



**Universitat de les
Illes Balears**

Facultat de Ciències

Memòria del Treball de Fi de Grau

Descripción continua de sistemas de partículas interactivas

Alejandro Almodóvar del Pozo

Grau de Física

Any acadèmic 2017-18

Treball tutelat per Cristóbal López Sánchez
Departament de Física

S'autoritza la Universitat a incloure aquest treball en el Repositori Institucional per a la seva consulta en accés obert i difusió en línia, amb finalitats exclusivament acadèmiques i d'investigació	Autor		Tutor	
	Sí	No	Sí	No
	X		X	

Paraules clau del treball:
Coloides, partículas interactivas, patrones, difusión

Índice

1. Motivación	4
2. Introducción	4
2.1. Movimiento Browniano	4
2.2. Partículas interactivas: Coloides.	5
3. Fundamentos teóricos	6
3.1. Sistema de partículas Brownianas	6
3.2. Modelo de partículas interactivas	7
3.3. Ecuación continua	8
3.3.1. Descripción	8
3.3.2. Adimensionalización	10
4. Resultados numéricos	12
4.1. GEM- α	12
4.1.1. Modelo	12
4.1.2. Resultados gráficos	13
4.2. Bosónico	14
4.2.1. Modelo	14
4.2.2. Resultados gráficos	15
4.3. Función de distribución radial	18
4.3.1. Descripción	18
4.3.2. Resultados	19
4.4. Explicación matemática	21
4.4.1. Linealización de la ecuación continua	21
4.4.2. Representación gráfica	24
5. Conclusiones	26
Apéndice	27
Bibliografía	28

1. Motivación

El objetivo central de este trabajo es analizar en detalle los procesos que se llevan a cabo en los cristales de clúster, sólidos en los cuales la celda unidad es ocupada por un agregado de partículas. Se estudiarán en sistemas bidimensionales (2D) de partículas brownianas con una interacción repulsiva de núcleo blando y proporcionaremos cuando sea posible una visión analítica. Estos fenómenos son importantes ya que aparecen en procesos como en la congelación, la transición vítrea, patrones de bacterias o en lo que nos centraremos nosotros, en sistemas de coloides.

Las partículas interactúan localmente, pero esto puede desencadenar unos efectos globales como la creación de distintos patrones espaciales o un movimiento colectivo. El conocimiento de las condiciones para la formación de estas estructuras colectivas y la respuesta sobre la dinámica es un tema central en la comprensión de los sistemas complejos[1]. En este trabajo nos centraremos en el estudio desde dos puntos de vista complementarios. Un primer punto de vista, que se basa en la descripción discreta, estudiando la dinámica de los individuos y sus interacciones. Dicho de otra manera, se intentará aportar una explicación del comportamiento global a partir de una visión microscópica mediante simulaciones numéricas. Y un segundo punto de vista, el cual está centrado en el estudio del sistema a partir de la descripción continua en términos de la ecuación de evolución de la densidad local. Para ello utilizaremos un modelo determinístico integro-diferencial, la ecuación de Dean-Kawasaki[2]. Esta ecuación mostrará una descripción apropiada de la dinámica de las partículas, dando argumentos analíticos.

2. Introducción

2.1 Movimiento Browniano

El fenómeno del movimiento browniano, cuyas primeras observaciones registradas se remontan a la primera parte del siglo XIX, no fue hasta el siglo XX, donde se convirtió en la clave para la confirmación de la nueva visión del mundo de la mecánica estadística, la base estadística de la termodinámica. Los principales autores o fuentes son en particular las de Einstein[3] y Langevin[4] aunque también destaca Gouy[5].

El estudio de las suspensiones coloidales nos ha proporcionado una imagen fundamental de la realidad en escalas que van más allá de los dos o tres órdenes de magnitud del rango de tamaño de la humilde partícula coloidal, es decir, una visión macroscópica a partir de un mundo microscópico.

El estudio de este movimiento se iniciará como descripción de una imagen macroscópica causada por el movimiento aleatorio, irregular e impredecible de partículas en un espacio 2-dimensional como se puede visualizar en la Fig.1. Este es un tipo de movimiento aleatorio donde los pasos de tiempo entre un desplazamiento y el siguiente son muy pequeños, hasta el punto de considerarse como un continuo [6]. Este movimiento estocástico es debido a que las moléculas del fluido están sometidas a una agitación térmica, el cual no suele ser uniforme.

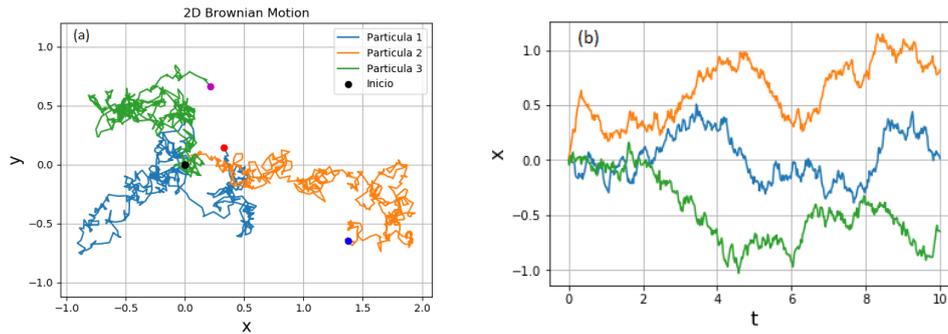


Figura 1. Representación de un movimiento browniano de 3 partículas. (a) Representación en un espacio bidimensional de un movimiento browniano. **(b)** Variación de la coordenada X con el tiempo.

2.2 Partículas interactivas: Coloides

Un coloide o dispersión coloidal es un sistema físico que presenta dos fases, una líquida la cual representa el medio y otra dispersa en forma de partículas sólidas, las cuales tienen un tamaño superior a los de la fase líquida. Estos coloides representan un puente entre las disoluciones, donde la fase dispersa y dispersante son de tamaño parecido, formando una mezcla homogénea, y las suspensiones, donde la fase dispersante es mucho mayor que la fase dispersa. Estos sistemas físicos son muy visibles en el día a día, como en la leche, aerogeles, gelatina o polvo en suspensión entre otros muchos ejemplos además de estar presentes en todos los tejidos vivos [7]. Además, se ha observado que esto no solo ocurre en partículas inertes, este fenómeno también aparece en organismos vivos como es el caso de algunos insectos[8].

De manera que nuestro objetivo es estudiar dichos coloides, tanto su comportamiento como sus características. Desde el punto de vista microscópico, estos coloides no son más que partículas que interactúan entre ellas y con el medio. Por lo cual es lógico pensar que estas partículas no estarán en un principio en un estado en reposo, y por consiguiente tendrán una velocidad inicial, lo que implica que tengan una dirección predestinada. No obstante, en una dispersión coloidal, debido al gran número de colisiones que sufren con las partículas del fluido, la dirección y la velocidad se desequilibra y resulta totalmente aleatoria. Por esta razón, es lógico pensar que las partículas individuales de un coloide se comporten en muchos casos como partículas brownianas que además interactúan entre sí. La creencia general es que es necesaria una atracción de corto alcance en el potencial de interacción de la pareja para iniciar la agregación y una repulsión de largo alcance para limitar el crecimiento de la agrupación y evitar la separación de fases. Existen otros escenarios donde se puedan formar agregados como es el caso que estudiaremos[9], donde se ha demostrado que las partículas constituyentes interactúan por medio de fuerzas puramente repulsivas[10].

A partir de distintas simulaciones se intentará estudiar el comportamiento en términos de densidades y analizar su estabilidad. En nuestro caso, las partículas están localizadas en una caja en 2 dimensiones con condiciones periódicas. Inicialmente estarán aleatoriamente distribuidas por toda la caja de dimensión $L = 1$ y además el número de partículas lo fijaremos para todo el trabajo a $N = 1000$. Los movimientos de las partículas están impulsados por distintas fuerzas que generalmente se derivan de potenciales de dos cuerpos que pueden actuar repulsivamente. Por esta razón, para llevar a cabo las interacciones repulsivas, utilizaremos dos modelos, el modelo de exponencial generalizado y el potencial Bosónico.

