo del primer término toma la forma  $\lambda \times \mu \xi = [-\lambda \mu \xi_2] \hat{i} + [\lambda \mu \xi_1] \hat{j}$ . Similarmente,  $[\mu \times \mathbf{E}] \times \mu \xi = [\mu^2 \xi_2^2 E] \hat{i} + [-\mu^2 \xi_1 \xi_2 E] \hat{j}$ . La sustitución de estos términos en  $\zeta \dot{\mu}(t) = \lambda(t) \times \mu(t) + [\mu(t) \times \mathbf{E}(t)] \times \mu(t)$ , conduce a las expresiones:  $\zeta \mu \dot{\xi}_1 = [\mu^2 \xi_2^2 E - \lambda \mu \xi_2]$  y  $\zeta \mu \dot{\xi}_2 = \lambda \mu \xi_1 - \mu^2 \xi_1 \xi_2 E$ .

Debido a que  $\mu = \mu(\xi_1 \hat{i} + \xi_2 \hat{j})$ , donde  $\xi$  es un vector de magnitud 1, entonces el producto punto  $\mu \cdot \mu$  lleva a que  $\mu^2(\xi_1^2 + \xi_2^2) = \mu^2$ . Por lo tanto,  $\xi_2^2 = 1 - \xi_1^2$ , obteniendo las expresiones:

$$\begin{cases} \dot{\xi}_1 = \zeta^{-1}[\mu(1 - \xi_1^2)E - \lambda \xi_2] \\ \dot{\xi}_2 = \zeta^{-1}[\lambda \xi_1 - \mu \xi_1 \xi_2 E] \end{cases} \quad (2.56)$$

Una forma de satisfacer la condición  $(\xi_1^2 + \xi_2^2) = 1$  es que  $\xi_1 = \cos\theta$  y  $\xi_2 = \sin\theta$ .

La primera relación en la ecuación 2.56 se puede expresar como  $\frac{d \cos\theta(t)}{dt} = -\lambda(t)\zeta^{-1} \sin\theta(t) + \zeta^{-1}\mu(1 - \cos^2\theta(t)) = -\lambda(t)\zeta^{-1} \sin\theta(t) + \zeta^{-1}\mu \sin^2\theta(t) = -\lambda(t)\zeta^{-1} \sin\theta(t) + \zeta^{-1}\mu E(\frac{1 - \cos 2\theta}{2})$ . Similarmente, la segunda relación se puede expresar como  $\frac{d \sin\theta(t)}{dt} = \zeta^{-1}[\lambda(t)\cos\theta(t) - \mu \sin\theta(t)\cos\theta(t)E] = \zeta^{-1}[\lambda(t)\cos\theta(t) - \mu E \frac{\sin 2\theta}{2}]$ . Se concluye que:

$$\begin{cases} \frac{d \cos\theta(t)}{dt} + \zeta^{-1}\mu E \left(\frac{\cos 2\theta - 1}{2}\right) = -\lambda(t)\zeta^{-1} \sin\theta(t) \\ \frac{d \sin\theta(t)}{dt} + \zeta^{-1}\mu E \frac{\sin 2\theta}{2} = \zeta^{-1}\lambda(t) \cos\theta(t) \end{cases} \quad (2.57)$$

Multiplicando ambos lados de la expresión para  $\frac{d \sin \theta(t)}{dt}$  (en la ecuación 2.57) por el número complejo  $i$  y sumando con la expresión para  $\frac{d \cos \theta(t)}{dt}$ , se obtiene que  $\frac{d \cos \theta(t)}{dt} + i \frac{d \sin \theta(t)}{dt} + \zeta^{-1} \mu E \left( \frac{\cos 2\theta - 1}{2} + i \frac{\sin 2\theta}{2} \right) = \zeta^{-1} \lambda(t) (\sin \theta + i \cos \theta)$ . Considerando el cambio de variable  $r = e^{-i\theta}$ , se obtiene la siguiente expresión:

$$\frac{dr(t)}{dt} + \frac{\mu E}{2\zeta} [r(t)^2 - 1] = -i \frac{\lambda(t)r(t)}{\zeta} \quad (2.58)$$

De acuerdo con la propuesta de Van Kampen [44],  $\langle C(y)L(t) \rangle = \frac{1}{2}C(y)C'(y)$ , donde  $L(t)$  es un término de ruido. Por lo que  $\langle \frac{-i\lambda(t)r(t)}{\zeta} \rangle = kT\zeta \left( \frac{-i}{\zeta} \right)^2 r \frac{\partial}{\partial r} r = \frac{-kT}{\zeta} r$ . Se concluye que:

$$\frac{dr(t)}{dt} + \frac{\mu E}{2\zeta} [r(t)^2 - 1] = -\frac{kT}{\zeta} r \quad (2.59)$$

Cuando el campo eléctrico  $E = 0$ , la solución de la ecuación es  $r = r_0 e^{-\frac{kT}{\zeta} t}$ .

## Capítulo 3

# Determinación experimental del desplazamiento cuadrático medio para dipolos magnéticos inmersos en un campo magnético externo

### 3.1. Justificación del experimento

El estudio de las partículas autopropulsadas comenzó como un esfuerzo para simular el comportamiento de enjambres de animales a gran escala. Este campo fue inaugurado por el trabajo pionero de Craig Reynolds en 1987, quien desarrolló simulaciones del comportamiento grupal en animales. Posteriormente, Tamás Vicsek y su equipo ampliaron estos conceptos en 1995 al introducir modelos colectivos, tal como se describe en sus publicaciones fundamentales [38, 45]. A partir de estos y otros estudios similares, surgió la necesidad de modelar el comportamiento de partículas autopropulsadas. Numerosos trabajos han abordado la dinámica sobreamortiguada de micropartículas autopropulsadas a través de la teoría del movimiento browniano [3]. No obstante, diversas observaciones experimentales recientes subrayan el papel crucial que juega la inercia en sistemas de materia activa macroscópica [11, 12, 6, 40].

Recientemente, la dinámica de la materia activa macroscópica ha cobrado una relevancia significativa. En este contexto, se han empleado dispositivos conocidos como *vibrobots* o *Hexbugs*, cuya dinámica se modela utilizando el concepto de partículas brownianas activas, también denominadas partículas autopropulsadas (*self-propelled particles*) [25, 2, 34, 28, 19]. En particular, el estudio de [48] extiende el formalismo de partículas brownianas autopropulsadas a la escala macroscópica, como se detalla: “... presentamos un modelo para relacionar sistemáticamente el movimiento observado a corto y largo plazo con las predicciones del modelo de partículas brownianas activas, no solo en la materia granular, sino también en otros sistemas de partículas activas.”

El experimento descrito en dicho estudio consistió en partículas autopropulsadas confinadas dentro de una celda circular de aluminio, equipada con una tapa acrílica, a la que se le aplicaba una vibración. El diámetro de la celda circular era de 203 mm. Las partículas utilizadas eran de

resina termoestable ABS, con una base cuadrada de  $6.28 \pm 0.04$  mm y una altura máxima de  $3.9 \pm 0.1$  mm.

La celda contenía una pared de 4.76 mm de altura en su borde exterior. En el caso considerado, la auto-propulsión de las partículas se origina de mecanismos distintos a los que se observan en micropartículas autopropulsadas. En la escala macroscópica, tanto la propulsión como el ruido provienen de fuentes no térmicas. No obstante, el estudio concluye que, dado que la distribución del ruido se aproxima a una distribución gaussiana y, dado que el formalismo de Langevin asume que el ruido es gaussiano y no correlacionado en el espacio, el movimiento de las partículas granulares puede considerarse una manifestación macroscópica del movimiento browniano activo. Además, sugiere que estos hallazgos son aplicables a otros tipos de materia activa. De manera particular, el estudio de las partículas en movimiento vibratorio descrito en el artículo es comparable al comportamiento de los Hexbugs analizados en la presente investigación, siendo dicho artículo una justificación para la extrapolación del formalismo de micronadadores (en el caso microscópico) al caso macroscópico.

### **Justificación de la Introducción de Dipolos Magnéticos de 12 mm de Diámetro en el Experimento**

En esta investigación, se han empleado dipolos magnéticos de 12 mm de diámetro para examinar la difusión de estos dipolos en un dispositivo locomotor, bajo la influencia de campos magnéticos externos aplicados al sistema. La selección de esta escala se fundamenta en las siguientes razones:

- **Relevancia para el Modelo Teórico:** La escala de 12 mm de diámetro permite una comparación efectiva entre los resultados experimentales y las predicciones teóricas. A este tamaño, los efectos magnéticos son lo suficientemente pronunciados para validar el modelo sin introducir complicaciones adicionales derivadas de dimensiones extremas.
- **Facilidad Experimental:** Los dipolos magnéticos de 12 mm son manejables en un entorno de laboratorio, lo que facilita la realización de experimentos precisos y controlados. Esta escala permite una manipulación adecuada y la obtención de datos confiables sin las dificultades asociadas con tamaños excesivamente pequeños o grandes.
- **Visualización y Aplicación:** La escala elegida permite una visualización clara de los efectos de las fuerzas externas sobre los dipolos, lo cual es crucial para interpretar los datos experimentales y comunicar los resultados de manera efectiva. Además, esta escala facilita la conexión con aplicaciones prácticas en sistemas reales.

En resumen, los dipolos magnéticos de 12 mm de diámetro proporcionan una base sólida y práctica para experimentar y verificar los modelos teóricos relacionados con el comportamiento de los dipolos bajo la influencia de fuerzas externas, asegurando la relevancia y aplicabilidad de los resultados obtenidos en esta investigación.

## **3.2. Diseño experimental**

### **3.2.1. Objetivo del Experimento**

El objetivo principal de este experimento es analizar el impacto de la presencia de dipolos magnéticos adheridos a dispositivos conocidos como *Hexbugs* en su comportamiento locomotor cuando interactúan varios de ellos entre sí, además de investigar cómo un campo magnético externo influye en el comportamiento aleatorio de estos dispositivos, comparando con los resultados obtenidos en condiciones de campo magnético externo ausente.

Específicamente, se tiene como objetivo comparar y analizar de manera cuantitativa las posiciones de cada uno de los *Hexbugs*, registradas cada segundo durante un intervalo continuo de cincuenta segundos, con el fin de identificar patrones en su respuesta a las diversas configuraciones magnéticas.



Figura 3.1: Imagen de un *Hexbug*, un microrobot con motor de vibración utilizado en el experimento para simular el movimiento de partículas autopulsadas.

### 3.2.2. Materiales

1. Bandeja de cartón con una anchura de diecinueve centímetros, una altura de ochenta y cuatro centímetros y una profundidad de tres centímetros. Adicionalmente, una caja de cartón con treinta centímetros de altura y anchura, en conjunción con una profundidad de diez y siete (17) centímetros.
2. Seis unidades de dispositivos HEXBUG nano® fabricados por Spin Master. Ver la Figura 3.1.
3. Seis imanes circulares de neodimio con diámetro de diez milímetros (12 mm) y anchura de cinco milímetros (5 mm).
4. Montura de plástico fabricada mediante impresión 3D, con las siguientes especificaciones:
  - Arandela exterior con un radio interno de 46.5 mm y un diámetro externo de 47.5 mm, con una altura de 8 mm. Ver la Figura 3.2.
  - Arandela interior con un diámetro interno de 13.5 mm y un diámetro externo de 15 mm. Ver la Figura 3.3.
  - Cuatro cilindros de conexión entre arandelas con 2 mm de diámetro. Ver la Figura 3.4.
5. Dos bobinas de Helmholtz constituidas por alambre de cobre esmaltado de calibre 24, con diámetro de 45 cm y 300 vueltas de alambre.
6. Fuente de alimentación de CC digital Goldstar GP-4303D 0-30 voltios.
7. Cuatro cables Plug a Plug tipo banana.
8. Lámpara de iluminación fluorescente o lámpara de luz LED.
9. Tabla de madera con altura de 40 cm, anchura de 80 cm y profundidad de 2 cm.

10. Un pliego de papel bond blanco (sin cuadrícula) en conjunto con pegamento en barra.
11. Una barra de plastilina color rojo.
12. Trípode para teléfono móvil con una cabeza giratoria de 360 grados, en conjunto con un teléfono móvil equipado con cámara.

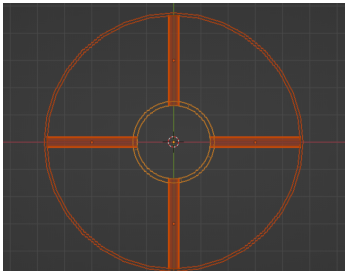


Figura 3.2: Diseño de montura para imán.

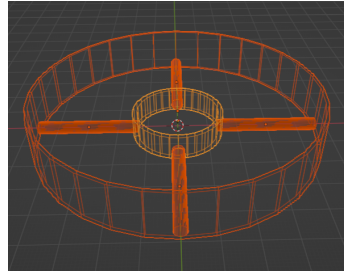


Figura 3.3: Arandela exterior con altura de 8 mm.

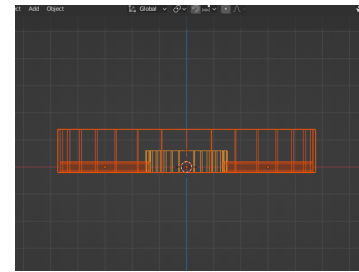


Figura 3.4: Arandela interior con altura de 4 mm.

### 3.2.3. Procedimiento

1. Se utilizaron dos bobinas fabricadas con alambre de cobre esmaltado de calibre 24 (SWG .559 mm) y cuatro cables Plug a Plug de tipo banana para realizar la conexión en serie de las bobinas, según se muestra en la Figura 3.5. Posteriormente, se estableció una separación fija de 70 cm entre ambas bobinas sobre una tabla de madera.

Finalmente, se procedió a realizar la conexión de las terminales de las bobinas a la fuente de alimentación digital de corriente continua.

$$\begin{aligned}
 & (0,0) \text{ to}[L, l=L, o-*] ++(2,0); \\
 & (2,0) \text{ to}[L, l=L, *-o] ++(2,0); \\
 & (0,0) - ++(0,-1) \text{ node[ground]}; (4,0) - ++(0,-1) \text{ node[ground]}; \\
 & \text{at } (0,-0.5) +; \text{at } (4,-0.5) -; \text{at } (2,-0.5) V;
 \end{aligned}$$

Figura 3.5: Circuito de dos bobinas de Helmholtz conectadas en serie.

2. Con base en las dimensiones especificadas de altura, anchura y profundidad de la bandeja de cartón, se procedió al recorte de tres piezas de papel bond con dimensiones de 19 cm por 84 cm, 87 cm por 3 cm y 87 por 3 cm, respectivamente. Estas piezas fueron diseñadas para cubrir tanto la superficie interior (a fondo) de la bandeja como los costados de la bandeja de cartón, que posee una altura de 3 cm. El propósito de este procedimiento fue prevenir la exposición del color natural de la caja de cartón.

Después de verificar la alineación precisa de las piezas de papel bond en las superficies laterales y de fondo, se procedió a adherirlas utilizando pegamento en barra.

## Determinación experimental del desplazamiento cuadrático medio para dipolos magnéticos inmersos en un campo magnético externo

### 3.2 Diseño experimental

---

3. Tras fijar la posición de las bobinas con respecto a la tabla de madera, se procedió a introducir la caja de cartón de dimensiones 10 cm x 30 cm x 30 cm en el espacio entre ellas. Seguidamente, se colocó la bandeja de cartón de dimensiones 19 cm x 84 cm x 3 cm dentro de los aros dentro de los aros formados por las bobinas, posicionándola sobre la caja mencionada anteriormente.
4. Fijada la bandeja de cartón dentro de los aros de las bobinas, se procedió a colocar la tabla de madera sobre una mesa. Acto seguido, se instaló un trípode para teléfono móvil en la misma mesa, girando la cabeza rotatoria noventa grados desde la posición vertical para asegurar un enfoque adecuado de la bandeja de cartón. Posteriormente, se fijó el teléfono móvil al trípode, orientando la cámara hacia la bandeja. De manera similar, se aseguró la lámpara de iluminación fluorescente en la parte trasera del teléfono móvil, permitiendo la realización de grabaciones sin obstruir la abertura de captura.
5. Utilizando una bola de plastilina con un diámetro aproximado de un centímetro y un dispositivo *Hexbug*, se procedió a colocar la plastilina sobre el revestimiento superior del dispositivo. A continuación, se insertó una arandela de 12 mm, correspondiente a la montura de plástico fabricada mediante impresión 3D, sobre la capa de plastilina. El objetivo era asegurar la fijación de la montura en la superficie del *Hexbug* y cubrir toda la longitud del dispositivo con el diámetro de la montura, garantizando su fijación en el punto medio de la longitud del dispositivo locomotor.
6. Establecida la posición de la montura de plástico y con base en un imán de neodimio girado a noventa grados respecto al punto de contacto de su cara de mayor área con una superficie horizontal plana, se procedió con la inserción del imán en el interior de la arandela de 12 mm, realizando su fijación con la misma plastilina de sujeción de la montura plástica. Posteriormente, un revestimiento de papel bond fue colocado tanto en los bordes externos de la montura como en la tapa superior a la plastilina de sujeción, evitando la exposición de los colores inherentes a los *Hexbugs* y a la montura de plástico.
7. Partiendo del revestimiento de papel bond sobre la tapa superior a la plastilina de sujeción, se colocó un círculo de plastilina con cinco milímetros de diámetro en el centro del papel.  
Los procedimientos descritos en los puntos 5 y 6 fueron repetidos para las cinco dispositivos locomotores restantes.
8. Se procedió activando y depositando cada uno de los *Hexbugs* sobre la bandeja de cartón, realizando la activación secuencial de estos dispositivos para cinco repeticiones sucesivas, hasta alcanzar un total de seis dispositivos activos. Durante este proceso, se realizó la grabación del movimiento de los dispositivos tanto con como sin la influencia de un campo magnético generado por una corriente de tres amperios.





# Capítulo 4

## Resultados

### 4.1. Movimiento de un dipolo sin interacción con campo magnético externo

Considérese un conjunto de  $N$  puntos  $(x_i, y_i)$  para  $i = 1, 2, \dots, N$ , asignados a la posición de una partícula dipolar en el tiempo  $t_i$ . Se define  $\Delta x_i \equiv x(t_i + \tau) - x(t_i)$  como el desplazamiento en el eje  $x$  de la partícula dipolar en el tiempo  $t_i$  para un tiempo de retraso (*lag time*)  $\tau$ , donde  $i = 1, 2, \dots, N$ . De manera análoga, se define  $\Delta y_i \equiv y(t_i + \tau) - y(t_i)$  como el desplazamiento en el eje  $y$  de la partícula dipolar en el tiempo  $t_i$  para un tiempo de retraso  $\tau$ , donde  $i = 1, 2, \dots, N$ .

Para una partícula desplazándose durante un de tiempo  $t_{N-\tau}$ , se define el desplazamiento cuadrático medio (DCM o MSD, por sus siglas en inglés) mediante la siguiente expresión:

$$DCM(\tau) = \frac{1}{N-\tau} \sum_{i=1}^{N-\tau} \{\Delta x_i^2 + \Delta y_i^2\} = \frac{1}{N-\tau} \sum_{i=1}^{N-\tau} \left\{ [x(t_i + \tau) - x(t_i)]^2 + [y(t_i + \tau) - y(t_i)]^2 \right\} \quad (4.1)$$

Con base en la Tabla E.1, ubicada en el Apéndice E.4, la cual presenta cincuenta pares ordenados de la forma  $(x_i, y_i)$ , correspondientes a las posiciones de un dispositivo Hexbug con un dipolo magnético incorporado, sin la influencia de campos magnéticos externos (ver Figura 4.1), se calcula el desplazamiento cuadrático medio (DCM) en función del tiempo de retardo  $\tau$ , para  $\tau$  con los valores considerados de 1, 2, 3, ..., 30.

Consecutivamente, se presenta la Figura 4.2, que muestra una gráfica del logaritmo natural del desplazamiento cuadrático medio correspondiente, graficado en función del logaritmo natural del tiempo de retardo  $\tau$  [47], con valores de  $\tau = 1, 2, 3, \dots, 30$ .

Para convertir a unidades físicas, se ha considerado el diámetro del círculo de plastilina adherido a la superficie opuesta a la plastilina que fija la montura de plástico y el dispositivo Hexbug. El diámetro promedio de este círculo es de 7 mm.