3. Fundamentos teóricos

3.1 Sistema de partículas Brownianas

Nuestro objetivo es estudiar partículas brownianas con interacción, pero antes de todo, vamos a comprobar que las partículas que simulamos se comportan como partículas brownianas. Una primera comprobación consiste en estudiar si la difusión de estas partículas sin ningún tipo de interacción se comporta del modo adecuado. Así pues, lo que queremos observar es que exista una linealidad de la dispersión cuadrática en función del tiempo. Para demostrar dicha relación, se iniciará el cálculo desde la segunda ley de Newton, examinando las distintas fuerzas que experimenta cada partícula:

$$\underbrace{m \frac{d^2 x_i}{dt^2}}_{\text{Inercial}} = \underbrace{\sqrt{2k_B T \gamma} \xi_i}_{\text{Ruido Blanco}} \underbrace{- \gamma v_i}_{\text{Fricción}}. \quad (1)$$

Estas partículas experimentan dos tipos de fuerzas, una primera la cual es simulada por un ruido blanco y una segunda como un término de fricción. Esta primera representará las fluctuaciones de los impulsos aleatorios con las moléculas del fluido a causa de la agitación térmica [11], lo que produce un movimiento errático e irregular. Además, este ruido blanco Gaussiano está caracterizado por (2), es decir, está centrado a cero con desviación estándar de 1.

$$\langle \xi_i \rangle = 0 \quad \langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = \mathbb{I} \delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (2)$$

Por otro lado, tenemos la fuerza de fricción la cual es proporcional a la velocidad, producida por la dificultad de movimiento en el fluido donde están localizadas, y el coeficiente γ se entiende como un coeficiente viscoso. En el caso hidrodinámico, para partículas con radio a en un medio con viscosidad (η), $\gamma = 6\pi\eta a$. A partir de algunos cálculos elaborados en detalle en el Apéndice, se obtiene la ecuación de la dispersión cuadrática en función del tiempo:

$$\langle x^2 \rangle - \langle x_0^2 \rangle = 2 \frac{k_B T}{\gamma} t = 2Dt. \quad (3)$$

Esta dispersión cuadrática depende linealmente con el tiempo con un pendiente $2D$. Por esta razón, a mayor valor de D , la dispersión de las partículas es mayor. Esto era de esperar ya que, recordando que el coeficiente de difusión depende directamente con la temperatura, a mayor temperatura, las partículas del medio tienen mayor energía cinética y por tanto se producen más colisiones lo que conlleva a una mayor dispersión. Comprobamos en la Fig. 2 que se cumple esta relación y en consecuencia que las partículas que simulamos se comportan como partículas brownianas en el caso de no tener interacción.

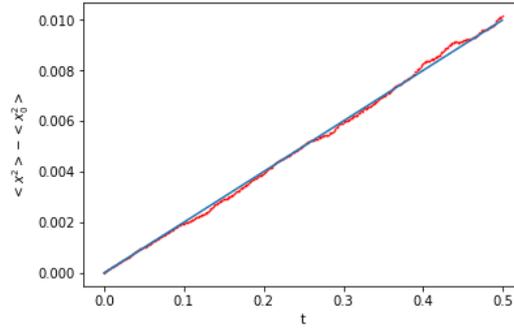


Figura 2. Representación de la dispersión cuadrática en función del tiempo. Representado los resultados numéricos (rojo punteado) y recta con pendiente 2D (azul continuo) con valores de $N = 1500$ y $D = 0.01$.

3.2 Modelo de partículas interactivas

El siguiente objetivo es obtener la ecuación de movimiento que simularemos para el estudio. Al igual que en el apartado 2.1 tenemos la fuerza de fricción y el ruido blanco ya que nuestras partículas se comportan como partículas brownianas cuando no interactúan. Pero ahora tenemos el añadido de la fuerza de interacción entre las partículas. En nuestro caso solo estudiaremos el caso donde esta interacción será repulsiva [12]. La ecuación que se obtiene es la ecuación de Langevin[13], la cual es una ecuación diferencial estocástica,

$$\underbrace{m \frac{dv_i}{dt}}_{\text{Inercial}} = \underbrace{F_i}_{\text{Interacción}} + \underbrace{\sqrt{2k_B T \gamma} \xi_i}_{\text{Ruido Blanco}} - \underbrace{\gamma v_i}_{\text{Fricción}}. \quad (4)$$

Nuestro objetivo será estudiar el caso sobreamortiguado, donde $\gamma \gg 1$. En este caso podemos aproximar $\frac{dv_i}{dt} \approx 0$ ya que estas partículas casi no presentan ninguna aceleración al estar su movimiento dominado por la fricción. Otra manera de visualizarlo es definiendo un tiempo de relajación $\tau = m/\gamma$, que representa el paso del comportamiento balístico al comportamiento difusivo. Esta separación de comportamiento viene descrita por el camino libre medio, el cual es la distancia promedio entre dos colisiones sucesivas. Este valor es muy pequeño, del orden de nanosegundos, de manera que podemos eliminar el término inercial y quedarnos con el término difusivo y la interacción[14]:

$$\mathbf{v}_i = \dot{\mathbf{x}}_i = \frac{F_i}{\gamma} + \sqrt{\frac{2k_B T}{\gamma}} \xi_i. \quad (5)$$

Donde la fuerza es producida por el gradiente de una energía potencial de la forma $F_i = -\nabla U = -\nabla(\gamma V_i) = -\gamma \nabla V_i$. Por tanto, reescribimos la ecuación del movimiento de una partícula i :

$$\dot{\mathbf{x}}_i = -\nabla_i V + \sqrt{2D} \xi_i(t) \quad i = 1, \dots, N. \quad (6)$$

Donde se ha introducido el coeficiente de difusión D , el cual está relacionado con el coeficiente de fricción y la temperatura a partir de la relación de Einstein $D = K_B T / \gamma$. Además, como se utilizará un potencial de interacción a dos cuerpos, podemos escribir el potencial como una suma de los potenciales individuales con un factor $\frac{1}{2}$ para no repetir interacciones ya que la interacción de la partícula 1 con la partícula 2 es la misma interacción que la de la partícula 2 con la partícula 1. La expresión analítica del potencial ya se concretará en el apartado 4.

$$V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N v(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \sum_{i < j=1}^N v(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j). \quad (7)$$

Y finalmente obtenemos que la ecuación que describe el movimiento de una partícula i :

$$\dot{\mathbf{x}}_i = - \sum_{i,j=1}^N \nabla v(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) + \sqrt{2D} \boldsymbol{\xi}_i(t) \quad i = 1, \dots, N. \quad (8)$$

3.3 Ecuación continua

3.3.1 Descripción

El objetivo actual es obtener la ecuación para la densidad, la cual nos ayudará a entender mejor el comportamiento de las partículas. El procedimiento para obtener dicha ecuación se iniciará con la ecuación de movimiento (8). En nuestro caso lo haremos sin el término de ruido debido a su gran complejidad ya que estos términos son discontinuos y no son suaves, donde las reglas estándar del cálculo no funcionan y son necesarias cálculos estocásticos como las integraciones de Itô o Stratonovich [15]:

$$\dot{\mathbf{r}}_i = - \sum_{j=1}^N \nabla V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad i = 1, \dots, N. \quad (9)$$

La densidad de partícula y densidad global vienen definidas respectivamente por:

$$\rho_i(\mathbf{x}, t) = \delta(\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{x}) \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (10)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^N \rho_i(\mathbf{x}, t). \quad (11)$$

Donde la densidad de una partícula (10) y densidad global (11) determinan el número de partículas que se encuentran en una posición determinada. En nuestro caso, donde tenemos partículas puntuales, esta densidad de partícula está representada con una delta de Dirac. En consecuencia, el valor de la densidad global es 1 en la posición de alguna de las partículas y 0 en caso contrario. De modo que el número total de partículas $N \equiv \int \rho(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}$ no cambia con el tiempo y permanece constante.

Considerando una función arbitraria $f(\mathbf{x})$ del espacio de coordenadas, de modo que la función evaluada a la posición de la partícula la podemos escribir en función de la densidad de la respectiva partícula:

$$f(\mathbf{r}_i(t)) = \int d\mathbf{x} \delta(\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{x}) f(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{x} \rho_i(\mathbf{x}, t) f(\mathbf{x}). \quad (12)$$

Derivando respecto del tiempo:

$$\frac{d}{dt} f(\mathbf{r}_i(t)) = \int d\mathbf{x} \partial_t \rho_i(\mathbf{x}, t) f(\mathbf{x}). \quad (13)$$

Por otro lado, a partir de la regla de la cadena de la expresión (12) podemos escribir:

$$\begin{aligned} \frac{df(\mathbf{r}_i(t))}{dt} &= \nabla f(\mathbf{r}_i) \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \nabla f(\mathbf{r}_i) \dot{\mathbf{r}}_i = -\nabla f(\mathbf{r}_i) \sum_{j=1}^N \nabla V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \\ &= \int d\mathbf{x} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{x}) \left[-\nabla f(\mathbf{x}) \sum_j \nabla V(\mathbf{x} - \mathbf{r}_j) \right] \\ &= \int d\mathbf{x} \rho_i(\mathbf{x}, t) \left[-\nabla f(\mathbf{x}) \sum_j \nabla V(\mathbf{x} - \mathbf{r}_j) \right]. \end{aligned} \quad (14)$$

Donde hemos utilizado, al igual que antes, la delta de Dirac para pasar de un punto \mathbf{r}_i a un punto \mathbf{x} arbitrario y se ha introducido la densidad de una partícula. Integrando por partes y eliminando los términos superficiales ya que son despreciables e igualando con la ecuación (13) se obtiene:

$$\int d\mathbf{x} f(\mathbf{x}) \left(\partial_t \rho_i(\mathbf{x}, t) - \nabla \cdot \left[\rho_i(\mathbf{x}, t) \sum_j \nabla V(\mathbf{x} - \mathbf{r}_j) \right] \right) = 0. \quad (15)$$

Por tanto, como la función $f(\mathbf{x})$ es una función arbitraria, tenemos que punto a punto del interior del paréntesis debe de ser cero:

$$\partial_t \rho_i(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \left[\rho_i(\mathbf{x}, t) \sum_j \nabla V(\mathbf{x} - \mathbf{r}_j) \right]. \quad (16)$$

Por otro lado, al igual que se hizo con $f(\mathbf{r}_i)$, pasaremos de un punto \mathbf{r}_j a un punto arbitrario \mathbf{y} a través de la densidad de partículas,

$$\begin{aligned}
\sum_j \nabla V(\mathbf{x} - \mathbf{r}_j) &= \sum_j \int d\mathbf{y} \delta(\mathbf{y} - \mathbf{r}_j) \nabla V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \\
&= \int d\mathbf{y} \left(\sum_j \rho_j(\mathbf{y}) \right) \nabla V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \int d\mathbf{y} \rho(\mathbf{y}) \nabla V(\mathbf{x} - \mathbf{y}).
\end{aligned} \tag{17}$$

Agrupando la expresión (16) y (17) se obtiene:

$$\partial_t \rho_i(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \left[\rho_i(\mathbf{x}, t) \int d\mathbf{y} \rho(\mathbf{y}) \nabla V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right]. \tag{18}$$

Y finalmente, sumando sobre todas las partículas a partir de la expresión (11), encontramos la ecuación para la densidad global:

$$\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \left[\rho(\mathbf{x}, t) \int d\mathbf{y} \rho(\mathbf{y}) \nabla V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right]. \tag{19}$$

Si se consideran todos los términos se obtiene la ecuación de Dean-Kawasaki (DK) [2,16], la cual es una ecuación diferencial estocástica con términos laplacianos y de divergencia.

$$\begin{aligned}
\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) &= \nabla \cdot \left[\rho(\mathbf{x}, t) \int d\mathbf{x}' \nabla v(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \rho(\mathbf{x}', t) \right] + D \nabla^2 \rho(\mathbf{x}, t) \\
&\quad + \nabla \cdot \left[\sqrt{2D\rho(\mathbf{x}, t)} \eta(\mathbf{x}, t) \right].
\end{aligned} \tag{20}$$

Los términos laplaciano y de ruido se obtienen al considerar el ruido, es decir, el movimiento aleatorio de las partículas brownianas, que aquí no hemos considerado por su complicación. El término que hemos obtenido en (19) se relaciona con la advección que produce el potencial a la densidad debido a las fuerzas de repulsión. Además, a pesar de que las ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE) son ecuaciones fáciles de resolver, las ecuaciones diferenciales estocásticas son algo más complicada debido a la complejidad de operar con el ruido blanco [17]. En la siguiente sección intentaremos estudiar la ecuación (20) y observar el comportamiento que obtenemos de la densidad.

3.3.2 Adimensionalización

Para poder facilitar los cálculos posteriores, se adimensionalizará la ecuación de DK introduciendo distintos parámetros adimensionalizados para la posición $\left(\tilde{x} = \frac{x}{R} \right)$, tiempo $\left(\tilde{t} = t \rho_0 \epsilon R^{d-2} = t \rho_0 \epsilon \right)$, la densidad $\left(\tilde{\rho} = \frac{\rho}{\rho_0} \right)$ y el potencial $\left(\tilde{v} = \frac{v}{\epsilon} \right)$. Los distintos parámetros que se han introducido corresponden al valor de la densidad media del sistema, $\rho_0 = N/L^d$, el cual permanece constante ya que se conserva el número de partículas. El valor de R, el cual adimensionaliza la posición, y ϵ al potencial.

$$\begin{aligned} \partial_{\tilde{t}} \tilde{\rho} = \tilde{\nabla} \cdot \left[\tilde{\rho}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \int d\tilde{\mathbf{x}}' \tilde{\nabla} \tilde{v}(\tilde{\mathbf{x}} - \tilde{\mathbf{x}}') \tilde{\rho}(\tilde{\mathbf{x}}', \tilde{t}) \right] + \frac{1}{\epsilon \rho_o^2} D \frac{1}{R^2} \tilde{\nabla}^2 \tilde{\rho}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \\ + \frac{1}{\sqrt{\epsilon \rho_o}} \frac{1}{R^2} \tilde{\nabla} \cdot \left[\sqrt{2D} \tilde{\rho}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \tilde{\eta}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \right]. \end{aligned} \quad (21)$$

Definiendo los distintos parámetros adimensionales:

$$\tilde{D} \equiv \frac{D}{\epsilon \rho_o R^2} \quad , \quad n_R = \rho_o R^2 = N \left(\frac{R}{L} \right)^2 . \quad (22)$$

Y Introduciéndolos en la ecuación (21) se obtiene:

$$\begin{aligned} \partial_{\tilde{t}} \tilde{\rho} = \tilde{\nabla} \cdot \left[\tilde{\rho}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \int d\tilde{\mathbf{x}}' \tilde{\nabla} \tilde{v}(\tilde{\mathbf{x}} - \tilde{\mathbf{x}}') \tilde{\rho}(\tilde{\mathbf{x}}', \tilde{t}) \right] + \tilde{D} \tilde{\nabla}^2 \tilde{\rho}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \\ + \frac{1}{\sqrt{n_R}} \tilde{\nabla} \cdot \left[\sqrt{2\tilde{D}} \tilde{\rho}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \tilde{\eta}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t}) \right]. \end{aligned} \quad (23)$$

A partir de esta ecuación adimensionalizada es más fácil trabajar debido a que solo tenemos dos parámetros adimensionales que debemos fijar. Además, debido a que se consideraran valores de densidad alta, el término de $1/\sqrt{n_R}$ lo consideraremos despreciable en comparación con los otros parámetros del sistema. Esto producirá que el término de ruido deje de ser importante y podemos eliminarlo para los posteriores cálculos. De tal forma, el único parámetro restante será \tilde{D} , que relaciona distintos factores.

$$\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \left[\rho(\mathbf{x}, t) \int d\mathbf{x}' \nabla v(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \rho(\mathbf{x}', t) \right] + \tilde{D} \nabla^2 \rho(\mathbf{x}, t) . \quad (24)$$

En la ecuación (24) se han eliminado las tildes excepto para el parámetro \tilde{D} para visualizar que no es la constante de difusión, sino un nuevo parámetro que hemos definido en (22). A partir de esta ecuación se hará un cálculo perturbativo para encontrar en qué valores de \tilde{D} podremos encontrar los patrones deseados y en qué valores estos patrones no se presentan. Veremos que, aunque hayamos eliminado el término de ruido, este cálculo perturbativo nos dará muy buenos resultados para poder comprender mejor los distintos fenómenos que suceden.

4. Resultados numéricos

4.1 GEM- α

4.1.1 Modelo

La formación de los agregados es contra intuitiva a primera vista, ya que uno se pregunta cómo pueden formarse sin existir una atracción entre ellos. Por estas razones, se intentará estudiar estos casos y poder dar respuestas. Primeramente, consideraremos un potencial que decae exponencialmente con la distancia de separación.

$$v(x) = \epsilon \exp\left(-\left|\frac{x}{R}\right|^\alpha\right) \quad \epsilon > 0, \alpha \in \mathbb{R}, R > 0. \quad (25)$$

Este tipo de potenciales son conocidos como modelo exponencial generalizado α (GEM- α). Donde el parámetro ϵ indica la magnitud de este potencial. En nuestro estudio solo consideraremos el caso donde la interacción es repulsiva, por esta razón, el parámetro ϵ es positivo ($\epsilon > 0$). Por último, el ancho R indica el rango espacial de la interacción. Este conjunto de interacciones recibe el nombre de núcleo blanco debido a que el potencial no diverge en $x = 0$ y en consecuencia las partículas se pueden superponer.

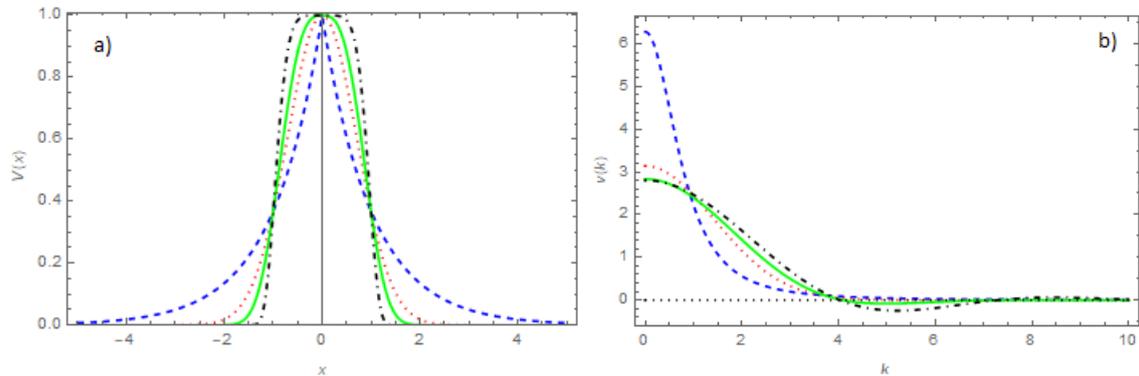


Figura 3. Comparativa del potencial GEM- α . (a) Representación en el espacio real (b) Representación en el espacio de Fourier. Ambos gráficos para valores de $\alpha = 1$ (Azul discontinuo), $\alpha = 2$ (Rojo punteado), $\alpha = 3$ (Verde continuo), $\alpha = 6$ (Negro punteado-discontinuo) con $\epsilon = 1.0$ y $R = 1.0$

Se obtiene como se puede visualizar en la Fig. 3(a) que para los potenciales con $\alpha \leq 2$ son más puntiagudos en cero. Y a medida que aumentamos el valor de α se vuelven con una forma más cuadrada. Además, como se puede visualizar en la Fig. 3(b), estos potenciales más puntiagudos tienen transformada de Fourier estrictamente positiva. En cambio, para los potenciales con $\alpha > 2$, la transformada de Fourier del potencial presenta valores positivos y negativos, dato que será muy relevante posteriormente.