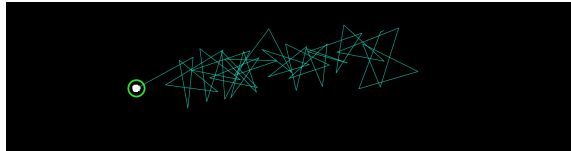


Figura 4.1: Trayectoria del dispositivo Hexbug a lo largo de 50 segundos.

Adicionalmente, se ha considerado la longitud del círculo de plastilina en unidades de píxeles, basada en el video utilizado para la medición de las posiciones del dispositivo Hexbug. De acuerdo con el software ImageJ, esta longitud es de 18 píxeles. Dado que 7 mm corresponden a 18 píxeles, se concluye que 1 píxel equivale a 0.38 mm en el sistema físico. Por lo tanto, se concluye que el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al dispositivo Hexbug tiene unidades de píxeles<sup>2</sup> = (0,38 mm)<sup>2</sup>.

Considerando la ecuación  $DCM = at^\alpha$ , donde  $a$ ,  $\alpha$  son constantes y DCM,  $t$  son variables adimensionales [47], se obtiene que  $\ln(DCM) = \ln(a) + \alpha \ln(t)$ . Definiendo  $x \equiv \ln(t)$ ,  $y \equiv \ln(DCM)$ , y  $b \equiv \ln(a)$ , se obtiene la expresión equivalente  $y = \alpha x + b$ . Dado que la ecuación de la regresión lineal correspondiente a la Figura 4.2 es  $y = 0,85x + 6,44$ , se concluye que  $\alpha = 0,85$  y  $a = e^{6,44}$ . Por lo tanto,  $DCM = e^{6,44}t^{0,85}$ .

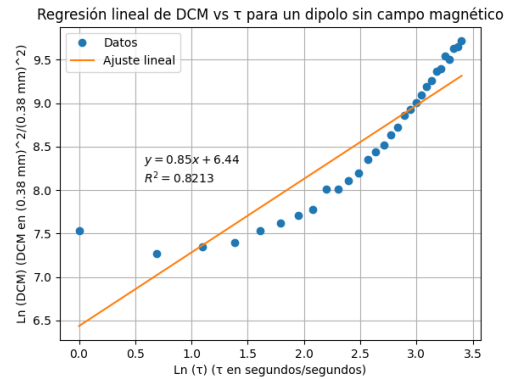


Figura 4.2: Gráfica del logaritmo natural del desplazamiento cuadrático medio (DCM) contra el logaritmo natural del tiempo de retardo  $\tau$  correspondiente a un dipolo sin la interacción de campos magnéticos externos.

#### 4.1.1. Movimiento de dos dipolos sin interacción con campo magnético externo

Partiendo de un sistema compuesto por dos dispositivos Hexbug, cada uno con un dipolo magnético montado en su superficie y sin interacciones magnéticas externas sobre el sistema, se registran cincuenta pares ordenados  $(x_i, y_i)$  (con  $i = 1, 2, \dots, N = 50$ ), correspondientes a las posiciones obtenidas a intervalos de un segundo durante cincuenta segundos para cada uno de los dipolos. Las trayectorias correspondientes a cada uno de los dipolos se muestran en la Figura 4.3.

La trayectoria en color rosa será referida como “Primera trayectoria”, mientras que la trayectoria en color azul será designada como “Segunda trayectoria” en la Figura 4.4.

Dado que la ecuación de la regresión lineal correspondiente a la gráfica 4.4a es  $y = 0,66x + 6,54$ , se obtiene que  $\alpha = 0,66$  y  $a = e^{6,54}$ . Por lo tanto, se concluye que el desplazamiento cuadrático medio tiene una expresión de la forma  $DCM = e^{6,54}t^{0,66}$ .

De manera análoga, la ecuación de regresión lineal en la Figura 4.4b es  $y = 1,24x + 4,62$ . Esto implica que  $\alpha = 1,24$  y  $a = e^{4,62}$ . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático medio del segundo dispositivo Hexbug se calcula como  $DCM = e^{4,62}t^{1,24}$ .

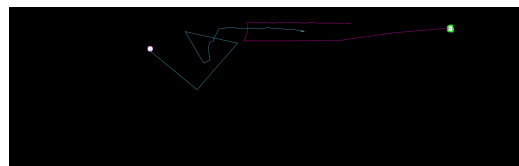
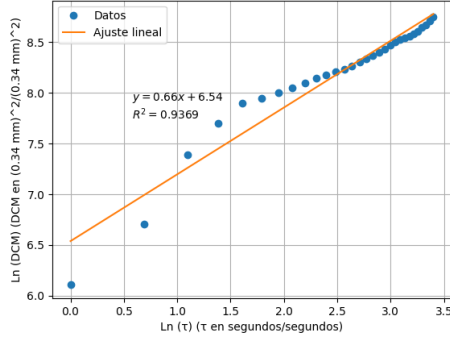


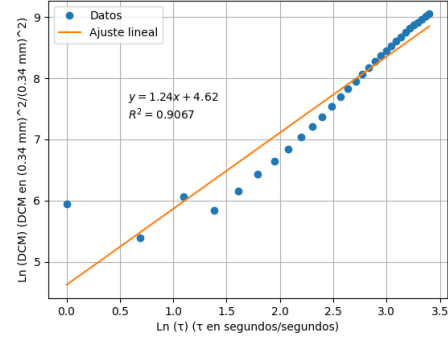
Figura 4.3: Trayectorias de dos dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados. La trayectoria en rosa se denomina “Primera trayectoria”, mientras que la trayectoria en azul se denomina “Segunda trayectoria”.

4.1 Movimiento de un dipolo sin interacción con campo magnético externo

Regresión lineal de DCM vs  $\tau$  para dos dipolos sin campo magnético  
Primera trayectoria



Regresión lineal de DCM vs  $\tau$  para dos dipolos sin campo magnético  
Segunda trayectoria



(a) Gráfica del logaritmo natural del desplazamiento cuadrático medio (DCM) contra el logaritmo natural del tiempo de retardo  $\tau$  correspondiente al primer dipolo sin la interacción de  $H$  campos magnéticos externos.

(b) Gráfica del logaritmo natural del desplazamiento cuadrático medio (DCM) contra el logaritmo natural del tiempo de retardo  $\tau$  correspondiente al segundo dipolo sin la interacción de campos magnéticos externos.

Figura 4.4: Desplazamiento cuadrático medio de dos dipolos mutuamente interactuantes sin influencia de campo magnético externo.

4.1.2. Movimiento de tres dipolos sin interacción con campo magnético externo

Partiendo de un sistema compuesto por tres dispositivos Hexbug, cada uno con un dipolo magnético incorporado y sin influencia de campo magnético externo sobre el sistema, se registran cincuenta posiciones obtenidas a intervalos de un segundo durante cincuenta segundos. Las trayectorias de cada uno de los dipolos se presentan en la Figura 4.5. La trayectoria rosa se denomina “Primera trayectoria”, la azul se denomina “Segunda trayectoria” y la trayectoria en blanco se denomina “Tercera trayectoria”.

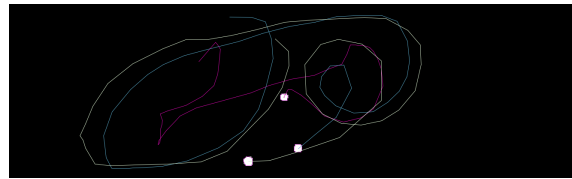


Figura 4.5: Trayectorias de tres dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados: en rosa, “Primera trayectoria”; en azul, “Segunda trayectoria”; en blanco, “Tercera trayectoria”.

El desplazamiento cuadrático medio de cada dispositivo Hexbug se calculó para tiempos de retardo  $\tau$  con valores de 1, 2, ..., 30. La Figura 4.6 muestra la gráfica del logaritmo natural del desplazamiento cuadrático medio dividido por  $(0,38 \text{ mm})^2$  frente al logaritmo natural del tiempo de retardo  $\tau$  dividido por un segundo.

Debido a que la ecuación de la regresión lineal correspondiente a la Figura 4.6a es  $y = 1,18x + 6,15$ , se obtiene que  $\alpha = 1,18$  y  $a = e^{6,15}$ . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático medio correspondiente a la primera trayectoria tiene una expresión de la forma  $\text{DCM} = e^{6,15}t^{1,18}$ .

Similarmente, partiendo de la ecuación de regresión lineal correspondiente a la Figura 4.6b, se obtiene que  $\alpha = 0,99$  y  $a = e^{7,23}$ . Por consiguiente, el desplazamiento cuadrático medio correspondiente a la segunda trayectoria tiene una expresión de la forma  $\text{DCM} = e^{7,23}t^{0,99}$ .

4.1 Movimiento de un dipolo sin interacción con campo magnético externo

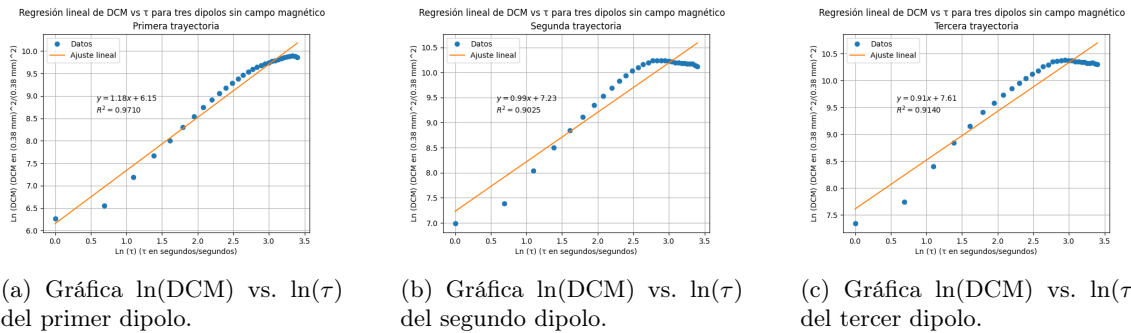


Figura 4.6: Desplazamiento cuadrático medio de tres dipolos mutuamente interactuantes sin influencia de campo magnético externo.

Finalmente, la ecuación de la regresión lineal correspondiente a la Figura 4.6c permite deducir que  $\alpha = 0,91$  y  $a = e^{7,61}$ . En consecuencia, el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al tercer dispositivo Hexbug tiene una expresión de la forma  $\text{DCM} = e^{7,61}t^{0,91}$ .

4.1.3. Movimiento de cuatro dipolos sin interacción con campo magnético externo

Partiendo de un sistema compuesto por cuatro dispositivos Hexbug, cada uno con un dipolo magnético incorporado en su superficie y con campo magnético externo al sistema ausente, se registran cincuenta pares ordenados  $(x_i, y_i)$ , correspondientes a las posiciones del dispositivo cada segundo durante un intervalo de cincuenta segundos. Las trayectorias de cada dispositivo se muestran en la Figura 4.15.

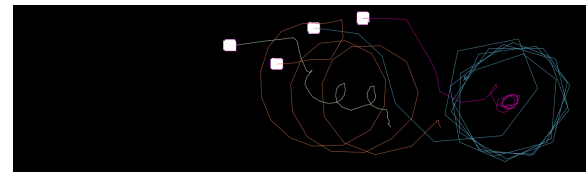


Figura 4.7: Trayectorias de cuatro dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados.

Las trayectorias de color rosa, azul, blanco y café se denominarán como “Primera trayectoria”, “Segunda trayectoria”, “Tercera trayectoria” y “Cuarta trayectoria”, respectivamente.

El desplazamiento cuadrático medio correspondiente a cada dispositivo Hexbug fue obtenido en función del tiempo de retardo  $\tau$  con valores de 1,2,3,...,30.

La Figura 4.12 muestra cuatro gráficas del logaritmo natural del desplazamiento cuadrático medio dividido por  $(0,35 \text{ mm})^2$  frente al logaritmo natural del tiempo de retardo  $\tau$  dividido por un segundo. Cada gráfica corresponde a un dispositivo Hexbug diferente.

Partiendo de la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.8,  $y = 0,87x + 5,50$ , se deduce que  $\alpha = 0,87$  y  $a = e^{5,50}$ . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático medio dividido por  $(0,35 \text{ mm})^2$  (correspondiente al primer dispositivo Hexbug), tiene una expresión de la forma  $\text{DCM} = e^{5,50}t^{0,87}$ .

Adicionalmente, de la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.9,  $y = 0,28x + 8,32$ , se deduce que  $\alpha = 0,28$  y  $a = e^{8,32}$ . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático dividido por  $(0,35 \text{ mm})^2$  (correspondiente al segundo dispositivo Hexbug), tiene una expresión de la forma  $\text{DCM} = e^{8,32}t^{0,28}$ .

4.1 Movimiento de un dipolo sin interacción con campo magnético externo

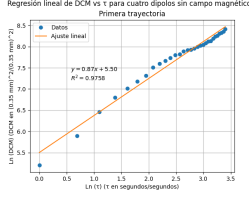


Figura 4.8: Gráfica  $\ln(\text{DCM})$  vs.  $\ln(\tau)$  del primer dipolo.

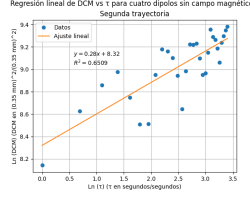


Figura 4.9: Gráfica  $\ln(\text{DCM})$  vs.  $\ln(\tau)$  del segundo dipolo.

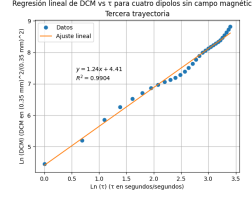


Figura 4.10: Gráfica  $\ln(\text{DCM})$  vs.  $\ln(\tau)$  del tercer dipolo.

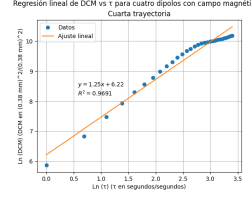


Figura 4.11: Gráfica  $\ln(\text{DCM})$  vs.  $\ln(\tau)$  del cuarto dipolo.

Figura 4.12: DCM de cuatro dipolos mutuamente interactuantes sin campo magnético externo.

Análogamente, partiendo de la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.10,  $y = 1,24x + 4,41$ , se deduce que  $\alpha = 1,24$  y  $a = e^{4,41}$ . En consecuencia, el desplazamiento cuadrático medio dividido por  $(0,35\text{mm})^2$  (correspondiente al tercer dispositivo Hexbug), tiene una expresión de la forma  $\text{DCM} = e^{4,41}t^{1,24}$ .

Finalmente, partiendo de la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.11,  $y = 1,25x + 6,22$ . Por consiguiente, el desplazamiento cuadrático medio dividido por  $(0,35\text{mm})^2$  (correspondiente al cuarto dispositivo Hexbug), tiene una expresión de la forma  $\text{DCM} = e^{6,22}t^{1,25}$ .

4.1.4. Movimiento de cinco dipolos sin interacción con campo magnético externo

Partiendo de un sistema compuesto por cinco dispositivos Hexbug, sin influencia de campo magnético externo al sistema, se hallan cincuenta pares ordenados  $(x_i, y_i)$  correspondientes a la posición de cada dipolo en intervalos de un segundo durante cincuenta segundos. La trayectoria de cada dipolo se muestra en la Figura 4.13. La trayectoria en rosa se designa como “Primera trayectoria”, la trayectoria en azul se identifica como “Segunda trayectoria”, la trayectoria en blanco se denomina “Tercera trayectoria”, la trayectoria en café se denomina “Cuarta trayectoria” y la trayectoria en amarillo se distingue como “Quinta trayectoria”.

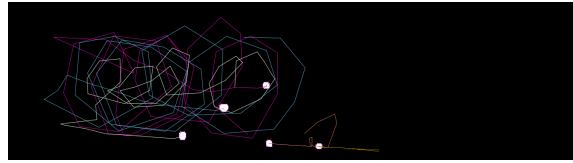


Figura 4.13: Trayectorias de cinco dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados sin interacción con campo magnético externo.

La Figura 4.14 muestra cinco gráficas del logaritmo natural del desplazamiento cuadrático medio dividido por  $(40\text{mm})^2$  frente al logaritmo natural del tiempo de retardo  $\tau$  dividido por un segundo.

La ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.14a,  $y = 0,40x + 7,90$ , permite deducir que  $\alpha = 0,40$  y  $a = e^{7,90}$ . En consecuencia, se concluye que el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al primer dispositivo Hexbug tiene la expresión  $\text{DCM} = e^{7,90}t^{0,40}$ .

Similarmente, con base en la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.14b,  $y = 0,40x + 7,90$ , se deduce que  $\alpha = 0,40$  y  $a = e^{7,90}$ . Consecuentemente, el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al segundo dipolo tiene la expresión  $\text{DCM} = e^{7,90}t^{0,40}$ .

4.1 Movimiento de un dipolo sin interacción con campo magnético externo

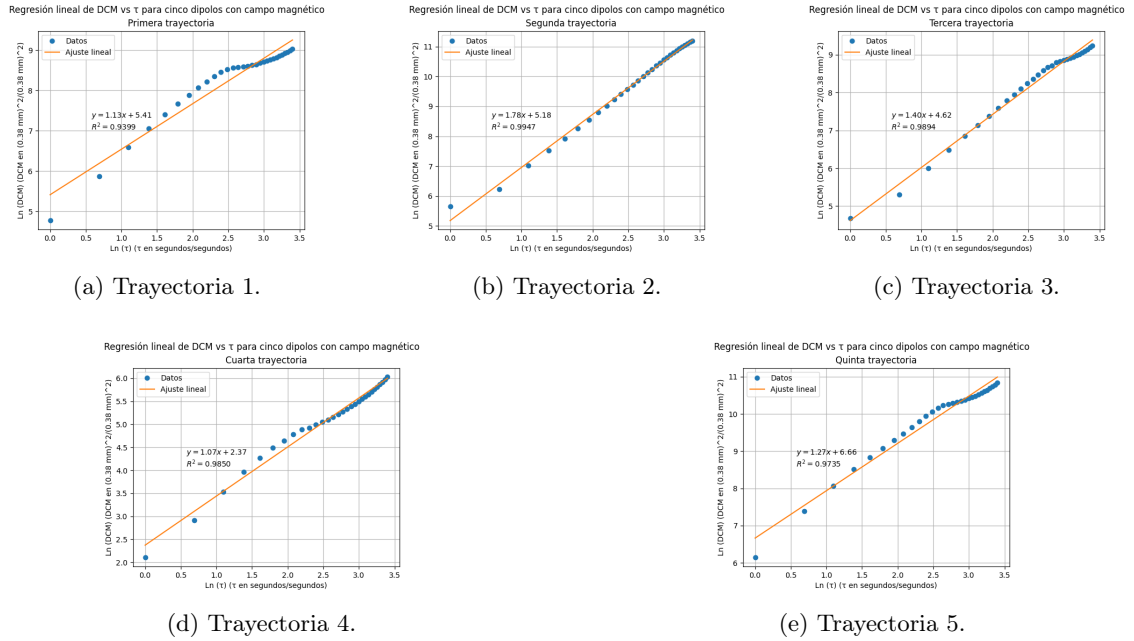


Figura 4.14: DCM de cinco dipolos mutuamente interactuantes sin campo magnético externo.

Análogamente, con base en la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.14c,  $y = 0,75x + 6,48$ , se deduce que  $\alpha = 0,75$  y  $a = e^{6,78}$ . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al tercer dipolo tiene la expresión  $\mathbf{DCM} = e^{6,78}t^{0,75}$ .

En adición, la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.14d,  $y = 0,97x + 3,16$ , conduce a que  $\alpha = 0,97$  y  $a = e^{3,16}$ . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al cuarto dipolo tiene la expresión  $\mathbf{DCM} = e^{3,16}t^{0,97}$ .

Finalmente, la ecuación de regresión lineal presentada en la Figura 4.14e,  $y = 1,27x + 6,66$ , sugiere que  $\alpha = 1,27$  y  $a = e^{6,66}$ . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al quinto dipolo tiene la expresión  $\mathbf{DCM} = e^{6,66}t^{1,27}$ .

4.1.5. Movimiento de seis dipolos sin interacción con campo magnético externo

Partiendo de un sistema compuesto por seis dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados y en ausencia de campos magnéticos externos al sistema, cincuenta pares ordenados  $(x_i, y_i)$  son obtenidos, un par cada segundo durante un intervalo de cincuenta segundos. Las trayectorias se muestran en la Figura 4.15.

Las trayectorias en color rosa, azul, blanco, café y amarillo mantienen las denominaciones establecidas anteriormente. Adicionalmen-

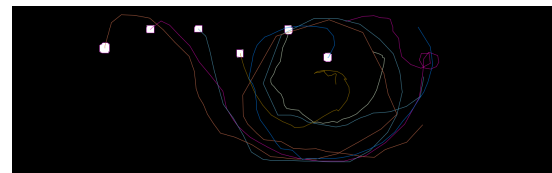


Figura 4.15: Trayectorias de seis dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados sin interacción con campo magnético externo.

4.1 Movimiento de un dipolo sin interacción con campo magnético externo

te, la trayectoria en azul rey se denomina “Sexta trayectoria”.

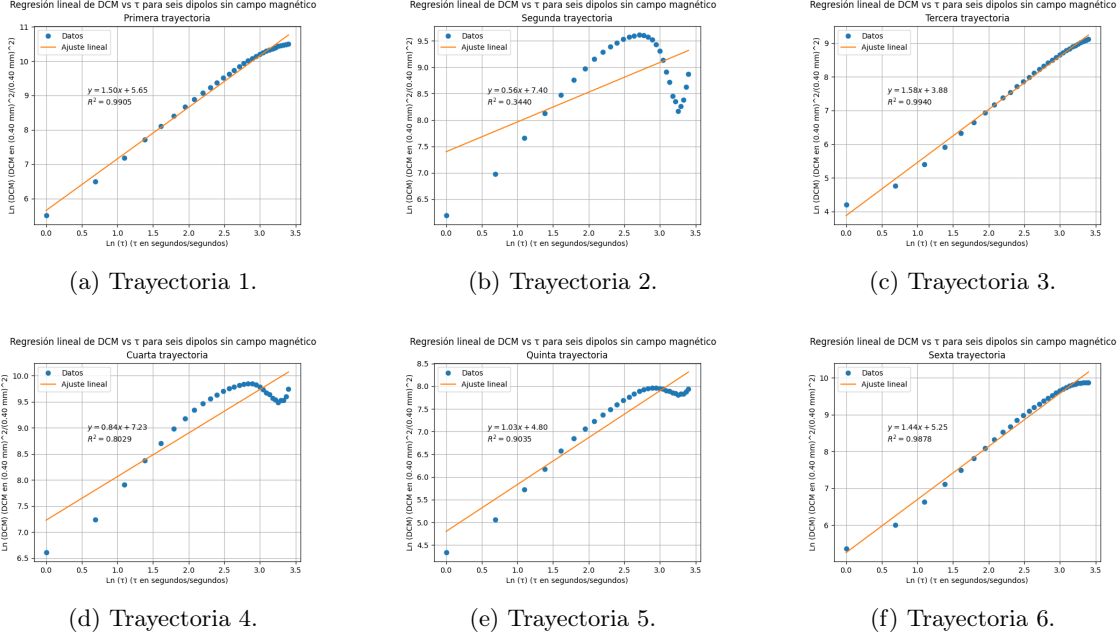


Figura 4.16: Desplazamiento cuadrático medio de seis dipolos mutuamente interactuantes sin influencia de campo magnético externo.

Con base en la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.16a,  $y = 1,50x + 5,65$ , se deduce que  $\alpha = 1,50$  y  $a = e^{5,65}$ . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al primer dipolo tiene la expresión  $DCM = e^{5,65}t^{1,50}$ .

Respecto a la Figura 4.16b, la ecuación de regresión lineal es  $y = 0,56x + 7,40$ , por consiguiente,  $\alpha = 0,56$  y  $a = e^{7,40}$ . Se concluye que el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al segundo dipolo tiene la expresión  $DCM = e^{7,40}t^{0,56}$ .

Partiendo de la Figura 4.16c, la ecuación de regresión lineal es  $y = 1,58x + 3,88$ . Por lo tanto,  $\alpha = 1,58$  y  $a = e^{3,88}$ . Se concluye que el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al tercer dipolo tiene la expresión  $DCM = e^{3,88}t^{1,58}$ .

Análogo al caso anterior, la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.16d es  $y = 0,84x + 7,23$ . Por consiguiente,  $\alpha = 0,84$  y  $a = e^{7,23}$ , sugiriendo que el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al cuarto dipolo tiene la expresión  $DCM = e^{7,23}t^{0,84}$ .

Adicionalmente, la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.16e es  $y = 1,03x + 4,80$ . Por lo que se deduce que el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al quinto dipolo tiene la expresión  $DCM = e^{4,80}t^{1,03}$ .

Finalmente, la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.16f,  $y = 1,44x + 5,25$ , sugiere que el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al sexto dipolo tiene la expresión  $DCM = e^{5,25}t^{1,44}$ .

#### 4.1.6. Movimiento de un dipolo en presencia de un campo magnético externo al sistema

Partiendo de un sistema compuesto por un dispositivo Hexbug con un dipolo magnético incorporado, bajo la influencia de un campo magnético externo, cincuenta pares ordenados  $(x_i, y_i)$  son obtenidos, correspondientes a la posición del dispositivo cada segundo durante cincuenta segundos. La trayectoria del dispositivo se muestra en la Figura 4.17.

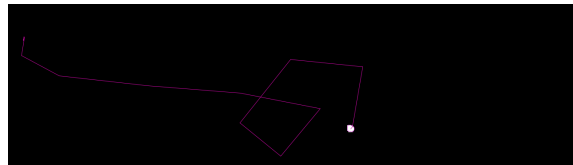


Figura 4.17: Trayectoria de un dispositivo Hexbug con dipolo magnético incorporado a lo largo de 50 segundos.

A continuación, se presenta la Figura 4.18, que muestra una gráfica del logaritmo natural del desplazamiento cuadrático medio dividido por  $(0,37 \text{ mm})^2$ , graficado en función del logaritmo natural del tiempo de retardo  $\tau$  dividido por un segundo, (con  $\tau$  que toma valores de  $\tau = 1, 2, 3, \dots, 30$ ).

Dado que la ecuación de regresión lineal correspondiente a la Figura 4.18 es  $y = 0,94x + 7,06$ , se deduce que  $\alpha = 0,94$  y  $a = e^{7,06}$ . Por lo tanto,  $\text{DCM} = e^{7,06} t^{0,94}$ .

#### 4.1.7. Movimiento de dos dipolos en presencia de un campo magnético externo al sistema

Partiendo de un sistema compuesto por dos dispositivos Hexbug, cada uno con un dipolo magnético incorporado y bajo la influencia de un campo magnético sobre el sistema, se registran cincuenta pares ordenados  $(x_i, y_i)$ , correspondientes a las posiciones obtenidas a intervalos de un segundo durante cincuenta segundos para cada uno de los dipolos. Las trayectorias correspondientes a cada uno de los dipolos se muestran en la Figura 4.19.

La trayectoria en color rosa será referida como "Primera trayectoria", mientras que la trayectoria en color azul será designada como "Segunda trayectoria" en la Figura 4.19.

Dado que la ecuación de la regresión lineal correspondiente a la Figura 4.20a es  $y = 1,39x + 6,78$ , se obtiene que  $\alpha = 1,39$  y  $a = e^{6,78}$ . Por lo tanto, se concluye que el desplazamiento cuadrático medio tiene una expresión de la forma  $\text{DCM} = e^{6,78} t^{1,39}$ .

De manera análoga, la ecuación de regresión

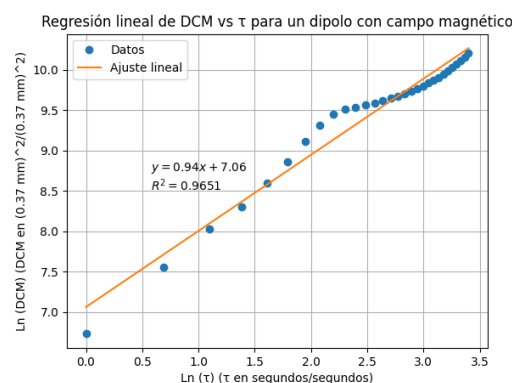


Figura 4.18: Gráfica log-log de DCM contra  $\tau$  correspondiente a un dipolo con influencia de campo magnético externo.

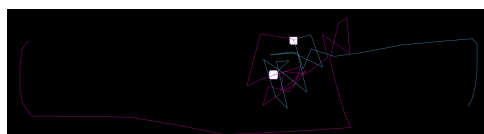
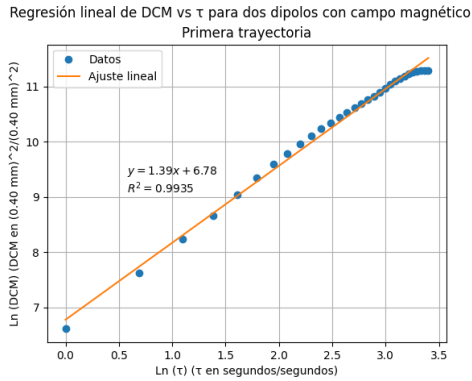


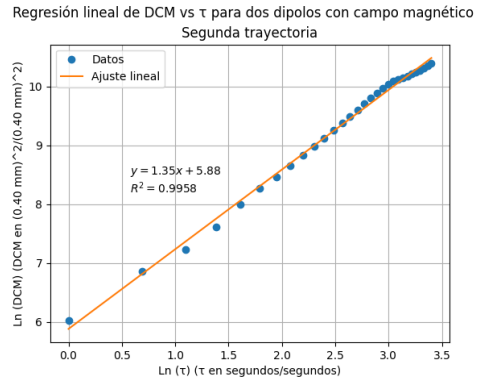
Figura 4.19: Trayectorias de dos dipolos magnéticos con campo magnético externo.



4.1 Movimiento de un dipolo sin interacción con campo magnético externo



H (a) Gráfica  $\ln(\text{DCM})$  vs.  $\ln(\tau)$  del primer dipolo.



(b) Gráfica  $\ln(\text{DCM})$  vs.  $\ln(\tau)$  del segundo dipolo.

Figura 4.20: Desplazamiento cuadrático medio de dos dipolos mutuamente interactuantes con influencia de campo magnético externo.

lineal en la Figura 4.20b es  $y = 1,35x + 5,88$ .

Esto implica que  $\alpha = 1,35$  y  $a = e^{5,88}$ . Por

lo tanto, el desplazamiento cuadrático medio del segundo dispositivo Hexbug tiene la expresión  $\text{DCM} = e^{5,88}t^{1,35}$ .

4.1.8. Movimiento de tres dipolos en presencia de un campo magnético externo al sistema

Partiendo de un sistema compuesto por tres dispositivos Hexbug, cada uno con un dipolo magnético incorporado y bajo influencia de un campo magnético externo sobre el sistema, se registran cincuenta posiciones obtenidas a intervalos regulares de un segundo durante cincuenta segundos. Las trayectorias de cada uno de los dipolos se presentan en la Figura 4.21.

La trayectoria rosa se denomina “Primera trayectoria”, la azul se denomina “Segunda trayectoria” y la trayectoria en blanco se denomina “Tercera trayectoria”.

El desplazamiento cuadrático medio de cada dispositivo Hexbug se calculó para tiempos de retardo  $\tau$  con valores de 1, 2, ..., 30. La Figura 4.22 muestra tres gráficas del logaritmo natural del desplazamiento cuadrático medio dividido por  $(0,41 \text{ mm})^2$  frente al logaritmo natural del tiempo de retardo  $\tau$  dividido por un segundo.

Debido a que la ecuación de la regresión lineal correspondiente a la Figura 4.22a es  $y = 1,06x + 6,80$ , se obtiene que  $\alpha = 1,06$  y  $a = e^{6,80}$ . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático medio correspondiente a la primera trayectoria tiene una expresión de la forma  $\text{DCM} = e^{6,80}t^{1,06}$ .

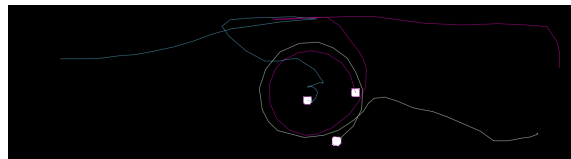


Figura 4.21: Trayectorias de tres dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados: en rosa, “Primera trayectoria”; en azul, “Segunda trayectoria”; en blanco, “Tercera trayectoria”.

4.1 Movimiento de un dipolo sin interacción con campo magnético externo

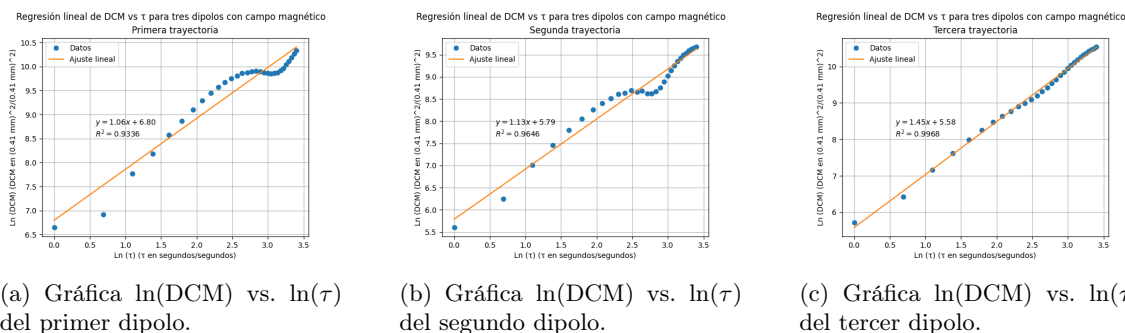


Figura 4.22: Desplazamiento cuadrático medio de tres dipolos mutuamente interactuantes con influencia de campo magnético externo.

Similarmente, partiendo de la ecuación de regresión lineal correspondiente a la Figura 4.22b, se obtiene que  $\alpha = 1,13$  y  $a = e^{5,79}$ . Por consiguiente, el desplazamiento cuadrático medio correspondiente a la segunda trayectoria tiene una expresión de la forma  $DCM = e^{5,79}t^{1,13}$ .

Finalmente, la ecuación de la regresión lineal correspondiente a la Figura 4.22c permite deducir que  $\alpha = 1,45$  y  $a = e^{5,58}$ . En consecuencia, el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al tercer dispositivo Hexbug tiene una expresión de la forma  $DCM = e^{5,58}t^{1,45}$ .

4.1.9. Movimiento de cuatro dipolos en presencia de un campo magnético externo al sistema

Partiendo de un sistema compuesto por cuatro dispositivos Hexbug, cada uno con un dipolo magnético incorporado en su superficie y en presencia de un campo magnético externo al sistema, se registran cincuenta pares ordenados  $(x_i, y_i)$ , correspondientes a las posiciones del dispositivo cada segundo durante un intervalo de cincuenta segundos. Las trayectorias de cada dispositivo se muestran en la Figura 4.23.

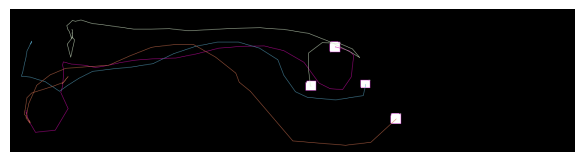


Figura 4.23: Trayectorias de cuatro dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados.

Las trayectorias de color rosa, azul, blanco y café se denominarán como “Primera trayectoria”, “Segunda trayectoria”, “Tercera trayectoria” y “Cuarta trayectoria”, respectivamente.

El desplazamiento cuadrático medio correspondiente a cada dispositivo Hexbug fue obtenido en función del tiempo de retardo  $\tau$  con valores de 1,2,3,...,30.

La Figura 4.28 muestra cuatro gráficas del logaritmo natural del desplazamiento cuadrático medio dividido por  $(0,38\text{ mm})^2$  frente al logaritmo natural del tiempo de retardo  $\tau$  dividido por un segundo. Cada gráfica corresponde a un dispositivo Hexbug distinto.

Partiendo de la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.24,  $y = 1,57x + 5,39$ , se deduce que  $\alpha = 1,57$  y  $a = e^{5,39}$ . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático medio dividido por  $(0,38\text{ mm})^2$  (correspondiente al primer dispositivo Hexbug), tiene una expresión de la forma  $DCM = e^{5,39}t^{1,57}$ .

4.1 Movimiento de un dipolo sin interacción con campo magnético externo

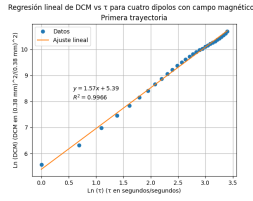


Figura 4.24: Gráfica  $\ln(\text{DCM})$  vs.  $\ln(\tau)$  del primer dipolo.

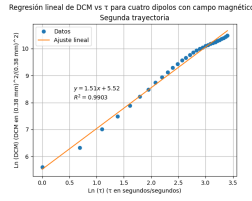


Figura 4.25: Gráfica  $\ln(\text{DCM})$  vs.  $\ln(\tau)$  del segundo dipolo.

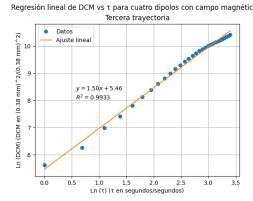


Figura 4.26: Gráfica  $\ln(\text{DCM})$  vs.  $\ln(\tau)$  del tercer dipolo.

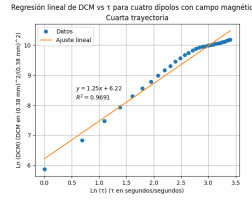


Figura 4.27: Gráfica  $\ln(\text{DCM})$  vs.  $\ln(\tau)$  del cuarto dipolo.

Figura 4.28: Desplazamiento cuadrático medio de cuatro dipolos mutuamente interactuantes con influencia de campo magnético externo.

Adicionalmente, de la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.25,  $y = 1,51x + 5,52$ , se deduce que  $\alpha = 1,51$  y  $a = e^{5,52}$ . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático dividido por  $(0,38\text{mm})^2$  (correspondiente al segundo dispositivo Hexbug), tiene una expresión de la forma  $\text{DCM} = e^{5,52}t^{1,51}$ .

Análogamente, partiendo de la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.26,  $y = 1,50x + 5,46$ , se deduce que  $\alpha = 1,50$  y  $a = e^{5,46}$ . En consecuencia, el desplazamiento cuadrático medio dividido por  $(0,38)^2$  (correspondiente al tercer dispositivo Hexbug), tiene una expresión de la forma  $\text{DCM} = e^{5,46}t^{1,50}$ .

Finalmente, partiendo de la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.27,  $y = 1,25x + 6,22$ . Por consiguiente, el desplazamiento cuadrático medio dividido por  $(0,38\text{mm})^2$  (correspondiente al cuarto dispositivo Hexbug), tiene una expresión de la forma  $\text{DCM} = e^{6,22}t^{1,25}$ .

4.1.10. Movimiento de cinco dipolos en presencia de un campo magnético externo al sistema

Partiendo de un sistema compuesto por cinco dispositivos Hexbug, bajo la influencia de un campo magnético externo al sistema, se hallan cincuenta pares ordenados  $(x_i, y_i)$  correspondientes a la posición de cada dipolo en intervalos de un segundo durante cincuenta segundos. La trayectoria de cada dipolo se muestra en la Figura 4.29. La trayectoria en rosa se designa como “Primera trayectoria”, la trayectoria en azul se identifica como “Segunda trayectoria”, la trayectoria en blanco se denomina “Tercera trayectoria”, la trayectoria en café se denomina “Cuarta trayectoria” y la trayectoria en amarillo se distingue como “Quinta trayectoria”.



Figura 4.29: Trayectorias de cinco dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados.

La Figura 4.30 muestra cinco gráficas del logaritmo natural del desplazamiento cuadrático medio dividido por  $(40\text{mm})^2$  frente al logaritmo natural del tiempo de retardo  $\tau$  dividido por un segundo.

La ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.30a,  $y = 1,13x + 5,41$ , permite deducir que  $\alpha = 1,13$  y  $a = e^{5,41}$ . En consecuencia, se concluye que el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al primer dispositivo Hexbug tiene la expresión  $\text{DCM} = e^{5,41}t^{1,13}$ .