4.1.2 Resultados gráficos

En nuestras simulaciones utilizaremos sobre todo dos clases de potenciales el GEM-1 y el GEM-3 y, para todos los casos se ha utilizado los valores de $R = 0.1$, $\epsilon = 1/30 \approx 0.0333$ con el número de partículas fijado a $N = 1000$. El movimiento de estas partículas vendrá determinado por la ecuación (8), la cual utilizaremos en la simulación. Lo que estudiaremos será el comportamiento de las partículas dependiendo del valor de la constante de difusión D . Recordemos que las partículas estarán situadas en una caja en 2 dimensiones de tamaño $L = 1$ con condiciones periódicas y por tanto la densidad $\rho_0 = N/L^2 = 1000$.

Para el GEM-1, independientemente del valor de D se puede comprobar que no se crean ningún tipo de patrón como se muestra en la Fig. 4. Aunque cabe destacar que, pese a que no se formen ningún tipo de patrón, se obtiene un resultado algo más uniforme cuando D disminuye. En cambio, para valores mayores se pierde este resultado uniforme y lo que se obtiene es un comportamiento más desordenado.

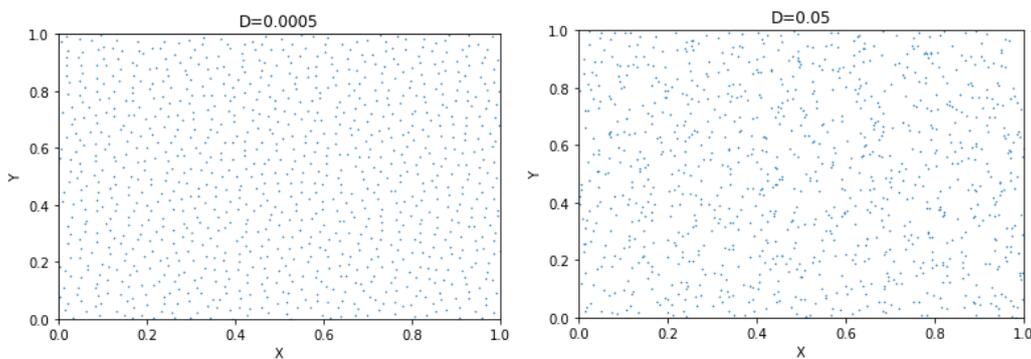


Figura 4. Instantánea en 2-dimensiones de las partículas GEM-1. Representado para valores de $D = 0.0005$ ($\tilde{D} = 0.0015$) (Izquierda) y $D = 0.05$ ($\tilde{D} = 0.15$) (Derecha) con los parámetros $\epsilon = 0.0333$ y $R = 0.1$.

Por el contrario, en el GEM-3 se obtienen resultados más interesantes. Para valores altos de D , el comportamiento es similar que en el caso del GEM-1, donde se visualiza un comportamiento irregular sin ninguna distribución apreciable. En cambio, se observa que para valores bajos se crean unos patrones periódicos hexagonales[18] como se muestra en la Fig.5. Estos patrones han aparecido espontáneamente al disminuir el valor de D , donde recordemos que teníamos fuerzas repulsivas.

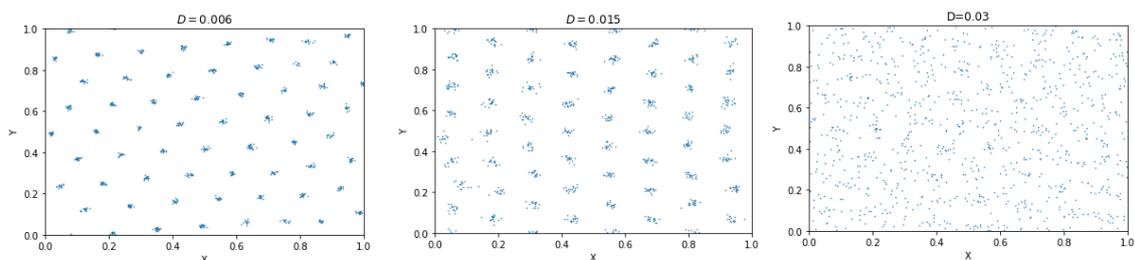


Figura 5. Instantánea en 2-dimensiones de las partículas GEM-3. Representado para valores de $D = 0.006$ ($\tilde{D} = 0.018$) (Izquierda), $D = 0.015$ ($\tilde{D} = 0.045$) (Centro) y $D = 0.03$ ($\tilde{D} = 0.09$) (Derecha) con los parámetros $\epsilon = 0.0333$ y $R = 0.1$.

Aunque hayamos observado un comportamiento claramente diferenciado entre distintos valores de D , el comportamiento realmente viene descrito por el parámetro $\tilde{D} = \frac{D}{\epsilon \rho_0 R}$ como veremos en el apartado 4.4. Por esta razón, este resultado se pudiera haber obtenido tanto disminuyendo el valor de D como aumentando la densidad de partículas, es decir, aumentando el número de partículas presentes en la caja.

4.2 Bosónico

4.2.1 Modelo

Un segundo modelo que se utilizará será el llamado potencial Bosónico. Este potencial tiene una cierta forma más familiar en relación con la mayoría de potenciales físicos, como es el caso del potencial electromagnético o gravitatorio, debido a que decae inversamente proporcional a la distancia de separación. Este decaimiento es más suave que en el GEM, el cual es un decaimiento exponencial y por esta razón, el Bosónico será un potencial de mayor alcance.

$$v(x) = \frac{\epsilon}{1 + \left(\frac{x}{R}\right)^\gamma} \quad \epsilon > 0, \gamma \in \mathbb{R}, R > 0. \quad (26)$$

Al igual que en el GEM, el parámetro ϵ indica la intensidad del potencial y el parámetro R el rango de interacción. En este caso también consideramos solo el caso totalmente repulsivo, en otros términos, consideramos ϵ estrictamente positivo. En este caso para diferencial del potencial GEM- α introducimos el parámetro γ . Además, este potencial también es un potencial de núcleo blando ya que tampoco diverge en $\mathbf{x} = 0$.

Como se puede observar, para algunos valores de γ se puede modelar algunos potenciales típicos como es el caso de la interacción dipolo-dipolo[19] en el caso $\gamma = 3$ o la interacción de van der Waals[20] para $\gamma = 6$ en el caso de átomos ultrafríos o moléculas polares. Nosotros nos centraremos más en el caso de $\gamma = 3$ aunque el modelo de $\gamma = 6$ son muy importantes en estudios sobre la superfluidez, donde se pone de manifiesto el mundo cuántico[21]. Incluso son muy usados para distintos temas de interés en materia condensada[22], como es el caso de intentar conocer la importancia de los intercambios mecánico-cuánticos de partículas indistinguibles en la determinación del límite de la fase fluido-sólido donde mucho tiempo la opinión generalizada era que los intercambios deberían tener poca influencia sobre la transición de fase.

El comportamiento general es muy parecido al GEM- α como se puede visualizar en la Fig. 6. Para potenciales con $\gamma \leq 2$ son más puntiagudos alrededor de $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ y a medida que aumentamos el valor de γ se vuelve con una forma más cuadrada. Casualmente en este caso también se cumple que para los casos donde $\gamma > 2$, la transformada de Fourier presenta valores negativos.