4.1 Movimiento de un dipolo sin interacción con campo magnético externo

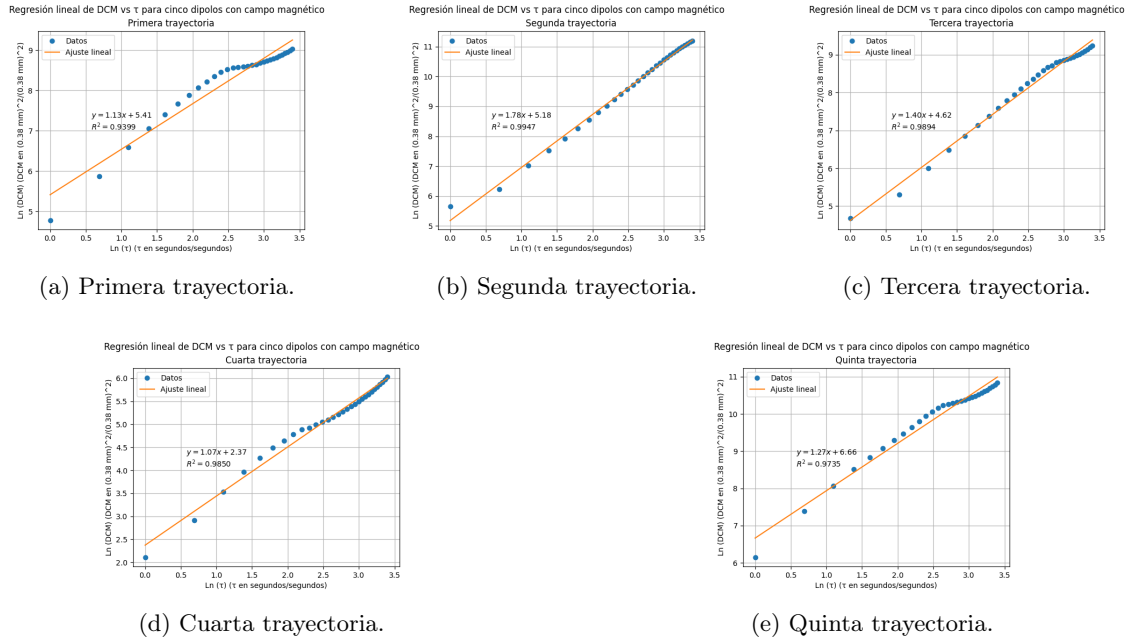


Figura 4.30: Desplazamiento cuadrático medio de cinco dipolos mutuamente interactuantes con influencia de campo magnético externo.

Similarmente, con base en la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.30b,  $y = 1,78x + 5,18$ , se deduce que  $\alpha = 1,78$  y  $a = e^{5,18}$ . Consecuentemente, el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al segundo dipolo tiene la expresión  $DCM = e^{5,18}t^{1,78}$ .

Análogamente, con base en la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.30c,  $y = 1,40x + 4,62$ , se deduce que  $\alpha = 1,40$  y  $a = e^{4,62}$ . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al tercer dipolo tiene la expresión  $DCM = e^{4,62}t^{1,40}$ .

En adición, la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.30d,  $y = 1,07x + 2,37$ , conduce a que  $\alpha = 1,07$  y  $a = e^{2,37}$ . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al cuarto dipolo tiene la expresión  $DCM = e^{2,37}t^{1,07}$ .

Finalmente, la ecuación de regresión lineal presentada en la Figura 4.30e,  $y = 1,27x + 6,66$ , sugiere que  $\alpha = 1,27$  y  $a = e^{6,66}$ . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al quinto dipolo tiene la expresión  $DCM = e^{6,66}t^{1,27}$ .

4.1.11. Movimiento de seis dipolos en presencia de un campo magnético externo al sistema

Partiendo de un sistema compuesto por seis dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados y en presencia de un campo magnético externo al sistema, cincuenta pares ordenados  $(x_i, y_i)$  son obtenidos, un par cada segundo durante un intervalo de cincuenta segundos. Las trayectorias se muestran en la Figura 4.31.

4.1 Movimiento de un dipolo sin interacción con campo magnético externo

Las trayectorias en color rosa, azul, blanco, café y amarillo mantienen las denominaciones establecidas anteriormente. Adicionalmente, la trayectoria en azul rey se denomina “Sexta trayectoria”.

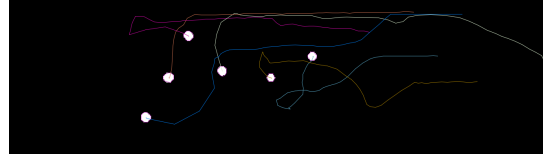
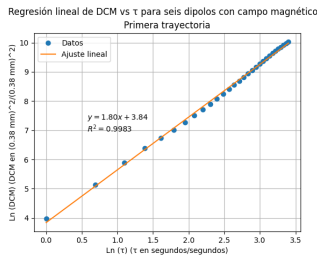
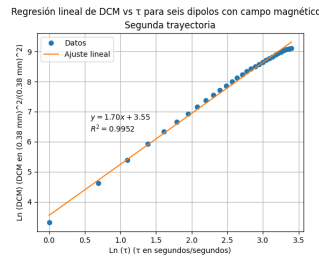


Figura 4.31: Trayectorias de seis dispositivos Hexbug con dipolos magnéticos incorporados.

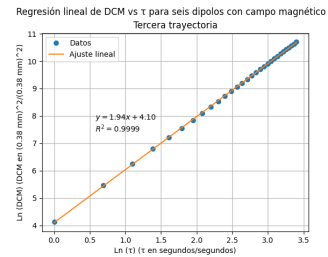
Con base en la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.32a,  $y = 1,80x + 3,84$ , se deduce que  $\alpha = 1,80$  y  $a = e^{3,84}$ . Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al primer dipolo tiene la expresión  $DCM = e^{3,84}t^{1,80}$ .



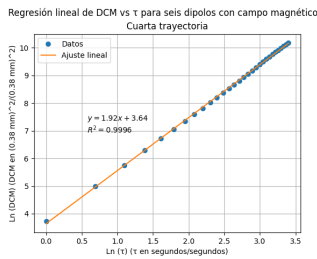
(a) Primera trayectoria.



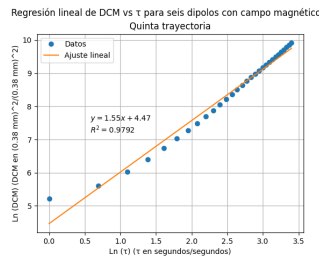
(b) Segunda trayectoria.



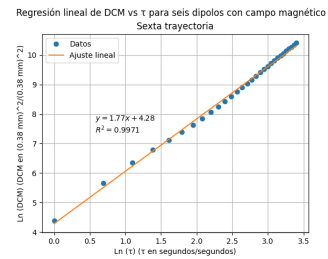
(c) Tercera trayectoria.



(d) Cuarta trayectoria.



(e) Quinta trayectoria.



(f) Sexta trayectoria.

Figura 4.32: Desplazamiento cuadrático medio de seis dipolos mutuamente interactuantes con influencia de campo magnético externo.

Respecto a la Figura 4.32b, la ecuación de regresión lineal es  $y = 1,70x + 3,55$ , por consiguiente,  $\alpha = 1,70$  y  $a = e^{3,55}$ . Se concluye que el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al segundo dipolo tiene la expresión  $DCM = e^{3,55}t^{1,70}$ .

Partiendo de la Figura 4.32c, la ecuación de regresión lineal es  $y = 1,94x + 4,10$ . Por lo tanto,  $\alpha = 1,94$  y  $a = e^{4,10}$ . Se concluye que el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al tercer dipolo tiene la expresión  $DCM = e^{4,10}t^{1,94}$ .

Análogo al caso anterior, la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.32d es  $y = 1,92x + 3,64$ . Por consiguiente,  $\alpha = 1,92$  y  $a = e^{3,64}$ , sugiriendo que el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al cuarto dipolo tiene la expresión  $DCM = e^{3,64}t^{1,92}$ .

Adicionalmente, la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.32e es  $y = 1,55x + 4,47$ . Por lo que se concluye que el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al quinto dipolo

4.1 Movimiento de un dipolo sin interacción con campo magnético externo

tiene la expresión  $DCM = e^{4,47}t^{1,55}$ .

Por último, la ecuación de regresión lineal mostrada en la Figura 4.32f,  $y = 1,77x + 4,28$ , sugiere que el desplazamiento cuadrático medio correspondiente al sexto dipolo tiene la expresión  $DCM = e^{4,28}t^{1,77}$ .

De acuerdo con [47], el exponente de Hurst, denotado por  $H$ , se define a partir del exponente  $\alpha$  al que está elevada la variable  $t$ , mediante la relación  $H = \frac{\alpha}{2}$ .

Según este criterio, se identifican las siguientes regiones en función del valor de  $H$ :

- Si  $H > 1$ , el proceso de difusión se encuentra en la región denominada “Super Balística”.
- Cuando  $H = 1$ , el proceso está en la región balística.
- Para  $H > \frac{1}{2}$ , se observa una región superdifusiva.
- Si  $H = \frac{1}{2}$ , se clasifica como una región de difusión normal.
- Cuando  $H < \frac{1}{2}$ , el proceso se ubica en la región subdifusiva.
- Finalmente, si  $H = 0$ , se habla de una región de confinamiento.

La figura 4.33 muestra los valores del exponente  $\alpha$  para cada dipolo considerado en los experimentos. Las agrupaciones de barras azules, dispuestas una al lado de la otra, representan el número de dipolos en el sistema, y el valor del exponente correspondiente está graficado. Por ejemplo, la primera barra azul indica el valor de  $\alpha$  para un único dipolo sin la influencia de un campo magnético. Similarmente, las dos barras azules situadas en posiciones sucesivas representan los valores de  $\alpha$  para un conjunto de dos dipolos en el sistema.

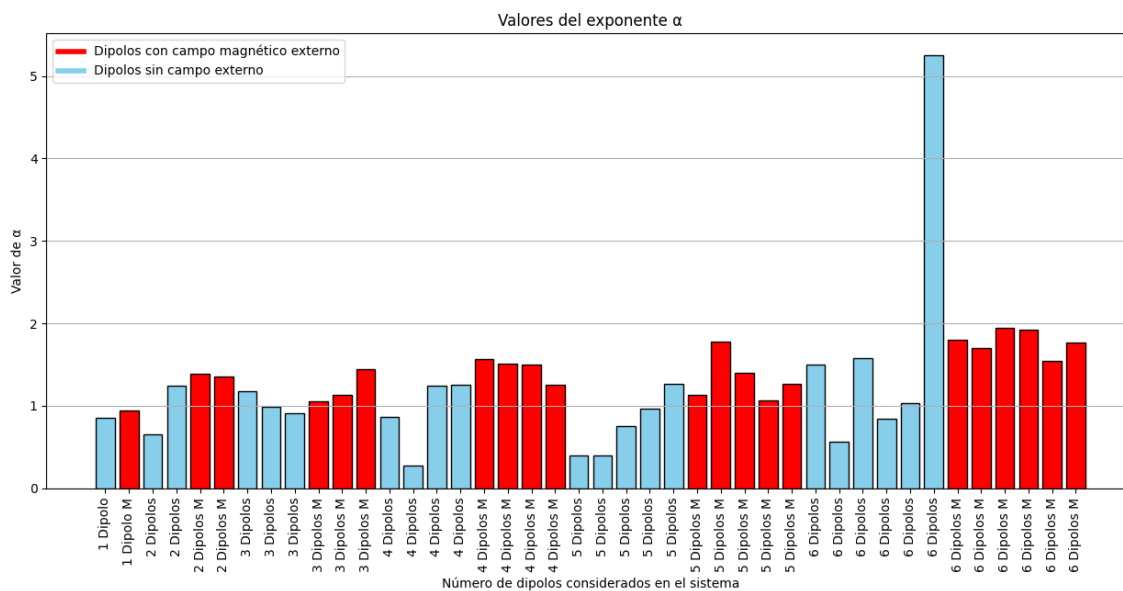


Figura 4.33: Valores del exponente  $\alpha$ . Las barras azules ilustran las agrupaciones de dipolos en el sistema sin la presencia de un campo magnético externo, mientras que las barras rojas reflejan las agrupaciones de dipolos sometidas a la influencia de un campo magnético externo.

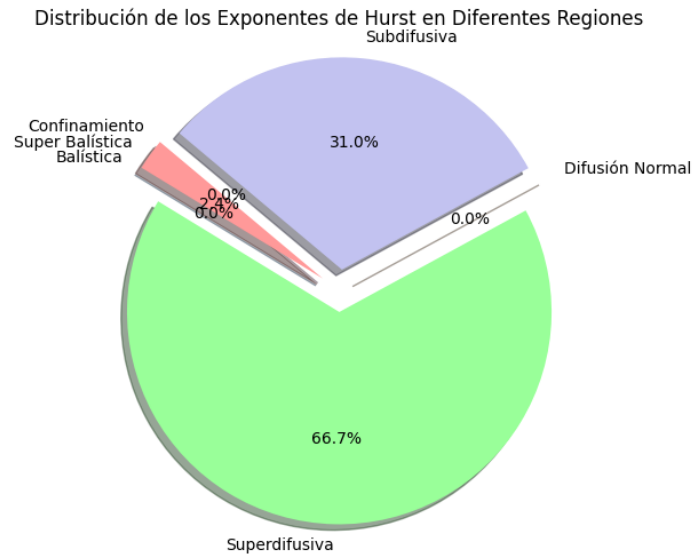


Figura 4.34: Porcentaje de regiones a las que pertenecen los dispositivos locomotores.

En virtud de las consideraciones anteriores, se presenta la figura 4.34, en la cual se indica que el 66,7% de los dispositivos *Hexbug* se desenvuelve en la región superdifusiva.

#### 4.1.12. Ampliación de resultados

En virtud de garantizar la reproducibilidad del experimento planteado al inicio de esta sección, se propone un montaje experimental constituido por un dos bobinas de Helmholtz comerciales. Adicionalmente, con el fin de facilitar la identificación de tendencia o patrones correspondientes a la dinámica de los dispositivos locomotores Hexbug, mediciones adicionales del desplazamiento cuadrático medio fueron realizadas.

Concretamente, las mediciones del DCM como función del tiempo de retardo  $\tau$  presentadas en las subsecciones anteriores fueron extendidas a un sistema compuesto por una bandeja de cartón con anchura de 19 centímetros y una altura de 15 centímetros<sup>1</sup>. Adicionalmente, fue realizada la sustitución de las bobinas correspondientes al montaje experimental anterior por dos bobinas de Helmholtz de la marca PASCO, cuyo modelo puede consultarse en [41], así como las respectivas instrucciones de conexión.

La inclusión de este modelo de bobinas tiene dos implicaciones, las primera, como se ha mencionado, permite que el experimento pueda ser replicado con base a modelos estandarizados, la segunda corresponde a la uniformidad del campo magnético entre ambas bobinas para distancias

<sup>1</sup>Tales dimensiones fueron elegidas con base en las dimensiones de separación entre dos bobinas de Helmholtz de la marca PASCO, como se hace notar a continuación.

de separación de magnitud aproximadamente igual al radio de una bobina, y debido a que el diámetro de las bobinas de Helmholtz de la marca PASCO tienen un diámetro de 30 centímetros, la distancia fija de 15 cm en separación produce un campo magnético que tiende a ser uniforme entre las dos bobinas<sup>2</sup>.

Partiendo de las constricciones impuestas por la caja de cartón, un dispositivo Hexbug fue depositado en su interior.

Con base en una cámara de grabación sujeta en la parte superior de las bobinas de Helmholtz mediante un tripode, grabaciones de diez segundos han sido realizadas. Dos casos han sido considerados, consistiendo el primero de la nula interacción del dispositivo locomotor con campos magnéticos externos<sup>3</sup>, únicamente su desplazamiento.

Partiendo de la configuración descrita, veinte mediciones (grabaciones) han sido realizadas.

En adición al caso anterior, una corriente promedio de 2,01 amperes a un voltio fue suministrada al conjunto de bobinas conectadas en serie. Subsecuentemente, veinte mediciones (grabaciones) del desplazamiento fueron realizadas.

Tomando como base el análisis de puntos de trayectoria provistos por el software ImageJ (tal y como en el experimento anterior), fue realizado el cálculo del desplazamiento cuadrático medio en función del tiempo  $\tau$ .

La gráfica del logaritmo natural del DCM (adimensional) como función del logaritmo natural del tiempo  $\tau$  (adimensional) se presenta en la figura 4.35, donde cada gráfica se muestra con un color distinto, señalando la diferencia entre cada medición.

En relación con la primera medición, la ecuación de regresión lineal correspondiente es  $y = 1,72x + 5,73$ . Similarmente, para la segunda medición,  $y = 1,67x + 5,79$ . Análogamente a los casos subsecuentes, las regresiones lineales halladas son:  $y = 1,69x + 5,76$ ,  $y = 1,72x + 5,66$ ,  $y = 1,66x + 5,83$ ,  $y = 1,69x + 5,73$ ,  $y = 1,59x + 5,94$ ,  $y = 1,68x + 5,76$ ,  $y = 1,44x + 6,97$ ,  $y = 1,26x + 7,42$ ,  $y = 1,51x + 5,91$ ,  $y = 1,51x + 6,09$ ,  $y = 1,62x + 5,31$ ,  $y = 1,81x + 3,73$ ,  $y = 1,54x + 6,20$ ,  $y = 1,55x + 5,80$ ,  $y = 1,71x + 5,66$ ,  $y = 1,60x + 5,91$ ,  $y = 1,71x + 5,63$ ,  $y = 1,69x + 5,84$ .

Dada la notación  $y \equiv \text{Ln}(\text{DCM})$  y  $x \equiv \text{Ln}(t)$  y partiendo de que  $\text{Ln}(\text{DCM}) = \alpha \text{Ln}(t) + \text{Ln}(a)$ , se concluye que el valor promedio de  $\alpha$  corresponde a  $\bar{\alpha} = 1,449$ . Análogamente, el promedio de  $\text{Ln}(a)$  corresponde a  $\text{Ln}(a) = 5,2575$ . Se propone como ecuación de regresión lineal al conjunto de veinte mediciones a la ecuación  $Y_1 = 1,449x + 5,2575$ . Tal ecuación de regresión puede ser observada en la Figura 4.35.

En analogía al caso anterior, veinte mediciones del DCM para un dispositivo Hexbug inmerso en un campo magnético fueron realizadas. La gráfica del logaritmo natural del DCM adimensional como función del tiempo  $\tau$  (adimensional) se presenta en la Figura 4.36.

Respecto a la primera medición del DCM para un Hexbug inmerso en un campo magnético externo, la ecuación de regresión lineal es  $y = 1,6x + 5,84$ . Similarmente, para la segunda medición,  $y = 1,93x + 4,12$ . Para la tercera medición,  $y = 0,97x + 8,07$ . Para las mediciones subsecuentes, la ecuación de regresión lineal es:  $y = 1,88x + 4,16$ ,  $y = 1,06x + 8,08$ ,  $y = 1,80x + 4,01$ ,  $y = 1x + 8,08$ ,  $y = 1,90x + 4,12$ ,  $y = 1,10x + 8,08$ ,  $y = 1,87x + 3,80$ ,  $y = 1,83x + 4,25$ ,  $y = 1,06x + 8,14$ ,  $y = 1,90x + 4,10$ ,  $y = 1,91x + 4,10$ ,  $y = 1,88x + 4,22$ ,  $y = 1,87x + 3,89$ ,  $y = 1,29x + 6,34$ ,  $y = 0,72x + 8,33$ ,  $y = 1,93x + 4,07$ ,  $y = 1,84x + 4,25$ .

Con base en la ecuación adimensional propuesta  $\text{Ln}(\text{DCM}) = \alpha \text{Ln}(t) + \text{Ln}(a)$  y partiendo del valor promedio del coeficiente  $\alpha$  de cada ecuación de regresión,  $\bar{\alpha} = 1,78$  así como el valor promedio  $\text{Ln}(a) = 5,01$  se deduce que el ajuste lineal promedio corresponde a  $Y_2 = 1,78x + 5,01$ .

<sup>2</sup>Una discusión con consideraciones adicionales puede hallarse en [42]

<sup>3</sup>Se ignoran efectos de campo magnético terrestre



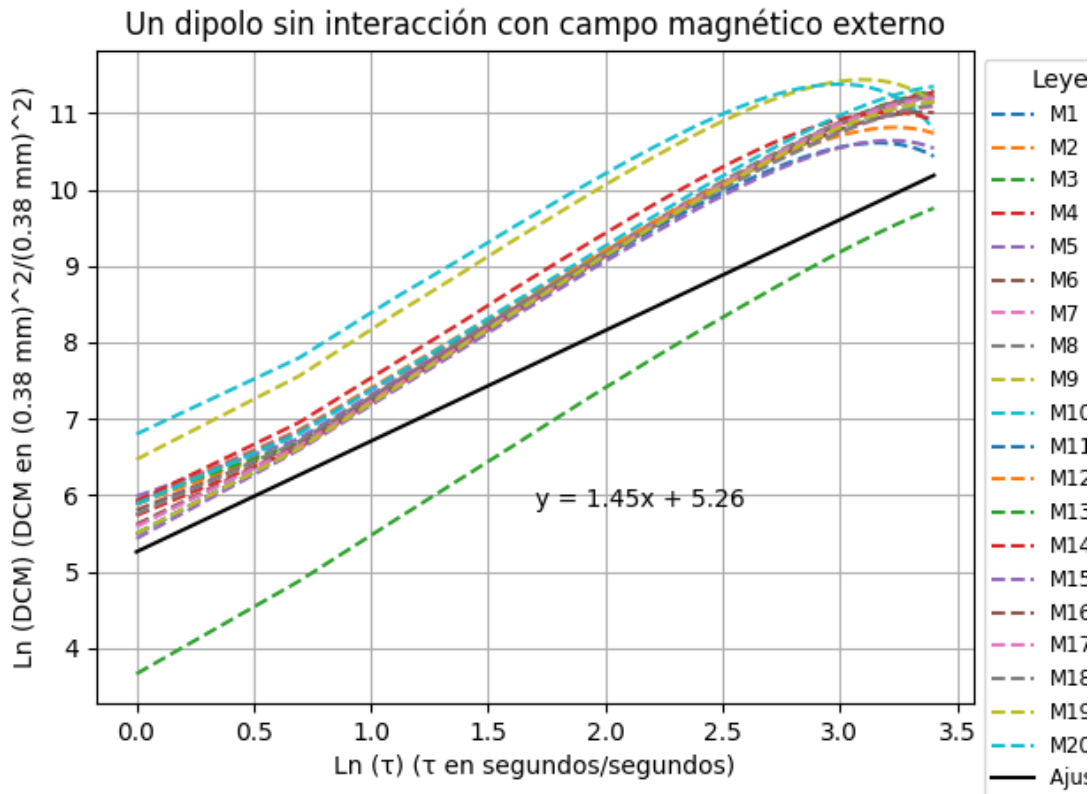


Figura 4.35: Veinticinco mediciones del desplazamiento cuadrático medio

En virtud de las ecuaciones de regresión lineal para los casos en ausencia y presencia de influencia magnética externa,  $Y_1 = 1,449x + 5,2575$  y  $Y_2 = 1,78x + 5,01$ , se deduce que el exponente de Hurst (definido como  $H = \frac{\alpha}{2}$ ) para el primer caso tiene el valor  $H_1 = 0,72 < 1$ . Subsecuentemente, el segundo exponente de Hurst, asociado con el segundo conjunto de mediciones tiene el valor  $H_2 = 0,89 < 1$ . Estos hallazgos sugieren, en concordancia con los datos presentados en la subsección anterior, que tanto los dispositivos Hexbug sin interacción con campo magnético externo como con influencia de este, se desenvuelven en la región superdifusiva. Esta sugerencia concuerda con los datos presentados en la Figura 4.34, donde se presentó que el 66,7% de los dispositivos locomotores también pertenecieron a la región superdifusiva.

## 4.2. Comparación de resultados del primer, segundo y tercer capítulo

Tomando como punto de partida el formalismo de Smoluchowski, presentado en el primer capítulo, la expresión del desplazamiento cuadrático medio hallada en la escala microscópica pa-

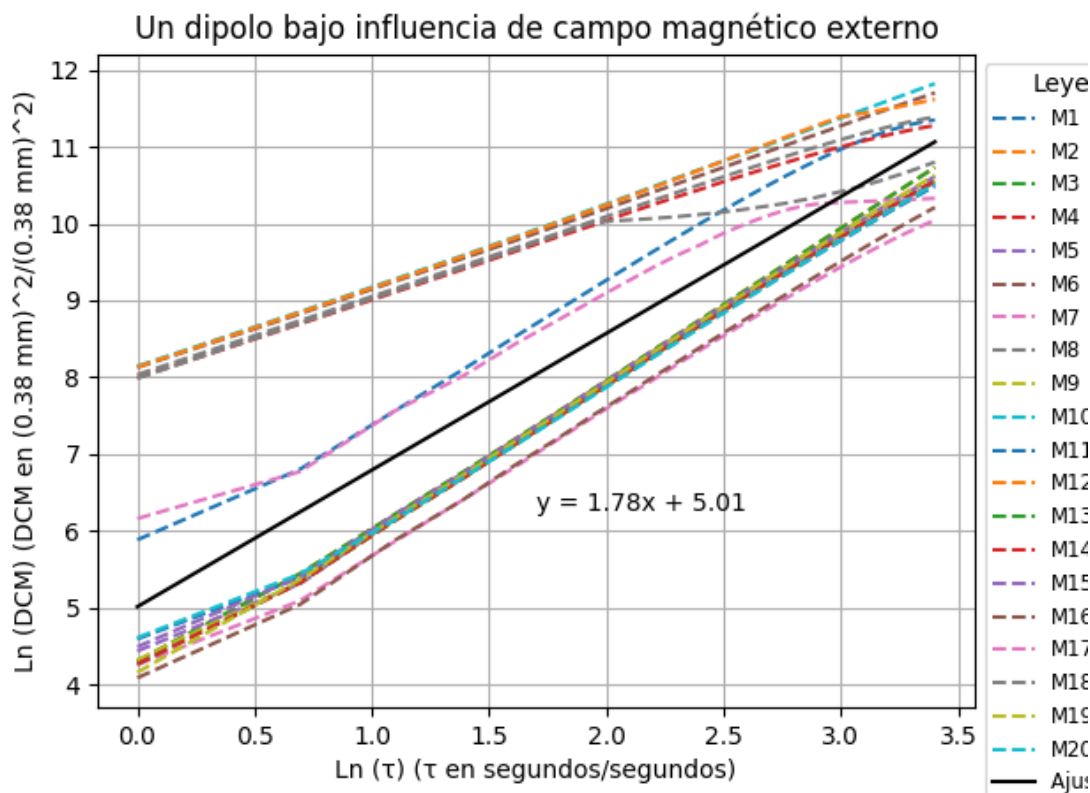


Figura 4.36: Veinte mediciones del DCM bajo interacción con campo magnético producido por bobinas

ra microradadores fue  $W(t) = \left[6D_t + \frac{v_0^2}{D_r^2}\right]t + \frac{v_0^2}{2D_r^2} \{e^{-2D_r t} - 1\}$ , cuya expansión en serie de Taylor alrededor del tiempo 0 permitió deducir dos expresiones,  $W(t) = 6D_t t + v_0^2 t^2 + \dots$  y  $W(t) = \left[6D_t + \frac{v_0^2}{D_r}\right]t \equiv 6D_{Eff}t$ . Esta última corresponde a tiempos largos y presenta linealidad en el tiempo. Por otro lado, la ecuación cuadrática en  $t$  resulta importante, pues se halla una extrapolación de dependencia cuadrática en la escala macroscópica para un intervalo que suele estar entre los 0 segundos y los 5 segundos.

Con base en el segundo capítulo, el análisis del movimiento browniano rotacional de una molécula lineal con momento dipolar  $\mu$  permite deducir la ecuación de movimiento  $\frac{dr(t)}{dt} + \frac{\mu E}{2\zeta} [r(t)^2 - 1] = -\frac{kT}{\zeta} r(t)$ , la cual se ocupa como modelo de analogía para proponer una dependencia angular en el movimiento browniano de un dipolo magnético microscópico. La de dependencia angular a escalas macroscópicas también resulta importante para la dinámica macroscópica, como se ha hecho notar por el experimento.

Una segunda analogía de la dinámica entre dipolos eléctricos y magnéticos puede hacerse con base en la ecuación de Langevin, para el movimiento browniano de una partícula coloidal cargada,

inmersa en un campo magnético constante definido por  $\mathbf{B} = B_0 \hat{k}$ . La ecuación es:

$$m\dot{\mathbf{v}} = -\alpha\mathbf{v} + \frac{q}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B} + \xi$$

donde  $\alpha = 6\pi\eta R$  representa el coeficiente de arrastre con el medio de inmersión y  $\xi$  representa el efecto de las fluctuaciones térmicas sobre la partícula. Particularmente, la componente  $z$  es:

$$\frac{d^2z}{dt^2} = -\gamma \frac{dz}{dt} + \frac{1}{m}\xi_z(t)$$

Partiendo de la independencia de la fuerza aleatoria con la media de  $z$  y con base en la relación  $\frac{1}{2}m\langle v_z^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T$ , se concluye que el desplazamiento cuadrático medio de un coloide moviéndose en dirección del eje  $z$  es:

$$\langle z^2(t) - z^2(0) \rangle = \frac{2k_B T}{6\pi\eta R} t = 2Dt$$

Así como en el caso presentado para el formalismo de Smoluchowski, este último resultado también presenta una dependencia lineal en el tiempo. Para ver una comparación entre resultados hallados con el formalismo de Smoluchowski y Langevin, ver la Tabla 4.1.

Tanto la expresión  $W(t) = \left[6D_t + \frac{v_0^2}{D_r^2}\right] t + \frac{v_0^2}{2D_r^2} \{e^{-2D_r t} - 1\}$  como  $\langle z^2(t) - z^2(0) \rangle = \frac{2k_B T}{6\pi\eta R} t = 2Dt$  coinciden en la característica de linealidad temporal con las ecuaciones de regresión lineal halladas en los experimentos del último capítulo, discrepando únicamente en los factores de pendiente  $m$  y coeficiente adivido  $b$  (como es de esperarse, por tratarse de distintas escalas). Tal dependencial lineal hallada experimentalmente también toma sentido para tiempos largos.

Como se hizo notar al inicio, en el caso experimental dependencias cuadráticas en intervalos entre 0 segundos y 5 segundos (aproximadamente) fueron halladas para el desplazamiento cuadrático medio. También siendo consistente con la dependencia cuadrática  $W(t) = 6D_t t + v_0^2 t^2 + \dots$  hallada en el formalismo de Smoluchowski. Por obvias razones, tal comparación sólo es equiparable en el exponente de  $t$ , no en los coeficientes constantes multiplicativos, cuyo valor está influenciado por la escala.

Tabla 4.1: Similitudes y diferencias entre el formalismo de Smoluchowski y Langevin

Aspecto	Formalismo de Smoluchowski	Formalismo de Langevin
Descripción de movimiento	Describe el movimiento de partículas coloidales, considerando la difusión y la dinámica de los fluidos.	Modela el movimiento de partículas bajo la influencia de fuerzas aleatorias estocásticas y de fricción.
Ecuaciones de Desplazamiento Cuadrático Medio	Para micronadadores, utiliza la expresión exponencial: $W(t) = \left[ 6D_t + \frac{v_0^2}{D_r} \right] t + \frac{v_0^2}{2D_r^2} \{ e^{-2D_r t} - 1 \}.$	Para partículas dipolares sujetas a fuerzas fluctuantes se usa la expresión: $\langle z^2(t) - z^2(0) \rangle = \frac{2k_B T}{6\pi\eta R} t = 2Dt$
Escalas de Tiempo	Proporciona expresiones para tiempos cortos y largos, mostrando linealidad en el tiempo para tiempos largos: $W(t) = \left[ 6D_t + \frac{v_0^2}{D_r} \right] t \equiv 6D_{Eff} t$	Generalmente se utiliza para describir el movimiento en escalas de tiempo intermedias, con énfasis en la naturaleza estocástica del movimiento. Para tiempos medianos: $\langle z^2(t) - z^2(0) \rangle = \frac{2k_B T}{6\pi\eta R} t = 2Dt$
Dependencia Angular	Se centra en el desplazamiento en una dimensión, aunque puede extenderse a más dimensiones.	Introduce la dependencia angular, especialmente relevante para sistemas como moléculas lineales con momentos dipolares.
Aplicaciones	Utilizado para modelar el comportamiento de micronadadores y el desplazamiento cuadrático medio.	Aplicable en el análisis de sistemas con movimiento browniano rotacional y otras dinámicas estocásticas.

## Capítulo 5

# Conclusiones

En el estudio de la dinámica de partículas coloidales en un fluido bajo la influencia de un campo eléctrico constante a lo largo del eje  $z$ , con una intensidad  $E_0$ , la función de densidad de probabilidad obtenida mediante el formalismo de Smoluchowski muestra una dependencia proporcional descrita por:  $P_{eq}(z) \sim e^{\frac{-qE_0z}{k_B T}}$ . Este resultado indica que, en equilibrio térmico, la distribución de la partícula a lo largo del eje  $z$  sigue una función exponencial.

En detalle, la expresión  $e^{\frac{-qE_0z}{k_B T}}$  revela que la probabilidad de localizar la partícula en una posición  $z$  específica decrece exponencialmente con el incremento de  $z$ , dado que  $qE_0$  es positivo.

Otra forma de analizar esta distribución es considerando la energía potencial, dada por  $U(z) = -qE_0z$ . Cuando tanto el campo eléctrico  $E_0$  como la carga  $q$  son positivos, la energía potencial se vuelve más negativa a medida que  $z$  aumenta. Como resultado, la probabilidad de encontrar la partícula en posiciones más altas disminuye. En otras palabras, aunque la partícula tiende a moverse hacia posiciones más altas, es menos probable encontrarla en esas alturas debido a la mayor “dificultad” asociada a alcanzar esas posiciones. Este análisis ilustra cómo el campo eléctrico afecta la distribución espacial de las partículas coloidales, presentando la posible configuración de sus posiciones a lo largo del eje  $z$ . Este resultado es extrapolable con el caso magnético.

En cuanto a los dipolos magnéticos incorporados en los dispositivos *Hexbug*, los resultados experimentales indican que la orientación del dipolo en relación con el campo magnético influye significativamente en la dirección de movimiento de los dispositivos. A diferencia de las partículas coloidales con carga neta positiva o negativa tratadas como conductores, que siguen una dirección determinada en un campo eléctrico sin importar su orientación, los dipolos magnéticos no tienen una trayectoria fija. Su orientación respecto al campo magnético afecta directamente su dirección de desplazamiento, y cualquier cambio en esta orientación puede modificar significativamente su trayectoria. Esto sugiere que, de existir una función de densidad de probabilidad para los dipolos magnéticos como a macroescala, esta dependería de manera crucial tanto de la posición como de la orientación del dipolo. En una analogía, resultados similares han sido detallados para la escala microscópica, específicamente en el contexto del desplazamiento cuadrático medio rotacional de una partícula browniana con momento dipolar  $\mu$ , como se documenta en [46, 39].

Por otro lado, como se observa en la figura 4.34, los dispositivos *Hexbug* muestran un comportamiento de difusión caracterizado por una región subdifusiva. La gráfica de barras en la figura 4.33 sugiere que el exponente  $\alpha$ , obtenido a partir de la pendiente de la regresión lineal del logaritmo

---

natural del desplazamiento cuadrático medio adimensional en función del tiempo de retardo  $\tau$ , para los dispositivos Hexbug sometidos a campos magnéticos, generalmente supera el valor de 1. En contraste, el exponente  $\alpha$  correspondiente a las regresiones lineales de los dipolos en ausencia de campos magnéticos externos, en su mayoría, no supera el valor de 1.

Esto sugiere un cambio en el comportamiento de difusión cuando los dipolos están sujetos a campos magnéticos, lo que podría estar relacionado con una mayor movilidad o diferente dinámica de los dipolos en comparación con la ausencia de campos magnéticos.

En ausencia de campos magnéticos, los valores del exponente  $\alpha$  no suelen superar 1, lo que refuerza la idea de un comportamiento subdifusivo predominante en esas condiciones. En contraste, la presencia de campos magnéticos parece inducir un comportamiento diferente, posiblemente más cercano a la difusión normal o incluso superdifusiva, dependiendo del valor del exponente  $\alpha$ . Tal cercanía es corroborada por los resultados presentados en la subsección “Ampliación de resultados”, donde veinte mediciones para casos de interacción y no interacción con campos magnéticos producidos por bobinas conducen al mismo resultado de superdifusividad.

El análisis a escala macroscópica ha revelado similitudes significativas en la forma gráfica del desplazamiento cuadrático medio, tanto en la escala microscópica como en la macroscópica. Una de tales similitudes corresponde a un comportamiento balístico, cuya característica principal es el comportamiento cuadrático  $\text{DCM} \propto t^2$ . Como se puede ver de en la mayoría de gráficas del desplazamiento en un promedio de los primeros 5 segundos, tal comportamiento se hace evidente. Esta escala ha permitido no solo una comparación efectiva entre los resultados experimentales y las predicciones teóricas, sino también una manipulación detallada y una visualización precisa de los efectos magnéticos.

Por tanto, los resultados de esta investigación no solo sugieren una correspondencia en la representación gráfica del desplazamiento cuadrático medio entre las escalas macroscópicas y los modelos teóricos a escala microscópica, sino que también destacan implicaciones prácticas significativas para la comprensión del comportamiento de los dipolos bajo la influencia de fuerzas externas, incluso en ausencia de una comparación directa con las escalas microscópicas.

En conclusión, estos resultados destacan la complejidad del comportamiento de difusión en sistemas con diferentes tipos de campos externos y ofrecen una base sólida para futuras investigaciones. Se recomienda investigar en mayor profundidad cómo otros factores, como la intensidad del campo magnético y la geometría del sistema, afectan el comportamiento de difusión y la dinámica de los dispositivos Hexbug. Además, sería beneficioso desarrollar modelos teóricos que integren tanto la posición como la orientación dipolar de los dipolos magnéticos para obtener una comprensión más completa de su comportamiento bajo diversas condiciones, incluyendo la interacción de múltiples dipolos. En este contexto, se han realizado intentos de incorporar estos factores a escala macroscópica, como se detalla en [32].

## Apéndice A

# Integración por partes

Partiendo de la expresión  $\int_{-\infty}^{\infty} p_{1,1}(z, t | y) D^1(z) \frac{d\eta(x)}{dx} \Big|_{x=z} dz$ , se definen  $u \equiv p_{1,1}(z, t | y) D^1(z)$  y  $dv = \frac{d\eta(x)}{dx} \Big|_{x=z} dz$ . Por lo que,  $du = \frac{\partial}{\partial z} [p_{1,1}(z, t | y) D^1(z)] dz$  y  $v = \eta(x) \Big|_{x=z} \equiv \eta(z)$ .

Aplicando la relación  $\int_{-\infty}^{\infty} u dv = uv \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} v du$ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} p_{1,1}(z, t | y) D^1(z) \frac{d\eta(x)}{dx} \Big|_{x=z} dz = p_{1,1}(z, t | y) \eta(z) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \eta(z) \frac{\partial}{\partial z} [p_{1,1}(z, t | y) D^1(z)] dz \quad (\text{A.1})$$

Por la hipótesis de que  $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \eta = 0$ , entonces:

$$\int_{-\infty}^{\infty} p_{1,1}(z, t | y) D^1(z) \frac{d\eta(x)}{dx} \Big|_{x=z} dz = - \int_{-\infty}^{\infty} \eta(z) \frac{\partial}{\partial z} [p_{1,1}(z, t | y) D^1(z)] dz \quad (\text{A.2})$$

Análogamente, considerando  $\int_{-\infty}^{\infty} p_{1,1}(x, t | y) D^2(z) \left( \frac{d^2\eta(x)}{dx^2} \right) \Big|_{x=z} dz$ , se definen  $u \equiv p_{1,1}(z, t | y) D^2(z)$ ,  $dv \equiv \left( \frac{d^2\eta(x)}{dx^2} \right) \Big|_{x=z} dz$ . Por lo tanto,  $du = \frac{\partial}{\partial z} [p_{1,1}(z, t | y) D^2(z)] dz$  y  $v = \left( \frac{d\eta(x)}{dx} \right) \Big|_{x=z}$ , entonces:

$$\int_{-\infty}^{\infty} p_{1,1}(x, t | y) D^2(z) \left( \frac{d^2\eta(x)}{dx^2} \right) \Big|_{x=z} dz \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} &= p_{1,1}(z, t | y) D^2(z) \frac{d\eta(x)}{dx} \Big|_{x=z} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta(x)}{dx} \Big|_{x=z} \frac{\partial}{\partial z} [p_{1,1}(z, t | y) D^2(z)] dz \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta(x)}{dx} \Big|_{x=z} \frac{\partial}{\partial z} [p_{1,1}(z, t | y) D^2(z)] dz \quad (\text{A.4}) \end{aligned}$$

Nuevamente, definiendo  $u \equiv \frac{\partial}{\partial z} [p_{1,1}(z, t | y) D^2(z)]$  y  $dv = \frac{d\eta(x)}{dx} \Big|_{x=z} dz$ , se obtienen  $du = \frac{\partial^2}{\partial z^2} [p_{1,1}(z, t | y) D^2(z)] dz$  y  $v = \eta(x) \Big|_{x=z} = \eta(z)$ , por lo tanto:

$$= - \left[ \left( \frac{\partial}{\partial z} [p_{1,1}(z, t | y) D^2(z)] \eta(z) \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x) \Big|_{x=z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} [p_{1,1}(z, t | y) D^2(z)] dz \right] \quad (\text{A.5})$$

Por lo tanto:

$$\int_{-\infty}^{\infty} p_{1,1}(x, t | y) D^2(z) \left( \frac{d^2 \eta(x)}{dx^2} \right) \Big|_{x=z} dz = + \int_{-\infty}^{\infty} \eta(x) \Big|_{x=z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} [p_{1,1}(z, t | y) D^2(z)] dz \quad (\text{A.6})$$



## Apéndice B

# Momento de inercia

### B.1. Cascaron esférico

Partiendo de una esfera en  $\mathbb{R}^3$  y tomando en cuenta que el momento de inercia de un anillo es  $I_{anillo} = MR^2$ , se tiene que  $dI = r^2 dm$ .