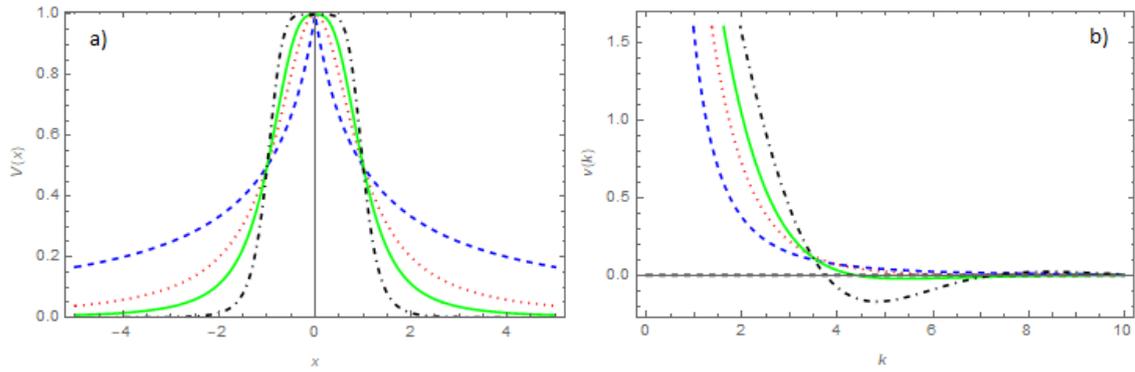


Figura 6. Comparativa del potencial Bosónico. (a) Representación en el espacio real **(b)** Representación en el espacio de Fourier. Ambos gráficos para valores de $\gamma = 1$ (Azul discontinuo), $\gamma = 2$ (Rojo punteado), $\gamma = 3$ (Verde continuo), $\gamma = 6$ (Negro punteado-discontinuo) con $\epsilon = 1.0$ y $R = 1.0$

4.2.2 Resultados gráficos

Simularemos dos tipos de potenciales para el modelo Bosónico, con $\gamma = 1$ y 3 . En este caso al igual que en el GEM, tenemos una caja en 2 dimensiones con condiciones periódicas con $N = 1000$ y fijaremos $R = 0.1$. Al igual que en el modelo anterior, empezaremos mirando el comportamiento de las partículas dependiendo del valor de la constante de difusión D . A diferencia del modelo anterior, en este caso también observaremos lo que ocurre con los demás parámetros como γ o ϵ debido a que este potencial es menos usado y podemos obtener resultados interesantes.

Para el potencial Bosónico con $\gamma = 1$, se puede comprobar que independiente del valor de D no se crean ninguno tipo de patrones al igual que pasaba con el GEM. Como está representado en la Fig.7, para valores bajos de D , se obtiene una distribución de partículas en la caja bastante uniforme. En cambio, para valores mayores se obtiene un resultado algo más caótico e irregular.

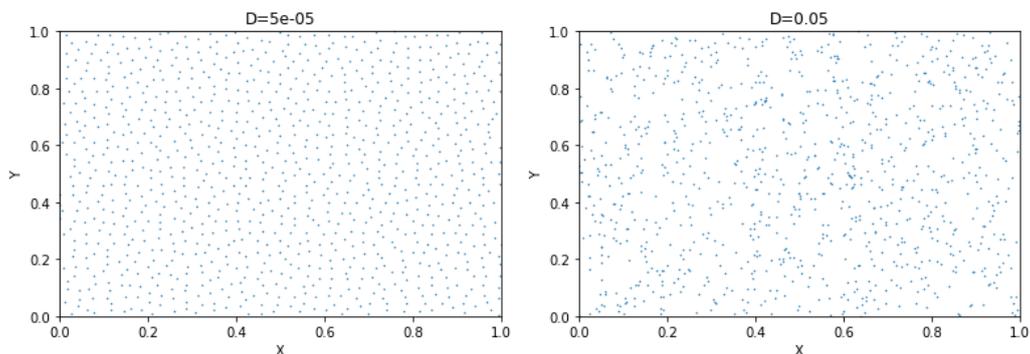


Figura 7. Instantánea en 2-dimensiones de las partículas Bosónico con $\gamma = 1$. Representado para valores de $D = 0.0005$ ($\tilde{D} = 0.0015$) (Izquierda) y $D = 0.05$ ($\tilde{D} = 0.15$) (Derecha) con los parámetros $\epsilon = 0.0333$ y $R = 0.1$.

En cambio, para el Bosónico con $\gamma = 3$, obtenemos diferentes tipos de resultados dependiendo del valor de D . Para valores altos de difusión, el comportamiento es similar al caso anterior, donde se puede ver un comportamiento irregular sin ningún tipo de patrón significativo. Por el contrario, para valores bajos de D , se pueden apreciar patrones hexagonales en la Fig. 8. Además, para valores bajos de difusión donde los clusters están muy compactados, los patrones hexagonales presentan algunos defectos, cosa que no ocurría en el potencial GEM.

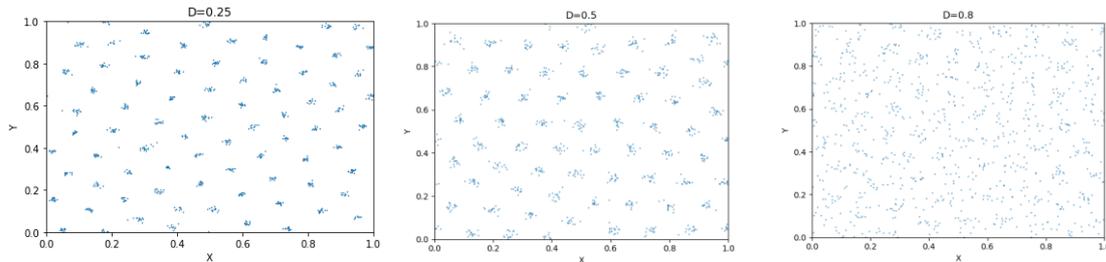


Figura 8. Instantánea en 2-dimensiones de las partículas Bosónico con $\gamma = 3$. Representado para valores de $D = 0.2$ ($\tilde{D} = 0.006$) (Izquierda), $D = 0.5$ ($\tilde{D} = 0.015$) (Centro) y $D = 0.8$ ($\tilde{D} = 0.024$) (Derecha) para valores de $\epsilon = 3.333$ y $R = 0.1$.

Hemos estudiado el comportamiento cuando todas las partículas tienen un mismo valor de la constante de difusión. Pero en la realidad es casual que no todas las partículas que están localizadas en un mismo fluido tengan la misma energía cinética, algunas pueden desplazarse con más o menos velocidad que sus vecinas. Recordando que la constante de difusión está relacionada con la temperatura, resulta obvio que distintas partículas tengan distinta constante de difusión.

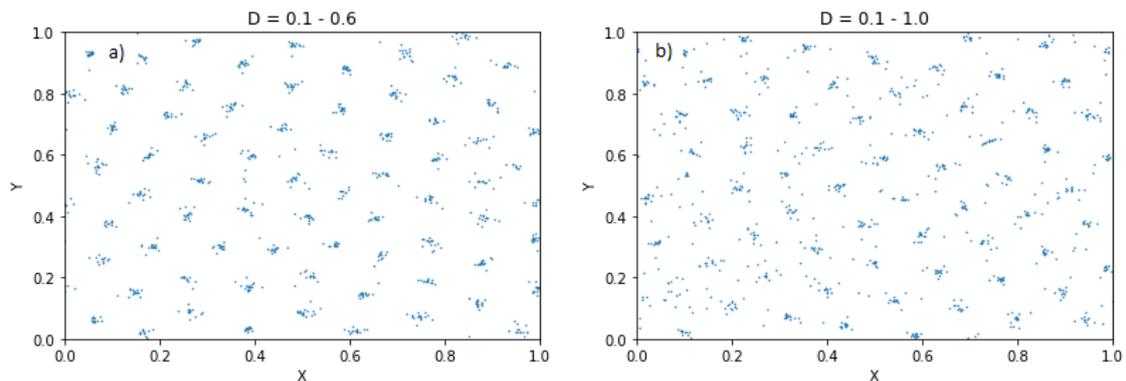


Figura 9. Instantánea en 2-dimensiones de las partículas Bosónico con $\gamma = 3$ con combinación de D . Representado para valores de $D = 0.1$ y 0.6 ($\tilde{D} = 0.003$ y 0.018) (Izquierda) y $D = 0.1$ y 1.0 ($\tilde{D} = 0.003$ y 0.03) (Derecha) para valores de $\epsilon = 3.333$ y $R = 0.1$.

De tal forma que, lo que hemos querido estudiar es una combinación de parámetros tal que todas las partículas estén dentro del rango donde los patrones aparecen, pero con distinta constante de difusión y otra configuración donde algunas partículas debido a su alta constante de difusión no forman patrones. En ambos casos hemos mantenido constante el potencial, tanto desde el punto de vista de la intensidad, como del rango de interacción.

En la Fig. 8 hemos analizado que para valores próximos a $D = 0.5$ y menos a este se crean los patrones, pero para valores superiores no. Entonces para un primer estudio donde las dos partículas tienen una constante de difusión donde se forman los patrones hemos escogido los valores de $D = 0.1$ y 0.6 . En la Fig. 9(a) se puede observar que se detectan distintos agregados, pero los patrones son bastante difusos y la mayoría presentan bastantes defectos. Un segundo caso que hemos estudiado es con dos valores de difusión, los cuales la mitad de las partículas sí que formarían los patrones, pero la otra mitad no. Esto se puede apreciar en la Fig. 9(b), y aunque se observe la formación de algunos clusters, están poco compactos. Fijándonos con detenimiento se pueden observar algunos patrones hexagonales, aunque a causa de este gran número de partículas con alta constante de difusión la imagen general del sistema es una imagen desorganizada y caótica.