Utilizando el hecho de que  $dm = \sigma dA$ , entonces:

$$dI = r^2 \{\sigma dA\} \quad (B.1)$$

Por lo que:

$$I = \int_{Esfera} \frac{m}{4\pi R^2} r^2 dA \quad (B.2)$$

Cuya equivalente ecuación es:

$$I = \frac{m}{4\pi R^2} \int_{Esfera} r^2 \{R^2 \text{Sen}\theta d\theta d\phi\} \quad (B.3)$$

Tomando en cuenta que  $\text{sen}\theta = \frac{r}{R}$ , entonces:

$$I = \frac{mR^2}{2} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \text{Sen}\theta d\theta d\phi \quad (B.4)$$

Cuya solución es:

$$I = \frac{2}{3}\pi R^3 \quad (B.5)$$

### B.2. Esfera sólida

Partiendo de que el diferencial de masa  $dm = \rho v$  donde:

$$\rho = \frac{m}{v} = \frac{m}{\frac{4}{3}\pi R^3} \quad (B.6)$$

Considerando una esfera tridimensional de radio  $R$ , masa  $m$ , densidad de masa  $\rho$ , se tiene que  $dv = \pi x^2 dz$ , por lo que  $dm = \rho \pi x^2 dz$ . Y debido a que  $dI = \frac{1}{2} dm x^2 = \frac{1}{2} (\rho \pi x^2 dz) x^2$ , entonces:

$$I = \int_{-R}^R \left\{ \frac{1}{2} \rho \pi x^4 dz \right\} \quad (\text{B.7})$$

Lo que equivale a:

$$I = \frac{1}{2} \int_{-R}^R \{ \rho \pi x^4 dz \} \quad (\text{B.8})$$

Utilizando el cambio de variable  $x^2 + z^2 = R^2$ , entonces:

$$I = \int_{-R}^R \left\{ \rho \pi (R^2 - z^2)^2 \right\} dz \quad (\text{B.9})$$

Cuyo desarrollo lleva al resultado:

$$I = \frac{2}{5} m R^2 \quad (\text{B.10})$$

Usando el hecho de que  $I = \frac{2}{5} m R^2$ , se llega a que:

$$\tau_{P_\theta} = \frac{I}{\zeta} = \frac{2mR^2}{5\zeta} \quad (\text{B.11})$$

## Apéndice C

# Transformadas de Fourier y Laplace

### C.1. Transformada de Fourier

#### C.1.1. Primera convención

Las transformadas de Fourier presentadas en esta convención se diferencian de las de la segunda convención, que se encuentran debajo de esta subsección, por el signo que multiplica el argumento de la exponencial.

$$\text{Transformada de Fourier: } \mathcal{F}\{f(x, t)\} = f(k, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{ikx} dx \quad (\text{C.1})$$

$$\text{Transformada de Fourier inversa: } f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(k)e^{-ikx} dk \quad (\text{C.2})$$

#### C.1.2. Segunda convención

$$\text{La transformada de Fourier: } \mathcal{F}\{f(x)\}(k) = \hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx} dx \quad (\text{C.3})$$

$$\text{La transformada de Fourier inversa: } \mathcal{F}^{-1}\{\hat{f}(k)\}(x) = f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(k)e^{ikx} dk \quad (\text{C.4})$$

### C.2. Transformada de Laplace

$$\mathcal{L}\{f(t)\} = \tilde{f}(s) = \int_0^{\infty} f(t)e^{-st} dt \quad (\text{C.5})$$

donde el parámetro  $s$  es generalmente complejo con expresión  $s = s_1 + s_2$ .

Propiedades de  $\mathcal{L}$ :

$$\mathcal{L}\{f'(t)\} = s\tilde{f}(s) - f(0) \quad (\text{C.6})$$

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{s + \alpha} \right\} = e^{-\alpha t} \quad (\text{C.7})$$

con  $t > 0$  y  $\text{Re}(s) > -\alpha$ .

### C.3. Integral Gaussiana

#### C.3.1. Integral de exponencial compleja

Con base en el argumento de la exponencial de la ecuación  $P(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dk^2 t + ikx_0 - ikx} dk$ , se propone la siguiente expresión equivalente:

$$\begin{aligned} -Dk^2 t + ikx_0 - ikx &= -Dt \left[ k^2 - \frac{ikx_0}{Dt} + \frac{ikx}{Dt} \right] \\ &= -Dt \left[ k^2 + \frac{ik}{Dt}(x - x_0) + \left( \frac{i(x - x_0)}{2Dt} \right)^2 - \left( \frac{i(x - x_0)}{2Dt} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Por lo tanto:

$$P(x, t) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dt \left[ k + i \frac{(x-x_0)}{2Dt} \right]^2} dk \quad (\text{C.9})$$

En función de la integral presentada en la ecuación C.9, consideramos la siguiente integral de línea sobre el plano complejo:

$$\oint_{\Gamma} e^{-a \left( z - \frac{iw}{2a} \right)^2} dz \quad (\text{C.10})$$

donde  $a = Dt$  y  $w = x - x_0$ . Además,  $\Gamma = \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 + \gamma_4$  representa una curva cerrada en el plano complejo (ver Figura C.1).

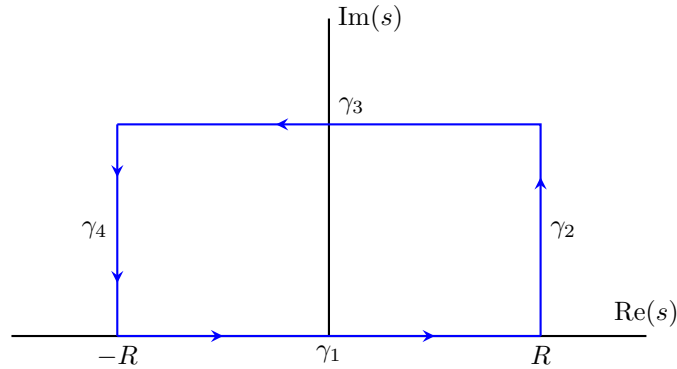


Figura C.1: Curva sobre el plano complejo recorrida en sentido antihorario.

Sean  $\gamma_1 = x$  con  $-R \leq x \leq R$ ,  $\gamma_2 = R + iy$  con  $0 \leq y \leq \frac{w}{2a}$ ,  $\gamma_3 = x + i \frac{w}{2a}$  con  $-R \leq x \leq R$ , y

$\gamma_4 = -R + iy$  con  $0 \leq y \leq \frac{w}{2a}$ . La integral mostrada en C.10 se expresa como:

$$\oint_{\Gamma} e^{-a(z - \frac{iw}{2a})^2} dz = \int_{-R}^R e^{-a(x - \frac{iw}{2a})^2} dx + \int_0^{\frac{w}{2a}} e^{-a[R + i(y - \frac{w}{2a})]^2} idy + \int_R^{-R} e^{-ax^2} dx + \int_{\frac{w}{2a}}^0 e^{-a[-R + i(y - \frac{w}{2a})]^2} idy \quad (C.11)$$

En relación con la segunda y cuarta integral se sabe que:

$$\left| \int_0^{\frac{w}{2a}} e^{-a[R + i(y - \frac{w}{2a})]^2} idy \right| \leq \int_0^{\frac{w}{2a}} |e^{-a[R + i(y - \frac{w}{2a})]^2}| dy \leq M \cdot l = e^{-aR^2} e^{a(\frac{w}{2a})^2} \cdot \frac{w}{2a} \quad (C.12)$$

Tomando el límite cuando  $R \rightarrow \infty$ ,  $e^{-aR^2} e^{a(\frac{w}{2a})^2} \cdot \frac{w}{2a} \rightarrow 0$ . Un caso similar se repite para la cuarta integral. Adicionalmente, de acuerdo con la ecuación C.20, mostrada en la siguiente sección,  $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ .

Con base en los anteriores argumentos y partiendo del Teorema de Cauchy<sup>1</sup> en el contexto de integrales de línea en análisis complejo, se concluye que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x - \frac{iw}{2a})^2} dx - \sqrt{\frac{\pi}{a}} = 0 \Leftrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x - \frac{iw}{2a})^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (C.13)$$

Por lo anterior, se concluye que:

$$P(x, t) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dt[k + i\frac{(x-x_0)}{2Dt}]^2} dk = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{Dt}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}} \quad (C.14)$$

### C.3.2. Integral Gaussiana

Considérese la integral Gaussiana:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha^2 x^2} e^{\beta x} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha^2 x^2 + \beta x} \quad (C.15)$$

Completando cuadrados para el argumento de la exponencial:

$$-\alpha^2 x^2 + \beta x = -\{\alpha^2 x^2 - \beta x\} = -\alpha^2 \left\{ x^2 - \frac{\beta}{\alpha^2} x \right\} = -\alpha^2 \left\{ \left( x - \frac{\beta}{2\alpha^2} \right)^2 - \left( \frac{\beta}{2\alpha^2} \right)^2 \right\} \quad (C.16)$$

Sustituyendo en el argumento de la exponencial:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha^2 x^2} e^{\beta x} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha^2 \left\{ \left( x - \frac{\beta}{2\alpha^2} \right)^2 - \left( \frac{\beta}{2\alpha^2} \right)^2 \right\}} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha^2 \left( x - \frac{\beta}{2\alpha^2} \right)^2} e^{\alpha^2 \left( \frac{\beta}{2\alpha^2} \right)^2} \quad (C.17)$$

---

<sup>1</sup>**Teorema de Cauchy:** Si una función  $f(z)$  es analítica en y sobre una región simplemente conexa  $D$  y  $\Gamma$  es una curva cerrada contenida en  $D$ , entonces

$$\oint_{\Gamma} f(z) dz = 0.$$

Sea  $u \equiv x - \frac{\beta}{2\alpha^2}$ , entonces:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha^2 x^2} e^{\beta x} = e^{\alpha^2 (\frac{\beta}{2\alpha^2})^2} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-\alpha^2 u^2} \quad (\text{C.18})$$

Cuya solución es:

$$e^{\alpha^2 (\frac{\beta}{2\alpha^2})^2} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-\alpha^2 u^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} e^{\alpha^2 (\frac{\beta}{2\alpha^2})^2} \quad (\text{C.19})$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha^2 x^2} e^{\beta x} = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} e^{\alpha^2 (\frac{\beta}{2\alpha^2})^2} \quad (\text{C.20})$$

### C.3.3. Método alternativo de solución para $P(x, t)$

La solución a la ecuación de difusión de Fick se deriva considerando que todas las partículas coloidales inicialmente se encuentran en el origen del sistema de coordenadas para  $t = 0$ . En el caso unidimensional de la coordenada cartesiana  $x$ , esto se expresa como  $P(x, 0) = \delta(x - x_0)$ , tal que  $x_0(t = 0) = 0$ .

Usando la transformada de Fourier [véase C.1] para variables espaciales y la transformada de Laplace [véase C.2] para variables temporales, la ecuación 1.5 se transforma al dominio de Laplace de la siguiente manera:

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} \right\} = \mathcal{L} \left\{ D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \right\} \Leftrightarrow \int_0^{\infty} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} e^{st} dt = D \int_0^{\infty} \frac{\partial P(x, t)}{\partial x^2} e^{st} dt \quad (\text{C.21})$$

De acuerdo con la propiedad<sup>2</sup> mostrada en la ecuación C.6, se obtiene la expresión  $s\tilde{P}(x, s) - \tilde{P}(x, 0) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_0^{\infty} P(x, t) e^{-st} dt$ . De acuerdo con la definición de la transformada de Laplace (ver la ecuación C.5), el lado derecho de la igualdad se convierte en  $D \frac{\partial^2 \tilde{P}}{\partial x^2}$ . Por consiguiente:

$$s\tilde{P}(x, s) - \tilde{P}(x, 0) = D \frac{\partial^2 \tilde{P}(x, s)}{\partial x^2} \Leftrightarrow s\tilde{P}(x, s) - \delta(x - x_0) = D \frac{\partial^2 \tilde{P}(x, s)}{\partial x^2} \quad (\text{C.22})$$

Transformando la ecuación al dominio de Fourier (ver la ecuación C.3):

$$s \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{P}(x, s) e^{-ikx} dx - \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) e^{-ikx} dx = D \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 \tilde{P}(x, s)}{\partial x^2} e^{-ikx} dx \quad (\text{C.23})$$

Definiendo  $u = e^{-ikx}$  y  $dv = \frac{\partial^2 \tilde{P}(x, s)}{\partial x^2} dx$  e integrando por partes<sup>3</sup> dos veces consecutivas, se concluye que  $s\hat{P}(k, s) - e^{-ikx_0} = -Dk^2 \hat{P}(k, s)$ . (La notación:  $\hat{P}$  indica que la transformada de Fourier se ha aplicado a  $P$ , en concordancia con la notación presentada en la ecuación C.3. )

Entonces:

$$\hat{P}(k, s) = \frac{e^{-ikx_0}}{s + Dk^2} \quad (\text{C.24})$$

Aplicando las transformadas inversas de  $\mathcal{L}$  y  $\mathcal{F}$  a  $\hat{P}(k, s)$  (ver las ecuaciones C.4 y C.7), respectivamente:

<sup>2</sup>La expresión mostrada en la ecuación C.6 es:  $\mathcal{L} \{f'(t)\} = s\tilde{f}(s) - f(0)$

<sup>3</sup> $\int_{-\infty}^{\infty} u dv = uv|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} v du$

$$P(x, t) = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \mathcal{L}^{-1} \left\{ \hat{P}(x, s) \right\} \right\} = \mathcal{F}^{-1} \left\{ e^{-ikx_0} \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{s + Dk^2} \right\} \right\} = \mathcal{F}^{-1} \left\{ e^{-ikx_0} e^{-Dk^2 t} \right\} \quad (\text{C.25})$$

$$\Rightarrow P(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left[ e^{-ikx_0} e^{-Dk^2 t} \right] e^{ikx} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-Dtk^2} e^{ik(x-x_0)} \quad (\text{C.26})$$

En consecuencia, se obtiene<sup>4</sup>:

$$P(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-(\sqrt{Dt})^2 k^2} e^{ik(x-x_0)} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{Dt}} e^{-Dt \left[ \frac{(x-x_0)}{2Dt} \right]^2} \quad (\text{C.28})$$

Se concluye que:

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\left[ \frac{(x-x_0)^2}{4Dt} \right]} \quad (\text{C.29})$$

Para el caso de tres dimensiones, la expresión incluye un factor de  $\frac{1}{(\sqrt{4\pi Dt})^{3/2}}$ , y la exponencial involucra vectores.

$$P(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-(\sqrt{Dt})^2 k^2} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0)} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{\pi}{Dt}} e^{-\left( \frac{|\vec{x} - \vec{x}_0|^2}{4Dt} \right)} \quad (\text{C.30})$$

---

<sup>4</sup>Se ha empleado la solución de una integral gaussiana en la siguiente forma:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha^2 x^2 + \beta x} = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} e^{\alpha^2 \left( \frac{\beta}{2\alpha^2} \right)^2} \quad (\text{C.27})$$

Para una explicación detallada, se remite a la sección C.3.





## Apéndice D

# Triple rotacional actuando sobre $\mathbf{u}$

### D.1. Triple rotacional actuando sobre $\mathbf{u}$

Se sabe que el campo vectorial  $\mathbf{u}$  tiene la forma:

$$\mathbf{u} = \hat{\mathbf{r}} \left[ \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right] + \hat{\theta} \left[ -\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right] + \hat{\phi} [0] \quad (\text{D.1})$$

El cual también se puede expresar de forma equivalente como:

$$\mathbf{u} = \nabla \times \left[ \frac{\psi}{r \sin \theta} \hat{\phi} \right] \quad (\text{D.2})$$

La verificación de este resultado es la siguiente:

$$\mathbf{u} = \nabla \times \left[ \frac{\psi}{r \sin \theta} \hat{\phi} \right] = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{r}} & r\hat{\theta} & r \sin \theta \hat{\phi} \\ \frac{\partial}{\partial r} & \frac{\partial}{\partial \theta} & \frac{\partial}{\partial \phi} \\ 0 & r(0) & \psi \end{vmatrix} = \mathbf{u} = \hat{\mathbf{r}} \left[ \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right] - \hat{\theta} \left[ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right] + \hat{\phi} [0] \quad (\text{D.3})$$

Así que el rotacional de  $\mathbf{u}$ , se expresa como:

$$\nabla \times \mathbf{u} = \nabla \times \left[ \nabla \times \left( \frac{\psi}{r \sin \theta} \hat{\phi} \right) \right] \quad (\text{D.4})$$

y su desarrollo está dado por:

$$\nabla \times \mathbf{u} = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{r}} & r\hat{\theta} & r \sin \theta \hat{\phi} \\ \frac{\partial}{\partial r} & \frac{\partial}{\partial \theta} & \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} & r \left( \frac{-1}{r \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) & 0 \end{vmatrix} = -\frac{\hat{\phi}}{r \sin \theta} \left[ \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\sin \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) \right] \quad (\text{D.5})$$

Por lo tanto:

$$\nabla \times \left[ \nabla \times \left( \frac{\psi}{r \sin \theta} \hat{\phi} \right) \right] = \nabla \times \mathbf{u} = -\frac{\hat{\phi}}{r \sin \theta} \left[ \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\sin \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) \right] \quad (\text{D.6})$$

Nótese el siguiente patrón, en la ecuación D.6 el rotacional fue aplicado dos veces sobre  $\left(\frac{\hat{\varphi}}{r \text{sen}\theta}\psi\right)$ , dando como resultado el operador  $\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\text{sen}\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta}\right)\right]$  actuando sobre  $\psi$ , multiplicado por el término  $\left(-\frac{\hat{\varphi}}{r \text{sen}\theta}\right)$ , i.e.,  $\left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\text{sen}\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta}\right)\right] \left(-\frac{\hat{\varphi}}{r \text{sen}\theta}\right)$ . Se deduce que al aplicar el rotacional dos veces consecutivas al siguiente término,  $\nabla \times \left[\nabla \times \left(\frac{\psi}{r \text{sen}\theta} \hat{\varphi}\right)\right]$ , se debe obtener que<sup>1</sup>:

$$\nabla \times [\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u})] = (-1) \left(-\frac{\hat{\varphi}}{r \text{sen}\theta}\right) \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\text{sen}\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta}\right)\right] \left\{\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\text{sen}\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta}\right)\right\} \quad (\text{D.7})$$

Ahora, recuérdese que se aplicó la ecuación de Navier-Stokes en la forma  $\nabla p = \mu \nabla^2 \mathbf{u}$  y tras aplicar el rotacional a ambos lados de tal ecuación para eliminar  $p$ , se obtiene que  $\mu \nabla \times \nabla^2 \mathbf{u} = 0$ . Y como existe la identidad para campos vectoriales:  $\nabla^2 \mathbf{u} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u})$ , tal que  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$  debido a la condición de incompresibilidad, se concluye que  $\mu \nabla \times [-\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u})] = 0$ . Pero como el desarrollo de esta última expresión se muestra en la ecuación D.7, entonces:

$$\left(\frac{\hat{\varphi}}{r \text{sen}\theta}\right) \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\text{sen}\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta}\right)\right] \left\{\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\text{sen}\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta}\right)\right\} = 0 \quad (\text{D.8})$$

Debido a que el vector base  $\hat{\varphi}$  no puede ser cero, se deduce que:  $\frac{1}{r \text{sen}\theta} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} \left\{\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\text{sen}\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta}\right)\right\} + \frac{\text{sen}\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left\{\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\text{sen}\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta}\right)\right\}\right)\right] = 0$  y tal operación se denotará por:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\text{sen}\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta}\right)\right]^2 \psi = 0 \quad (\text{D.9})$$

---

<sup>1</sup>Puede realizarse todo el cálculo, al final se llega al mismo resultado

## Apéndice E

# Componentes del vector de estrés

Con base en la ecuación D.9, presentada en el apéndice D.1, se define  $E^2 \equiv \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\text{sen}\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{1}{\text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right]^2$ . Así que la ecuación D.5 se puede expresar en forma equivalente como  $\nabla \times \mathbf{u} = \left[ 0, 0, \frac{-1}{r \text{sen}\theta} E^2 \psi \right]$ . Adicionalmente, con base en la identidad  $\nabla^2 \mathbf{u} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u})$  y partiendo de la expresión  $\nabla p = \mu \nabla^2 \mathbf{u}$ , entonces  $\nabla p = \mu [-\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u})]$  (debido a la condición de incompresibilidad), por lo que:

$$\nabla p = -\mu \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}) = -\mu \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{r}} & \frac{\hat{\theta}}{r \text{sen}\theta} & \frac{\hat{\phi}}{r} \\ \frac{\partial}{\partial r} & \frac{\partial}{\partial \theta} & \frac{\partial}{\partial \phi} \\ 0 & 0 & -E^2 \psi \end{vmatrix} = -\frac{\mu}{r^2 \text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (E^2 \psi) \hat{\mathbf{r}} - \frac{\mu}{r \text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial r} (E^2 \psi) \hat{\theta} \quad (\text{E.1})$$

Por lo tanto:

$$\frac{\partial p}{\partial r} \hat{\mathbf{r}} + \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} \hat{\theta} + \frac{1}{r \text{sen}\theta} \frac{\partial p}{\partial \phi} \hat{\phi} = -\frac{\mu}{r^2 \text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (E^2 \psi) \hat{\mathbf{r}} - \frac{\mu}{r \text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial r} (E^2 \psi) \hat{\theta} + 0 \hat{\phi} \quad (\text{E.2})$$

Tras igualar componente a componente, de acuerdo a las bases vectoriales, las siguientes expresiones son obtenidas:

$$\frac{\partial p}{\partial r} = -\frac{\mu}{r^2 \text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (E^2 \psi) \quad \text{y} \quad \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} = -\frac{\mu}{r \text{sen}\theta} \frac{\partial}{\partial r} (E^2 \psi) \quad (\text{E.3})$$

Por otro lado, se sabe de la ecuación 1.31 que  $\psi = \frac{u_\infty}{2} \left[ r^2 + \frac{R^3}{2r} - \frac{3Rr}{2} \right] \sin^2 \theta$ . Si se efectúa la acción del operador  $E^2$  sobre  $\psi$ , se obtiene que  $E^2 \psi = \frac{3}{2} u_\infty R r^{-1} \text{sen}^2 \theta$ , cuya sustitución en las expresiones presentadas en la ecuación E.3 permite hallar que:

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \frac{3}{2} \frac{\mu u_\infty R}{r^3} (2 \cos \theta) \quad \text{y} \quad \frac{\partial p}{\partial \theta} = \frac{3 \mu u_\infty R}{2 r^2} \text{sen} \theta \quad (\text{E.4})$$

Integrando ambos lados de la primera expresión presentada en E.4 con respecto a r conduce a la expresión  $p = \frac{-3}{2} \frac{\mu u_\infty R}{r^2} \cos \theta + c_1$ . Mientras que la integración de la segunda expresión con respecto a  $\theta$  conduce a la expresión  $p = \frac{-3}{2} \frac{\mu u_\infty R}{r^2} \cos \theta + c_2$ . Por lo tanto, se concluye que  $P = P_\infty - \frac{3}{2} \frac{\mu u_\infty R}{r^2} \cos \theta$ .

### E.0.1. Componentes del tensor de estrés

De acuerdo con la obra titulada *Computational Aerodynamics* del autor Andrew Ning, las componentes del tensor de tensiones (*stress tensor*) tienen la forma:

$$t_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2\mu}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (\text{E.5})$$

Y dada la presencia de un fluido incompresible,  $\frac{\partial u_k}{\partial x_k} = \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ , sólo se trabaja con el primer término. Adicionalmente, se resta el término  $P$ , denominado presión, el cual es la media de la tres tensiones normales a un punto, i.e.  $P = -\frac{1}{3}(t_{11} + t_{22} + t_{33})$ . [1]

Partiendo de las componentes del tensor de tensiones en coordenadas esféricas:

$$t_{rr} = -P + 2\mu \frac{\partial u_r}{\partial r} = t_{rr} = -P + 2\mu \frac{\partial}{\partial r} \left[ u_\infty \frac{3R}{2r^2} - \frac{3R^3}{2r^4} \right] \Big|_{r=0} \cos\theta \quad (\text{E.6})$$

Debido a que  $P = P_\infty - \frac{3}{2} \frac{\mu u_\infty R}{r^2} \cos\theta$ , entonces:

$$t_{rr} = -P_\infty + \frac{3}{2} \frac{\mu u_\infty R}{R^2} \cos\theta + 2\mu u_\infty \frac{3}{2} \frac{1}{R} \cos\theta - 3u_\infty \mu \frac{1}{R} \cos\theta \quad (\text{E.7})$$

Por lo tanto,

$$t_{rr} = -P_\infty + \frac{3}{2} \frac{\mu u_\infty R}{R^2} \cos\theta \quad (\text{E.8})$$

Por otra parte,

$$t_{\theta\theta} = \mu r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_\theta}{r} \right) + \frac{\mu}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} = \quad (\text{E.9})$$

$$\begin{aligned} & \mu R \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \left( -u_\infty + u_\infty \frac{R^3}{4r^3} + u_\infty \frac{3R}{4r} \right) \right) \Big|_{r=R} \text{sen}\theta + \frac{\mu}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[ -u_\infty \text{sen}\theta \left( 1 + \frac{R^3}{2r^3} - \frac{3R}{2r} \right) \right] \Big|_{r=R} \\ & t_{\theta\theta} = \mu \left[ \frac{-3u_\infty}{4R} - \frac{3u_\infty}{4R} \right] \text{sen}\theta - u_\infty \mu \frac{5}{6R} \text{sen}\theta = \left[ \frac{-6}{4R} - \frac{\mu u_\infty 5}{6R} \right] \text{sen}\theta \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

Se concluye que:

$$t_{\theta\theta} = \frac{-2}{3} \frac{\mu}{R} u_\infty \text{sen}\theta \quad (\text{E.11})$$

## E.1. Teorema integrales de Gauss y Stokes e integración parcial

Sea  $W$  una región elemental en el espacio, simétrica y sea  $\partial W$  la superficie cerrada preservadora de la orientación, que acota al volúmen  $W$ . Adicionalmente, sea  $F(\mathbf{r})$  un campo vectorial continuo definido en  $W$ .

Dada  $f(\mathbf{r}) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  una función escalar y  $G(\mathbf{r})$  un campo vectorial tal que  $F(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r})G(\mathbf{r})$ , se tiene que:

$$\int_W d\mathbf{r} \nabla \cdot [f(\mathbf{r})G(\mathbf{r})] = \int_W d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}) + \int_W d\mathbf{r} \mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot \nabla f(\mathbf{r}) \quad (\text{E.12})$$

Aplicando el teorema de la divergencia de Gauss al lado izquierdo de la ecuación E.12:

$$\int_{\partial W} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{S} = \int_W d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}) + \int_W d\mathbf{r} \mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot \nabla f(\mathbf{r}) \quad (\text{E.13})$$

Considerada una superficie  $S$  de radio  $R \rightarrow \infty$ , la divergencia evaluada en tal superficie tiende a 0, por lo que se deduce que:

$$\int d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r} \mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot \nabla f(\mathbf{r}) \Rightarrow f(\mathbf{r}) \nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}) = -\mathbf{G}(\mathbf{r}) \cdot \nabla f(\mathbf{r}) \quad (\text{E.14})$$

Por otro lado, sea  $g(\mathbf{r}) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  una función escalar. Definiendo  $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) \nabla g(\mathbf{r})$  donde  $f$  y  $g$  son escalares, se tiene que<sup>1</sup>:

$$\int_W d\mathbf{r} \nabla \cdot [f(\mathbf{r}) \nabla g(\mathbf{r})] = \int_W d\mathbf{r} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot \nabla g(\mathbf{r}) + \int_W d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \nabla^2 g(\mathbf{r}) \quad (\text{E.16})$$

Aplicando el teorema de la divergencia de Gauss al lado izquierdo de la igualdad:

$$\int_{\partial W} [f(\mathbf{r}) \nabla g(\mathbf{r})] \cdot d\mathbf{S} = \int_W d\mathbf{r} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot \nabla g(\mathbf{r}) + \int_W d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \nabla^2 g(\mathbf{r}) \quad (\text{E.17})$$

Para una superficie  $S$  de radio  $R \rightarrow \infty$ :

$$- \int_W d\mathbf{r} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot \nabla g(\mathbf{r}) = \int_W d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \nabla^2 g(\mathbf{r}) \Rightarrow -\nabla f(\mathbf{r}) \cdot \nabla g(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) \nabla^2 g(\mathbf{r}) \quad (\text{E.18})$$

Intercambiando las funciones  $f(\mathbf{r})$  y  $g(\mathbf{r})$  en la ecuación E.16, entonces  $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}) \nabla f(\mathbf{r})$

$$\int_W d\mathbf{r} \nabla \cdot [g(\mathbf{r}) \cdot \nabla f(\mathbf{r})] = \int_W d\mathbf{r} \nabla g(\mathbf{r}) \cdot \nabla f(\mathbf{r}) + \int_W d\mathbf{r} g(\mathbf{r}) \nabla^2 f(\mathbf{r}) \quad (\text{E.19})$$

$$\Rightarrow - \int_W d\mathbf{r} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot \nabla g(\mathbf{r}) = \int_W d\mathbf{r} g(\mathbf{r}) \nabla^2 f(\mathbf{r}) \Rightarrow -\nabla f(\mathbf{r}) \cdot \nabla g(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}) \nabla^2 f(\mathbf{r}) \quad (\text{E.20})$$

Se la ecuación E.18 y la ecuación E.20 se concluye que:

$$f \nabla^2 f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) \nabla^2 g(\mathbf{r}) \quad (\text{E.21})$$

Sea  $S$  una superficie orientable de clase  $C^2$  dada por  $z = f(x, y)$  para  $(x, y) \in D \subset \mathbb{R}^2$ , una región a la cual aplica el teorema de Green. Adicionalmente, sea  $\mathbf{F}$  un campo vectorial de clase  $C^1$  definido sobre  $S$ .

Definiendo  $\mathbf{F}(\hat{\mathbf{u}}) = f(\hat{\mathbf{u}}) \mathbf{G}(\hat{\mathbf{u}})$  y  $d\mathbf{S} = \hat{\mathbf{u}} d\hat{\mathbf{u}}$ , entonces <sup>2</sup> :

$$\int_S [\nabla_{\hat{\mathbf{u}}} \times \mathbf{F}] \cdot d\mathbf{S} = \int_S d\hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{u}} \cdot [\nabla_{\hat{\mathbf{u}}} \times \mathbf{F}(\hat{\mathbf{u}})] \quad (\text{E.22})$$

<sup>1</sup>Usando la siguiente relación:

$$\nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}) = \nabla \cdot [f(\mathbf{r}) \nabla g(\mathbf{r})] = \nabla f(\mathbf{r}) \cdot \nabla g(\mathbf{r}) + f(\mathbf{r}) \nabla^2 g(\mathbf{r}) \quad (\text{E.15})$$

<sup>2</sup>Donde  $\nabla_{\hat{\mathbf{u}}} \equiv \frac{\partial}{\partial u_x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial u_y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k}$  y el diferencial  $d\hat{\mathbf{u}} \equiv \text{sen}\theta d\theta$

Aplicando el teorema de Stokes:

$$\int_S d\hat{\mathbf{u}} \cdot [\nabla_{\hat{\mathbf{u}}} \times \mathbf{F}(\hat{\mathbf{u}})] = \int_{\partial S} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{l} \quad (\text{E.23})$$

En virtud de la propiedad  $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c}$  y partiendo de que  $\hat{\mathbf{R}} \equiv \hat{\mathbf{u}} \times \nabla_{\hat{\mathbf{u}}}$ , entonces:

$$\int_S d\hat{\mathbf{u}} \cdot [\nabla_{\hat{\mathbf{u}}} \times \mathbf{F}(\hat{\mathbf{u}})] = \int_S d\hat{\mathbf{u}} [\hat{\mathbf{u}} \times \nabla_{\hat{\mathbf{u}}}] \cdot \mathbf{F}(\hat{\mathbf{u}}) \quad (\text{E.24})$$

Considerando una superficie  $S$  de radio  $R \rightarrow \infty$ , las el campo vectorial  $\hat{\mathbf{u}}$  tiende a 0:

$$\therefore \int_S d\hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{F}(\hat{\mathbf{u}}) = 0 \quad (\text{E.25})$$

Adicionalmente, definimos  $\mathbf{F}(\hat{\mathbf{u}}) = f(\hat{\mathbf{u}})\mathbf{G}(\hat{\mathbf{u}})$ , entonces:

$$\int_S d\hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{R}} \cdot [f(\hat{\mathbf{u}})\mathbf{G}(\hat{\mathbf{u}})] = \int_S d\hat{\mathbf{u}} f(\hat{\mathbf{u}}) \hat{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{G}(\hat{\mathbf{u}}) + \int_S d\hat{\mathbf{u}} \mathbf{G}(\hat{\mathbf{u}}) \cdot \hat{\mathbf{R}} f(\hat{\mathbf{u}}) \quad (\text{E.26})$$

Dada  $S$  una superficie de radio  $R \rightarrow \infty$ , se cumple que:

$$\int_S d\hat{\mathbf{u}} f(\hat{\mathbf{u}}) \hat{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{G}(\hat{\mathbf{u}}) = - \int_S d\hat{\mathbf{u}} \mathbf{G}(\hat{\mathbf{u}}) \cdot \hat{\mathbf{R}} f(\hat{\mathbf{u}}) \Rightarrow f(\hat{\mathbf{u}}) \hat{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{G}(\hat{\mathbf{u}}) = -\mathbf{G}(\hat{\mathbf{u}}) \cdot \hat{\mathbf{R}} f(\hat{\mathbf{u}}) \quad (\text{E.27})$$

Ahora sea  $F(\hat{\mathbf{u}}) = f(\hat{\mathbf{u}})\hat{\mathbf{R}}g(\hat{\mathbf{u}})$ , entonces:

$$\int_S d\hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{R}} \cdot [f(\hat{\mathbf{u}})\hat{\mathbf{R}}g(\hat{\mathbf{u}})] = \int_S d\hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{R}} f(\hat{\mathbf{u}}) \cdot \hat{\mathbf{R}} g(\hat{\mathbf{u}}) + \int_S d\hat{\mathbf{u}} f(\hat{\mathbf{u}}) \hat{\mathbf{R}}^2 g(\hat{\mathbf{u}}) \quad (\text{E.28})$$

Dada  $S$  una superficie de radio  $R \rightarrow \infty$ , entonces:

$$- \int_S d\hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{R}} f(\hat{\mathbf{u}}) \cdot \hat{\mathbf{R}} g(\hat{\mathbf{u}}) = \int_S d\hat{\mathbf{u}} f(\hat{\mathbf{u}}) \hat{\mathbf{R}}^2 g(\hat{\mathbf{u}}) \Rightarrow -\hat{\mathbf{R}} f(\hat{\mathbf{u}}) \cdot \hat{\mathbf{R}} g(\hat{\mathbf{u}}) = f(\hat{\mathbf{u}}) \hat{\mathbf{R}}^2 g(\hat{\mathbf{u}}) \quad (\text{E.29})$$

Intercambiando  $f$  y  $g$   $\mathbf{F}(\hat{\mathbf{u}}) = g(\hat{\mathbf{u}})\hat{\mathbf{R}}f(\hat{\mathbf{u}})$ , por lo que:

$$\int_S d\hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{R}} \cdot [g(\hat{\mathbf{u}})\hat{\mathbf{R}}f(\hat{\mathbf{u}})] = \int_S d\hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{R}} g(\hat{\mathbf{u}}) \cdot \hat{\mathbf{R}} f(\hat{\mathbf{u}}) + \int_S d\hat{\mathbf{u}} g(\hat{\mathbf{u}}) \hat{\mathbf{R}}^2 f(\hat{\mathbf{u}}) \quad (\text{E.30})$$

$$\therefore - \int_S d\hat{\mathbf{u}} \hat{\mathbf{R}} f(\hat{\mathbf{u}}) \cdot \hat{\mathbf{R}} g(\hat{\mathbf{u}}) = \int_S d\hat{\mathbf{u}} g(\hat{\mathbf{u}}) \hat{\mathbf{R}}^2 f(\hat{\mathbf{u}}) \Rightarrow -\hat{\mathbf{R}} f(\hat{\mathbf{u}}) \cdot \hat{\mathbf{R}} g(\hat{\mathbf{u}}) = g(\hat{\mathbf{u}}) \hat{\mathbf{R}}^2 f(\hat{\mathbf{u}}) \quad (\text{E.31})$$

Finalmente, de las ecuaciones E.29 y E.31 se concluye que:

$$g(\hat{\mathbf{u}}) \hat{\mathbf{R}}^2 f(\hat{\mathbf{u}}) = f(\hat{\mathbf{u}}) \hat{\mathbf{R}}^2 g(\hat{\mathbf{u}}) \quad (\text{E.32})$$

## E.2. Coeficientes de fricción y difusión

Al desarrollar los integrandos en la ecuación y distribuir los símbolos de integración, se deduce que:

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \xi(t + \tau) - \xi(t) &= \int_t^{t+\tau} h(\xi(t'), t') \Big|_{(x(t), t)} dt' + \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} h(\xi(t''), t'') \frac{\partial h(\xi(t'), t')}{\partial t'} \Big|_{(x(t), t)} dt'' dt' \\
&+ \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} g(\xi(t''), t'') \Gamma(t'') \frac{\partial h(\xi(t'), t')}{\partial x'} \Big|_{(x(t), t)} dt'' dt' \\
&+ \int_t^{t+\tau} [t' - t] \frac{\partial h(\xi(t'), t')}{\partial t'} \Big|_{(x(t), t)} dt' \\
&+ \dots \\
&+ \int_t^{t+\tau} g(\xi(t'), t') \Big|_{(x(t), t)} \Gamma(t') dt' \\
&+ \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} \frac{\partial g(\xi(t'), t')}{\partial x'} \Big|_{(x(t), t)} h(\xi(t''), t'') \Gamma(t') dt'' dt' \\
&+ \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} \frac{\partial g(\xi(t'), t')}{\partial x'} \Big|_{(x(t), t)} g(\xi(t''), t'') \Gamma(t'') \Gamma(t') dt'' dt' \\
&+ \int_t^{t+\tau} [t' - t] \frac{\partial g(\xi(t'), t')}{\partial t'} \Big|_{(x(t), t)} \Gamma(t') dt' \\
&+ \dots
\end{aligned}$$

Por lo tanto:

$$\begin{aligned}
\xi(t + \tau) - \xi(t) &= \tau h(\xi(t'), t') \Big|_{(x(t), t)} \\
&+ \frac{\partial h(\xi(t'), t')}{\partial t'} \Big|_{(x(t), t)} \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} h(\xi(t''), t'') dt'' dt' \\
&+ \frac{\partial h(\xi(t'), t')}{\partial t'} \Big|_{(x(t), t)} \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} g(\xi(t''), t'') \Gamma(t'') dt'' dt' \quad (E.33) \\
&+ \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial h(\xi(t'), t')}{\partial t'} \Big|_{(x(t), t)} \\
&+ \dots
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_t^{t+\tau} g(\xi(t'), t') \Big|_{(x(t), t)} \Gamma(t') dt' \\
& + \frac{\partial g(\xi(t'), t')}{\partial x'} \Big|_{(x(t), t)} \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} h(\xi(t''), t'') \Gamma(t') dt'' dt' \\
& + \frac{\partial g(\xi(t'), t')}{\partial x'} \Big|_{(x(t), t)} \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} g(\xi(t''), t'') \Gamma(t'') \Gamma(t') dt'' dt' \\
& + \frac{\partial g(\xi(t'), t')}{\partial t'} \Big|_{(x(t), t)} \int_t^{t+\tau} (t' - t) \Gamma(t') dt' \\
& + \dots
\end{aligned} \tag{E.34}$$

Dadas las condiciones  $\langle \Gamma(t) \rangle = 0$  y  $\langle \Gamma(t') \Gamma(t'') \rangle = 2D\delta(t' - t'')$ , se cumple que la expresión  $\langle \int_t^{t'} g(\xi(t''), t'') \Gamma(t'') \Gamma(t') dt'' \rangle = 2D \int_t^{t'} g(\xi(t''), t'') [\delta(t'' - t')] dt''$ . Adicionalmente, se parte de la propiedad  $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - a) dx = f(a)$ , cuya expresión partículas es  $\int_{-a}^a f(x) \delta(x - a) = f(a)$  con  $f(x)$  definida y distinta de cero en el intervalo  $(-a, a)$ . Su forma equivalente se expresa como  $\int_0^a f(x) \delta(x - a) = \frac{1}{2} f(a)$ . Por lo tanto,  $2D \int_t^{t'} g(\xi(t''), t'') [\delta(t'' - t')] dt'' = Dg(\xi(t'), t')$ .