A continuación, examinaremos como afecta la interacción a la formación de patrones. Para ello, lo que se hará es que las partículas no interactúen con las demás de la misma forma. Aunque nos estemos refiriendo en todo el trabajo a bosones cuánticos, también se puede pensar desde el punto de vista biológico, donde en una colonia de insectos todos los individuos no interactúan de igual forma entre ellos debido a algún carácter morfológico o hormonal.

Primeramente, estudiaremos como afecta el tipo de interacción. Para ello elaboraremos un sistema de partículas donde las partículas interactuaran con algunas a partir de un potencial Bosónico con $\gamma = 1$ y otras con $\gamma = 3$. No consideraremos el caso donde la partícula i interactúa con las demás mediante un potencial determinado hecho que conduce a que el tipo de interacción dependa solo de esta partícula. Sino que nos centraremos cuando la partícula i interactúa de distinta forma con las demás vecinas distinguiendo entre ellas, no de la misma forma con la $j, k, etc...$. Cabe remarcar que la interacción de la partícula i con la partícula j debe ser la misma en modulo que la de la partícula j con la partícula i ya que en caso contrario estaríamos violando la tercera ley de Newton.

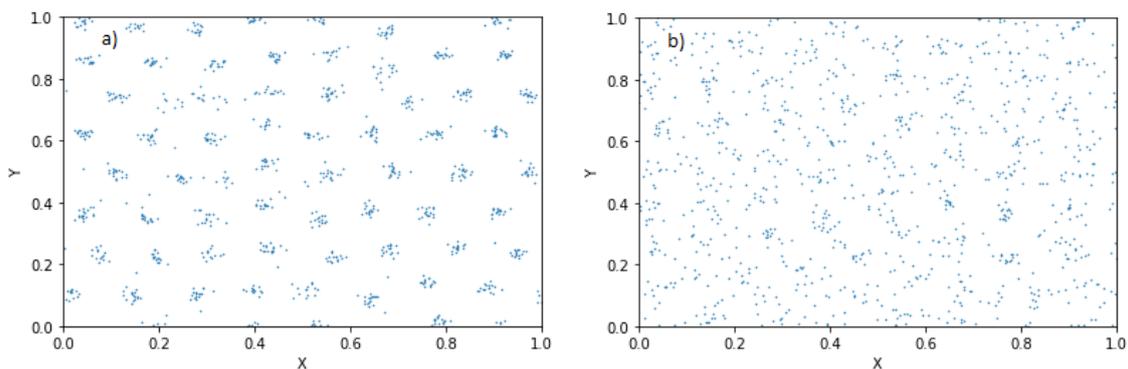


Figura 10. Instantánea en 2-dimensiones de las partículas Bosónico con combinación de γ . Representado para valores de $\gamma = 1(20\%)$ y $\gamma = 3(80\%)$ (Izquierda), $\gamma = 1(40\%)$ y $\gamma = 3(60\%)$ (Derecha) para valores de $D = 0.2$ ($\bar{D} = 0.006$), $\epsilon = 3.333$ y $R = 0.1$.

Para llevar a cabo el análisis, el tipo de interacción entre las partículas está hecho de manera aleatoria, pero no uniformemente distribuidas. Hemos considerado un primer caso donde el 80% de estas interacciones era con $\gamma = 3$ y el restante con $\gamma = 1$, donde podemos ver en la Fig. 10(a) que se pueden apreciar algunos patrones hexagonales y bastantes clusters. Pero en el segundo caso, donde el 60% de las interacciones son con $\gamma = 3$ no se pueden apreciar ningún patrón hexagonal, aunque se pueden ver pequeñas agrupaciones de partículas, pero nada apreciable.

Ya hemos analizado como afecta la constante de difusión en nuestro sistema de partículas, y en cuanto al potencial hemos estudiado que pasaba al variar el tipo de interacción a partir del parámetro γ . Por consiguiente, solo nos quedaría analizar cómo afectan los parámetros ϵ y R en la formación de los patrones. Aunque estos dos parámetros podemos intuir que actuaran de la misma forma ya que solamente contribuyen a que el potencial sea más o menos intenso. Por estas razones, y debido a que variar el parámetro R es bastante complicado ya que en nuestro sistema de dimensión $L = 1$, el parámetro R como mucho puede ser 0.5 debido a las condiciones periódicas solo consideraremos variar el parámetro ϵ .

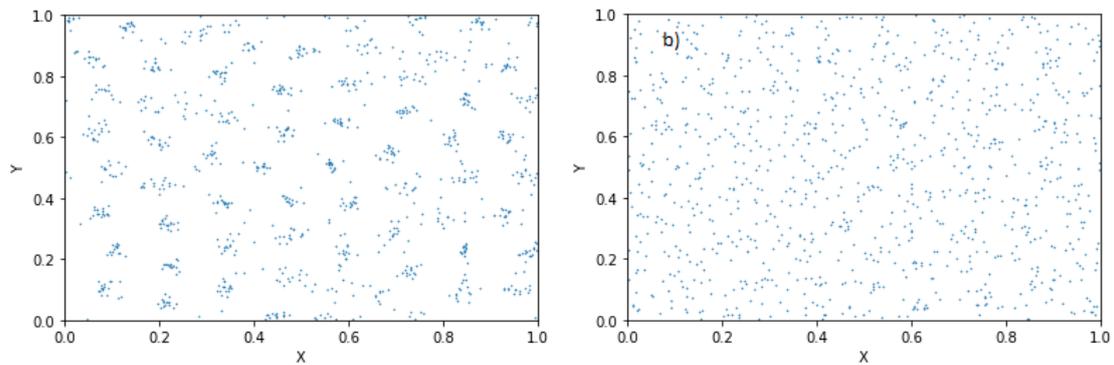


Figura 11. Instantánea en 2-dimensiones de las partículas Bosónico con combinación de ϵ . Representado para valores de $\epsilon = 0.00333$ (75%) y $\epsilon = 0.000333$ (25%) (Izquierda), $\epsilon = 0.00333$ (50%) y $\epsilon = 0.000333$ (50%) (Derecha) para valores de $D = 0.3$ ($\tilde{D} = 0.009$), $\gamma = 3$ y $R = 0.1$.

Lo que observamos en la Fig.11(b) es que cuando la mitad de las partículas tienen una intensidad(ϵ) alta del potencial no se forman las agrupaciones de partículas y por lo tanto tampoco los patrones. En cambio, en la Fig. 11(a) donde la mayoría de las interacciones son intensas, sí que se crean las distintas agrupaciones de partículas. Por lo tanto, observamos que la creación de los patrones es más propensa si tenemos un potencial intenso, lo que se traduce a un valor de ϵ alto.

4.3 Función de distribución radial

4.3.1 Descripción

A continuación, estudiaremos la función de distribución radial también conocida como función de correlación a pares, que se representa normalmente como $g^{(2)}(r)$. El análisis de esta función es una de las formas más fundamentales para caracterizar y analizar diferentes estados de la materia, y nos indica la distribución de probabilidad para las partículas que rodean a otra partícula (véase Fig. 12).

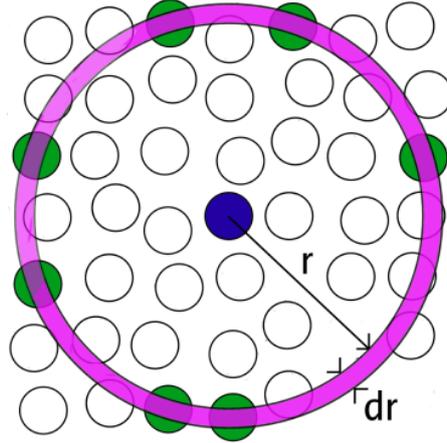


Figura 12. Función de distribución radial. La partícula azul representa la partícula de referencia y las verdes las partículas localizadas en las posiciones entre $[r, r+dr]$. Imagen extraída de [23].

La expresión general que utilizaremos para la función de distribución radial será la expresión (27) donde la suma es sobre partículas diferentes de una partícula de referencia i , y promediado sobre las posiciones \mathbf{x} a la misma distancia $r = |\mathbf{x}|$ respecto de dicha partícula. En nuestra simulación, calcularemos el número de partículas (Δn) entre el área con radio interior (r_{in}) y un radio exterior (r_{out}) donde $r_{out} = r_{in} + \Delta r$, normalizado con la densidad ρ_0 :

$$g^{(2)}(\mathbf{x}) = g^{(2)}(r) = \frac{1}{\rho_0} \left\langle \sum_{i \neq 0} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \right\rangle = \frac{1}{\rho_0} \frac{\Delta n(r)}{2\pi r \Delta r}. \quad (27)$$

4.3.2 Resultados

Estudiaremos la función de distribución radial para los dos potenciales (GEM y Bosónico) para distintos valores de la constante de difusión y manteniendo fijos los parámetros ϵ y R . En primer lugar observamos que dicha función en los casos del GEM-1 y el Bosónico con $\gamma = 1$ nunca forman clusters independientemente de los parámetros. Posteriormente nos centraremos en configuraciones de parámetros donde sí que se forman los clusters y analizar la distribución y compactación de dichos agregados.