Ahora, antes de proceder con el siguiente argumento, será empleada la ecuación de Fokker-Planck bajo las reglas concebidas por Stratonovich.

Con base en la ecuación no lineal de Langevin con ruido multiplicativo en la forma  $\frac{d\xi(t)}{dt} = h(\xi) + g(\xi)\Gamma(t)$ , la división de toda la ecuación entre  $g(\xi)$  conduce a la propuesta del cambio de variable  $\bar{\xi} = \int \frac{1}{g(\bar{\xi})} d\xi$ ,  $\bar{h} = \frac{h(\bar{\xi})}{g(\bar{\xi})}$  y  $\bar{P}(\bar{\xi}) = P(\xi)g(\xi)$ , el cual al aplicarse a la ecuación de Fokker-Planck, adquiere la forma  $\frac{\partial \bar{P}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}} \bar{h}(\bar{\xi}) \bar{P}(\bar{\xi}) + \frac{\Gamma(t)}{2} \frac{\partial^2 \bar{P}}{\partial \bar{\xi}^2}$  (referirse a [44]). La conversión de esta ecuación a las variables originales, conduce a la expresión:  $\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \xi} [h + \frac{1}{2} \Gamma g g'] P + \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} [g^2] P$ . Esta ecuación corresponde a la ecuación de Fokker-Planck según la convención de Stratonovich.

Una forma de garantizar la correspondencia de los primeros dos términos entre paréntesis en la ecuación de la ecuación de Fokker-Planck (en la conversión de Stratonovich) con los términos de la ecuación E.33, es si todos los términos de la ecuación E.33 con excepción del primero y penúltimo término, son cuadráticos o de mayor orden en  $\tau$ . Tras multiplicar por el inverso de  $\tau$ , tomar el promedio en ambos lados de la ecuación y tomar el límite cuando  $\tau$  tiende a 0, se obtiene que:

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\langle \xi(t + \tau) - \xi(t) \rangle}{\tau} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \left\langle h(\xi(t), t) \tau + \frac{\partial g(\xi(t'), t')}{\partial x'} \Big|_{(x(t), t)} \int_t^{t+\tau} Dg(\xi(t'), t') dt' + \dots \right\rangle \tag{E.35}$$

$$\Rightarrow D^{(1)}(\xi(t), t) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\langle \xi(t + \tau) - \xi(t) \rangle}{\tau} = h(\xi(t), t) + D \frac{\partial g(\xi(t'), t')}{\partial x'} \Big|_{(x(t), t)} g(\xi(t'), t') \tag{E.36}$$



### E.3. Ecuación no lineal de Langevin en varias dimensiones

Distribuyendo los signos de integración se obtiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
 \xi_i(t + \tau) - \xi_i(t) &= \int_t^{t+\tau} h_i(\{\mathbf{x}\}, t') dt' + \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} h_k(\xi(t''), t'') \frac{\partial}{\partial x_k} h_i(\{\mathbf{x}\}, t') dt'' dt' \\
 &+ \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} g_{kj}(\xi(t''), t'') \Gamma_j(t'') \frac{\partial}{\partial x_k} h_i(\{\mathbf{x}\}, t') dt'' dt' \\
 &+ \int_t^{t+\tau} g_{ij}(\{\mathbf{x}\}, t') \Gamma_j(t') dt' + \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} h_k(\xi(t''), t'') \frac{\partial}{\partial x_k} g_{ij}(\{\mathbf{x}\}, t') \Gamma_j(t') dt'' dt' \\
 &+ \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} g_{kj}(\xi(t''), t'') \frac{\partial}{\partial x_k} g_{ij}(\{\mathbf{x}\}, t') \Gamma_j(t'') \Gamma_j(t') dt'' dt' \\
 &+ \dots
 \end{aligned} \tag{E.37}$$

Tomando el promedio en ambos lados de la ecuación E.37, multiplicando por el inverso de  $\tau$  y tomando el límite cuando  $\tau$  tiende a 0 (i.e. se calcula la derivada por definición y la cual será denotada por  $\dot{x}_i$  posteriormente) :

$$\begin{aligned}
 \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\langle \xi_i(t + \tau) - \xi_i(t) \rangle}{\tau} &= \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \left\{ \left\langle \int_t^{t+\tau} h_i(\{\mathbf{x}\}, t') dt' + \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} h_k(\xi(t''), t'') \frac{\partial}{\partial x_k} h_i(\{\mathbf{x}\}, t') dt'' dt' \right. \right. \\
 &+ \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} g_{kj}(\xi(t''), t'') \Gamma_j(t'') \frac{\partial}{\partial x_k} h_i(\{\mathbf{x}\}, t') dt'' dt' \\
 &+ \int_t^{t+\tau} g_{ij}(\{\mathbf{x}\}, t') \Gamma_j(t') dt' + \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} h_k(\xi(t''), t'') \frac{\partial}{\partial x_k} g_{ij}(\{\mathbf{x}\}, t') \Gamma_j(t') dt'' dt' \\
 &+ \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} g_{kj}(\xi(t''), t'') \frac{\partial}{\partial x_k} g_{ij}(\{\mathbf{x}\}, t') \Gamma_j(t'') \Gamma_j(t') dt'' dt' \\
 &\left. \left. + \dots \right\} \right.
 \end{aligned} \tag{E.38}$$

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\langle \xi_i(t + \tau) - \xi_i(t) \rangle}{\tau} &= \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \left\langle \int_t^{t+\tau} h_i(\{\mathbf{x}\}, t') dt' \right. \\
 &+ \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} g_{kj}(\xi(t''), t'') \frac{\partial}{\partial x_k} g_{ij}(\{\mathbf{x}\}, t') \Gamma_j(t'') \Gamma_j(t') dt'' dt' \\
 &\left. + \dots \right\rangle \tag{E.39}
 \end{aligned}$$

Se partió de la ecuación de Langevin asociada al conjunto de N variables aleatorias  $\{\xi(t)\}$ , la cual está relacionada con una ecuación de Fokker-Planck basada en las reglas concebidas por Stratonovich (similar a la ecuación  $\frac{\partial \bar{P}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \xi} \bar{h}(\xi) \bar{P}(\xi) + \frac{\Gamma(t)}{2} \frac{\partial^2 \bar{P}}{\partial \xi^2}$ ). Por analogía al caso de la sección anterior, para garantizar la correspondencia con los primeros dos términos de tal ecuación

para N variables aleatorias  $\{\xi(t)\}$ :

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\langle \xi_i(t + \tau) - \xi_i(t) \rangle}{\tau} = h_i(\{\mathbf{x}\}, t) + \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \int_t^{t+\tau} \int_t^{t'} \delta_{il} 2D \delta(t' - t'') g_{kl}(\{\mathbf{x}\}, t) \frac{\partial}{\partial x_k} g_{ij}(\{\mathbf{x}\}, t) dt'' dt' \quad (\text{E.40})$$

donde se ha retomando la propiedad  $\langle \Gamma_i(t) \Gamma_j(t') \rangle = 2D \delta_{ij} \delta(t - t')$ .

$$\Rightarrow D^{(1)}(\xi(t), t) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\langle \xi_i(t + \tau) - \xi_i(t) \rangle}{\tau} = \dot{x}_i = h_i(\{\mathbf{x}\}, t) + D g_{kj}(\{\mathbf{x}\}, t) \frac{\partial}{\partial x_k} g_{ij}(\{\mathbf{x}\}, t) \quad (\text{E.41})$$

## E.4. Tabla de posiciones de un dispositivo Hexbug sin influencia de campo magnético externo

### E.4.1. Medición 1

Tabla E.1: Medición 1

ETIQUETA	TRACK_ID	POSICIÓN_X	POSICIÓN_Y	POSICIÓN_Z
ID7495	0	353.0844156	95.05844156	0
ID7496	0	351.5	96.5	0
ID7497	0	382.1807018	60.06140351	0
ID7498	0	417.3444444	28.41111111	0
ID7499	0	452.8990268	12.04987835	0
ID7500	0	471.0899281	20.94604317	0
ID7501	0	480.1618357	38.89371981	0
ID7502	0	483.5024876	61.55223881	0
ID7503	0	482.8645084	71.91486811	0
ID7504	0	480.8645084	96.91486811	0
ID7505	0	482.1736597	83.09440559	0
ID7506	0	473.8645084	107.9148681	0
ID7507	0	459.6573333	112.2466667	0
ID7508	0	424.5272727	114.5121212	0
ID7509	0	385.0298246	117.4614035	0
ID7510	0	351.0844156	118.0584416	0
ID7511	0	323.5916667	119.0375	0
ID7512	0	300.8755869	119.6784038	0
ID7513	0	283.3403756	120.1666667	0
ID7514	0	265.3359788	120.6904762	0
ID7515	0	245.6989247	121.3010753	0
ID7516	0	221.5	121.4047619	0
ID7517	0	200.2435897	122.3525641	0
ID7518	0	135.5606061	124.4292929	0
ID7519	0	173.1535948	123.2647059	0
ID7520	0	85.60045662	125.1073059	0

Continúa en la siguiente página

**Componentes del vector de estrés**

E.4 Tabla de posiciones de un dispositivo Hexbug sin influencia de campo magnético externo

**Tabla E.1 – Continuación de la página anterior**

<b>ETIQUETA</b>	<b>TRACK_ID</b>	<b>POSICIÓN_X</b>	<b>POSICIÓN_Y</b>	<b>POSICIÓN_Z</b>
ID7521	0	36.1627451	122.8411765	0
ID7522	0	7.598901099	52.84432234	0
ID7523	0	5.52	96.54666667	0
ID7524	0	29.125	16.72727273	0
ID7525	0	16.75085911	26.01890034	0
ID7526	0	47.97252747	13.97985348	0
ID7527	0	46.97252747	13.97985348	0
ID7528	0	47.97252747	13.97985348	0
ID7529	0	47.97252747	13.97985348	0
ID7530	0	48.1037037	13.85185185	0
ID7531	0	48.1037037	13.85185185	0
ID7532	0	48.1	13.77843137	0
ID7533	0	48.1037037	13.85185185	0
ID7534	0	48.1037037	13.85185185	0
ID7535	0	48.125	13.72727273	0
ID7536	0	48.1037037	13.85185185	0
ID7537	0	48.18913858	13.61610487	0
ID7538	0	48.18913858	13.61610487	0
ID7539	0	48.1037037	13.85185185	0
ID7540	0	48.18913858	13.61610487	0
ID7541	0	47.99621212	13.78409091	0
ID7542	0	48.8815261	13.32730924	0
ID7543	0	48.1037037	13.85185185	0
ID7544	0	48.47491039	13.29569892	0



# Bibliografía

- [1] David Acheson. *Elementary Fluid Dynamics*. Oxford University Press, 2005.
- [2] Angelo Barona Balda, Aykut Argun, Agnese Callegari, and Giovanni Volpe. Playing with active matter. *Physical Review E*, 106(6):064605, 2022.
- [3] Clemens Bechinger, Roberto Di Leonardo, Hartmut Löwen, Charles Reichhardt, Giorgio Volpe, and Giovanni Volpe. Active particles in complex and crowded environments. *Reviews of Modern Physics*, 88(4):045006, Nov 2016.
- [4] Howard C. Berg. *E. coli in Motion*. Biological and Medical Physics Series. Springer, 2004. Accessed from a local file: (Biological and Medical Physics Series) Howard C. Berg - E. coli in Motion-Springer (2004).pdf.
- [5] J. W. Bishop. Biomechanics of euglena swimming: A theoretical study. *Journal of Theoretical Biology*, 122(3):437–446, 1986.
- [6] Mickael Bourgoïn, Ronan Kervil, Cecile Cottin-Bizonne, Florence Raynal, Romain Volk, and Christophe Ybert. Kolmogorovian active turbulence of a sparse assembly of interacting swimmers. *Physical Review Letters*, 123(18):188001, 2019.
- [7] Robert Brown. Xxvii. a brief account of microscopical observations made in the months of june, july and august 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies. *The Philosophical Magazine*, 4(21):161–173, 1828.
- [8] Stephen G. Brush. A history of random processes: I. brownian movement from brown to perrin. *Archive for History of Exact Sciences*, 5(1):1–36, 1968.
- [9] William Thomas Coffey. *The Langevin Equation: With Applications in Physics, Chemistry and Electrical Engineering*. World Scientific, 2004.
- [10] Leonardo Dagdug. *Diffusion Under Confinement: A Journey Through Counterintuition*. Editorial NombreDelEditor, Ciudad, País, 2024.
- [11] Olivier Dauchot and Vincent Démery. Dynamics of a self-propelled particle in a harmonic trap. *Physical Review Letters*, 122(6):068002, Feb 2019.
- [12] A. Deblais, T. Barois, T. Guerin, P. H. Delville, R. Vaudaine, J. S. Lintuvuori, J. F. Boudet, J. C. Baret, and H. Kellay. Boundaries control collective dynamics of inertial self-propelled robots. *Physical Review Letters*, 120(18):188001, 2018.

- [13] Maxime Deforet, Jérôme Duplat, Nicolas Vandenberghe, and Emmanuel Villermaux. On random search: collection kinetics of paramecia into a trap embedded in a closed domain. *American Journal of Physics*, 78(6):10.1119/1.3293976, 2010.
- [14] J.K.G. Dhont. *An Introduction to Dynamics of Colloids*. Elsevier, Amsterdam, 1996.
- [15] Albert Einstein. *The Collected Papers of Albert Einstein, Volume 2: The Swiss Years: Writings, 1900-1909*. Princeton University Press, Princeton, NJ, 1989.
- [16] Jens Elgeti, Roland G Winkler, and Gerhard Gompper. Physics of microswimmers—single particle motion and collective behavior: a review. *Reports on Progress in Physics*, 78(5), 2015.
- [17] Robert W. Epp and Jr. Lewis, William M. Cost and speed of locomotion for rotifers. *Oecologia*, 61:289–292, 1984.
- [18] Gerhard Gompper and Michael Schick. *Soft Matter*, volume 2. Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2007.
- [19] Luis Lorenzo Gutierrez Martinez. Robots hexbug-nano atrapados y un sistema de materia activa inercial con propulsión dependiente del tiempo, Enero 2022.
- [20] John Happel and Howard Brenner. *Low Reynolds Number Hydrodynamics*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1959.
- [21] Paul C. Hiemenz and Raj Rajagopalan. *Principles of Colloid and Surface Chemistry*. CRC Press, 1997.
- [22] Robert B. Jones. Rotational diffusion in dispersive media. Lecture notes, Warsaw, 2023.
- [23] Fima C Klebaner. *Introduction to Stochastic Calculus with Applications*. Imperial College Press, London, 2005.
- [24] Paul Langevin. Sur la théorie du mouvement brownien. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, 146:530–533, 1908. Translated as "On the Theory of Brownian Motion".
- [25] Marco Leoni, Matteo Paoluzzi, Sarah Eldeen, Anthony Estrada, Lauren Nguyen, Maria Alexandrescu, Karin Sherb, and Wylie W. Ahmed. Surfing and crawling macroscopic active particles under strong confinement: Inertial dynamics. *Physical Review E*, 102(6):062610, 2020. Received 22 May 2020; Accepted 18 October 2020; Published 1 December 2020.
- [26] Elka Lobutova, Ling Li, Danja Voges, and Christian Resagk. Micro piv measurements of the internal flow of an amoeba proteus. In *Proceedings of the 6th International Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics*, pages 1–, Lisbon, Portugal, July 2012. Institute Thermodynamics and Fluid Mechanics, Ilmenau University of Technology.
- [27] Amnon Makler, Joseph Itskovitz, Joseph M. Brandes, and Eitan Paldi. Sperm velocity and percentage of motility in 100 normospermic specimens analyzed by the multiple exposure photography (mep) method. *Fertility and Sterility*, 31(2), February 1979.

- [28] Fredy Martinez, Edwar Jacinto, and Diego Acero. Brownian motion as exploration strategy for autonomous swarm robots. In *Proceedings of the 2012 IEEE International Conference on Robotics and Biomimetics*, pages 123–128, Guangzhou, China, December 2012. Faculty of Technology, Distrital University FJC, Bogotá D.C., Colombia; National Pedagogical University, Bogotá D.C., Colombia. Emails: fhmartinezs@udistrital.edu.co, ejacintog@udistrital.edu.co, dacero@pedagogica.edu.co.
- [29] Robert M Mazo. *Brownian Motion: Fluctuations, Dynamics, and Applications*. Oxford University Press, Oxford, 2002.
- [30] Robert M. Mazo. *Brownian Motion: Fluctuations, Dynamics, and Applications*. Oxford University Press, 10 2008.
- [31] W. Moon and J. S. Wettlaufer. On the interpretation of stratonovich calculus. *New Journal of Physics*, 16(5):055017, 2014.
- [32] Pamela Muñoz Obrique, Oscar Garrido, Diego Romero, Hartmut Löwen, and Francisca Guzmán-Lastra. Dynamics of magnetic self-propelled particles in a harmonic trap. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2024.
- [33] Andrew Ning. *Computational Aerodynamics*. Brigham Young University, 2018.
- [34] Luhui Ning, Hongwei Zhu, Jihua Yang, Qun Zhang, Peng Liu, Ran Ni, and Ning Zheng. Macroscopic, artificial active matter. *Advanced Functional Materials*, 34(20):2300140, 2024.
- [35] Athanasios Papoulis and S. Unnikrishna Pillai. *Probability, Random Variables, and Stochastic Processes*. McGraw-Hill, 2002.
- [36] R. K. Pathria. *Statistical Mechanics*. Elsevier, Oxford, 2nd edition, 2006.
- [37] Albert P. Philipse. *Brownian Motion: Elements of Colloid Dynamics*. Undergraduate Lecture Notes in Physics. Springer Cham, 1 edition, 2018.
- [38] Craig W. Reynolds. Flocks, herds and schools: A distributed behavioral model. *ACM SIG-GRAPH Computer Graphics*, 21(4):25–34, 1987.
- [39] H. Risken and H.D. Vollmer. Correlation functions for the diffusive motion of particles in a periodic potential. *Abteilung für Theoretische Physik I der Universität Ulm*, 1978.
- [40] Christian Scholz, Michael Engel, and Thorsten Pöschel. Rotating robots move collectively and self-organize. *Physical Review Letters*, 124(12):128002, 2020.
- [41] Pasco Scientific. *Electron Charge-to-Mass Ratio (SE-9629)*. Manual de laboratorio.
- [42] Erwin Ramírez Solano. *Coloides axialmente simétricos en campos externos constantes y que varían con el tiempo*. Tesis de doctorado, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Universidad [Nombre de la Universidad], 2024. Tesis presentada al Posgrado en Física Aplicada para obtener el grado de Doctor en Ciencias (Física Aplicada).
- [43] Mark E Tuckerman. *Statistical mechanics: theory and molecular simulation*. Oxford university press, 2023.

- [44] N. G. van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, revised edition edition, 1981.
- [45] Tamás Vicsek, András Czirók, Eshel Ben-Jacob, Inon Cohen, and Ofer Shochet. Novel type of phase transition in a system of self-driven particles. *Physical review letters*, 75(6):1226–1229, 1995.
- [46] Glenn C. Vidal-Urquiza and Ubaldo M. Córdova-Figueroa. Dynamics of a magnetic active brownian particle under a uniform magnetic field. *Physical Review E*, 96(5):052607, Noviembre 2017.
- [47] Gandhimohan M. Viswanathan, Marcos G. E. da Luz, Ernesto P. Raposo, and H. Eugene Stanley. *The Physics of Foraging: An Introduction to Random Searches and Biological Encounters*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, segunda edition, 2011.
- [48] Lee Walsh, Caleb G. Wagner, Sarah Schlossberg, Christopher Olson, Aparna Baskaran, and Narayanan Menon. Noise and diffusion of a vibrated self-propelled granular particle. *Soft Matter*, 13:8964, 2017.