Para el caso donde no se crean los clusters, es decir con el modelo GEM-1 o Bosónico con $\gamma = 1$, lo que se observa es que la distribución radial adquiere rápidamente un valor constante y concretamente el valor de $g(r) = 1$. Esto quiere decir que la densidad en el sistema es homogénea y además es igual a la densidad de partículas ρ_0 independiente del valor de D .

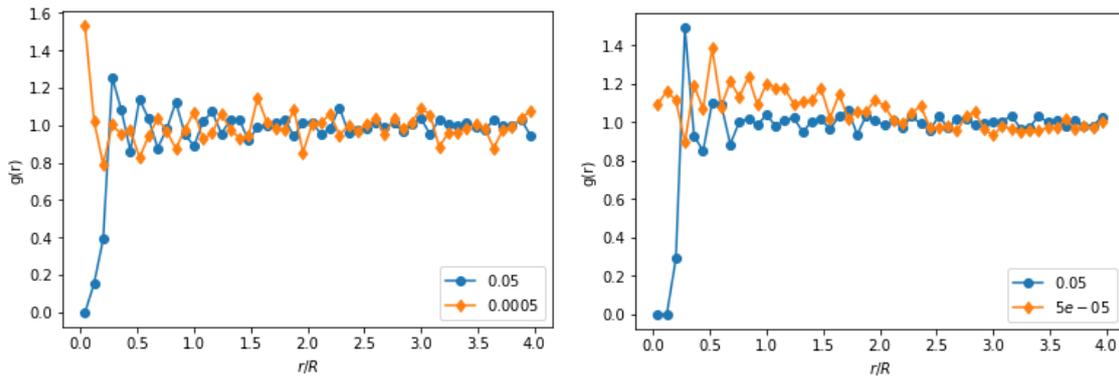


Figura 13. Función de correlación radial para el potencial GEM y Bosónico. (Izquierda) Potencial GEM con $\alpha = 1$, $\epsilon = 0.0333$ y $R = 0.1$ **(Derecha)** Potencial Bosónico con $\gamma = 1$, $\epsilon = 0.00333$ y $R = 0.1$ y señalados en la gráfica los valores de D .

A continuación, estudiaremos lo que ocurre para los casos donde sí que se forman clusters. Se observa en la Fig. 14 que a partir de un determinado valor de D pasamos a un régimen donde la distribución radial es constante e igual a 1, idénticamente al caso anterior. Pero a diferencia del caso anterior, tanto para el potencial GEM como el Bosónico se muestra que las distribuciones radiales tienen varios picos para los valores de D bajos. El primero en $r = 0$, correspondiendo a las partículas pertenecientes al mismo cluster, mientras que los demás picos corresponden a los clusters vecinos y nos indican la distancia típica entre ellos. El primer pico tiene el mayor valor de la función de distribución causado por dos factores, primero por el gran número de partículas en un cluster y segundo, por la proximidad de estas partículas. Además, este primer pico lo encontramos justamente en $r = 0$ porque nos encontramos con un potencial de núcleo blando, donde las partículas se pueden solapar. En caso de tener un potencial de esferas duras, lo que obtendríamos es que el pico situado en la posición de $r = R$ donde R sería el diámetro de estas esferas.

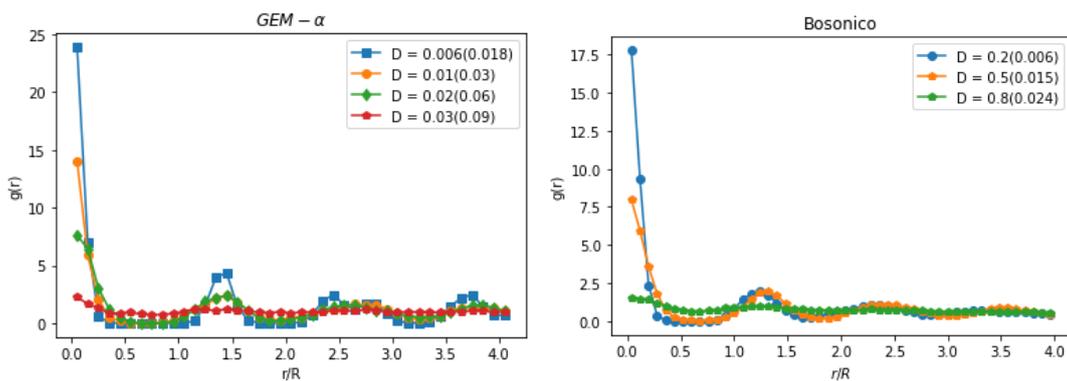


Figura 14. Función de correlación radial para el potencial GEM y Bosónico. (Izquierda) Potencial GEM con $\alpha = 3$, $\epsilon = 0.0333$ y $R = 0.1$ **(Derecha)** Potencial Bosónico con $\gamma = 3$, $\epsilon = 0.00333$ y $R = 0.1$ y señalados en la gráfica los valores de D y \tilde{D} entre paréntesis.

Por otro lado, observamos que en ambos casos para valores menores de D se obtienen mayores valores de $g^{(2)}(x)$, lo que se traduce que la compactación de los clusters es mayor, es decir, las partículas están más unidas. La explicación de este resultado podría ser que, a causa del aumento del valor de D , el movimiento errático producido por el medio aumenta y por consiguiente los agregados están menos compactados. Asimismo, observamos que independientemente del valor de difusión, la separación de clusters es constante. En el caso del GEM se observa que la distancia de separación es próxima a 1.5 y en el caso del Bosónico más próxima a 1.25. Con un cálculo más detallado, explicado en la sección 4.4, se puede comprobar que la distancia de separación es 1.44 para el GEM y 1.28 para el potencial Bosónico, concordando ambos con lo que se observa gráficamente.

Por último, analizaremos la diferencia de compactación de los clusters producidos por los dos potenciales. Para compararlos correctamente elegiremos un valor de \tilde{D} fijo y ajustaremos los demás parámetros. Observamos en la Fig.15 que para el potencial GEM los valores de $g(r)$ son mayores que en el Bosónico, es decir, las partículas en un cluster del GEM están más unidas entre ellas, hay un mayor solapamiento. Una explicación que se le puede dar a este resultado puede ser debido a la forma que tiene cada modelo del potencial. El GEM presenta un decaimiento mayor que una simple exponencial y en cambio el Bosónico decae como inversamente a la distancia y por esta razón, los clusters en el GEM pueden estar más unidos ya que la fuerza de repulsión es menor.

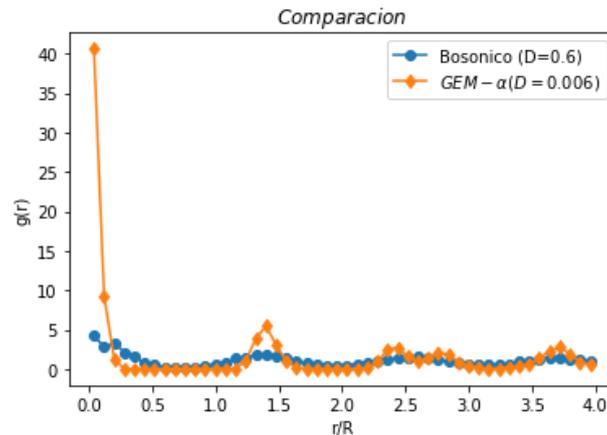


Figura 15. Comparativa de la función de correlación radial para el potencial GEM y Bosónico con $\tilde{D} = 0.018$. Potencial GEM con $\alpha = 3, \epsilon = 0.0333$ y $R = 0.1$ y Potencial Bosónico con $\gamma = 3, \epsilon = 0.00333$ y $R = 0.1$ con los valores de D señalados en la gráfica.

4.4 Explicación matemática

4.4.1 Linealización de la ecuación continua

En este apartado se intentará entender los resultados desde un punto matemático a partir de la ecuación de la densidad. Intentaremos explicar por qué se forman los patrones, como influye el potencial en esta formación o cómo influyen los distintos parámetros del sistema. Para ello, lo que se llevará a cabo será una perturbación de la ecuación de la densidad. Y a partir de esta perturbación, el objetivo será detectar para que valores de \tilde{D} se pueden formar los patrones y

para qué valores nunca se formarán. En este caso no utilizaremos la ecuación de Dean-Kawasaki completa, sino la aproximación donde la contribución del ruido es pequeña debido a que tenemos grandes valores de densidad.

$$\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \left[\rho(\mathbf{x}, t) \int d\mathbf{x}' \nabla v(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \rho(\mathbf{x}', t) \right] + \tilde{D} \nabla^2 \rho(\mathbf{x}, t). \quad (28)$$

Este análisis de estabilidad proporciona una explicación matemática de la inestabilidad del estado homogéneo. Por esta razón, elegimos una perturbación harmónica respecto de la solución homogénea donde ρ_0 es constante. En nuestra ecuación adimensional tenemos que $\rho_0 = 1$. Es fácil de ver que el caso homogéneo es solución de la ecuación de Dean-Kawasaki[2].

$$\rho = 1 + \delta\rho \quad , \quad \delta\rho = \exp(\lambda(k)t + i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}). \quad (29)$$

Donde la perturbación la representamos como una exponencial con la función $\lambda(k)$ llamada tasa de crecimiento de la perturbación el cual dependiendo del valor podremos confirmar si se establecerán patrones o no. Introduciendo esta perturbación en la ecuación se puede obtener fácilmente la siguiente expresión.

$$\lambda \delta\rho(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \left[(1 + \delta\rho(\mathbf{x}, t)) \underbrace{\int d\mathbf{x}' \nabla v(\mathbf{x} - \mathbf{x}') (1 + \delta\rho(\mathbf{x}', t))}_I \right] + \tilde{D} (i\mathbf{k})^2 \delta\rho(\mathbf{x}, t). \quad (30)$$

Donde para el término I, haciendo una integración por partes y un cambio de variables se puede obtener:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x}' \nabla v(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta\rho(\mathbf{x}', t) = - \int_{\infty}^{-\infty} d\mathbf{y} \nabla v(\mathbf{y}) \exp(\lambda t + i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})). \quad (31)$$

Recordando la forma de la perturbación, podemos escribir la integral I en función de la perturbación evaluada en el punto \mathbf{x} .

$$I = \delta\rho(\mathbf{x}, t) \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} \nabla v(\mathbf{y}) \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{y}). \quad (32)$$

A continuación, haciendo una integración por partes se puede llegar a una expresión donde hemos eliminado los términos superficiales debido a que la función $v(\mathbf{y})$ es una función continua y absolutamente derivable.

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} \nabla v(\mathbf{y}) \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{y}) &= v(\mathbf{y}) \cdot \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{y}) - \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} v(\mathbf{y}) \nabla(\exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{y})) \\ &= i \mathbf{k} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} v(\mathbf{y}) \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{y}) . \end{aligned} \quad (33)$$

Agrupando todos los términos:

$$\lambda \delta \rho(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \left[(1 + \delta \rho(\mathbf{x}, t)) \delta \rho(\mathbf{x}, t) i \mathbf{k} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} v(\mathbf{y}) \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{y}) \right] - \mathbf{k}^2 \tilde{D} \delta \rho(\mathbf{x}, t). \quad (34)$$

A primer orden de perturbaciones, eliminando los términos cuadráticos:

$$\lambda \delta \rho(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \left[(1 + \delta \rho(\mathbf{x}, t)) i \mathbf{k} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} v(\mathbf{y}) \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{y}) \right] - \mathbf{k}^2 \tilde{D} \delta \rho(\mathbf{x}, t). \quad (35)$$

Y recordando que el gradiente la derivada era respecto la variable \mathbf{x} , y observando en (29) que:

$$\nabla(\delta \rho(\mathbf{x}, t)) = i \mathbf{k} \delta \rho(\mathbf{x}, t). \quad (36)$$

Se obtiene:

$$\lambda \delta \rho(\mathbf{x}, t) = (i \mathbf{k})^2 \delta \rho(\mathbf{x}, t) \hat{v}(\mathbf{k}) - \mathbf{k}^2 \tilde{D} \delta \rho(\mathbf{x}, t). \quad (37)$$

Donde se ha definido la transformada de Fourier como:

$$\hat{v}(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{y} v(\mathbf{y}) e^{-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{y}} . \quad (38)$$

Finalmente eliminando el término de perturbación $\delta \rho(\mathbf{x}, t)$ en ambos lados de la igualdad se obtiene la relación de dispersión para la tasa de crecimiento $\lambda(k)$.

$$\lambda(k) = -\mathbf{k}^2 \hat{v}(\mathbf{k}) - \mathbf{k}^2 \tilde{D} = -\mathbf{k}^2 [\tilde{D} + \hat{v}(\mathbf{k})]. \quad (39)$$

A partir de la tasa de crecimiento $\lambda(k)$ podremos estudiar los distintos valores de \tilde{D} a partir de los cuales implicara que el sistema pueda formar patrones y en cuáles no. Estos casos vendrán diferenciados por si la transformada de Fourier del potencial presenta valores negativos, donde hemos visto que requiere $\alpha > 2$ para el GEM y $\gamma > 2$ para el Bosónico.

Si la transformada de Fourier no presenta valores negativos, como el valor de \tilde{D} es positivo esto conlleva que la tasa de crecimiento sea siempre negativa. En este caso, como la solución a la densidad era de la forma $\rho = \rho_0 + \delta \rho$ donde $\delta \rho = \exp(\lambda t + i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$, se obtiene que la

perturbación decae con el tiempo γ , en consecuencia, el sistema evoluciona hacia el estado homogéneo $\rho = \rho_0$. En cambio, si la transformada de Fourier presenta valores negativos, se puede definir un valor crítico \tilde{D}_c que corresponde al máximo valor que puede tener el parámetro \tilde{D} para que la tasa de crecimiento sea positiva. Este valor crítico corresponde a:

$$\tilde{D}_c = -\hat{\nu}_1. \quad (40)$$

Donde se define $\hat{\nu}_1 \equiv \hat{\nu}(k_c)$. Este k_c representa la longitud de onda correspondiente al mínimo valor de la transformada de Fourier que también corresponde al mayor valor de la tasa de crecimiento. Por consiguiente, lo que se obtiene es que si $\tilde{D} > \tilde{D}_c$, el sistema evolucionara hacia el estado homogéneo, en cambio si $\tilde{D} < \tilde{D}_c$ se obtendrán los patrones.

4.4.2 Representación gráfica

El primer pensamiento que alguien puede tener es por qué nos interesa estudiar la tasa de crecimiento y no analizamos directamente la transformada de Fourier, la cual nos da una expresión analítica, y así poder obtener resultados exactos. Pues el caso es que las transformada de Fourier tanto en el modelo GEM como en el Bosónico dan expresiones imposibles de analizar tales como series hipergeométricas o funciones G de Meijer. Estas funciones son series infinitas de términos y, por lo tanto, demasiado complejas para poder obtener resultados analíticos.

En esta sección intentaremos estudiar el comportamiento de la tasa de crecimiento a partir de la formula (39). Además, comprobaremos por qué en el GEM-1 o en el Bosónico con $\gamma = 1$ no se producen los patrones hexagonales típicos del GEM-3 o Bosónico con $\gamma = 3$. Los casos que hemos estudiado con más detenimiento son el GEM-3 y el Bosónico con $\gamma = 3$. De forma que nos ceñiremos a estos dos casos para explicar por qué se producen los patrones de una manera más rigurosa.

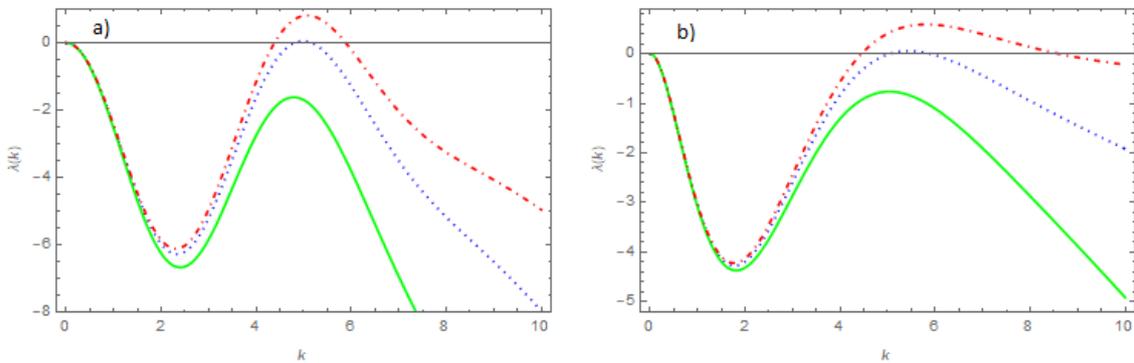


Figura 16. Representación de las tasas de crecimiento para el GEM-3 y Bosónico con $\gamma = 3$. (a) GEM-3 para los valores de $\tilde{D} = 0.15$ (Verde continua), 0.08 (Azul punteada), 0.05 (Roja discontinua). (b) Bosónico con $\gamma = 3$ para los valores $\tilde{D} = 0.05$ (Verde continua), 0.02 (Azul punteada), 0.003 (Roja discontinua)

Si nos centramos en una primera instancia en el caso del GEM-3 se puede observar en la Fig.16(a) que para el valor de $\tilde{D} = 0.05$, la tasa de crecimiento cruza el eje X y se hace positiva, pero para el valor de $\tilde{D} = 0.15$ no. De tal forma, como el valor \tilde{D}_c corresponde al valor justo donde la tasa de crecimiento es cero, el valor crítico se establece entre 0.05 y 0.15, muy próximo a 0.08. A partir de un estudio más exhaustivo elaborado con el del método de bisección se puede llegar a ver que este valor crítico corresponde a $\tilde{D}_c = 0.0823$. A partir de este valor y recordando la expresión (40) podemos obtener el valor de k_c el cual nos ayuda a estimar una primera aproximación del valor de la distancia intercluster. En este caso se obtiene que $k_c = 4.975$ donde la distancia intercluster es próxima al valor $c^* = 2\pi/k_c = 1.26$. A partir del análisis analítico de las instantáneas obtenidas, es decir, a partir de obtener un promedio de las distancias de los distintos agregados, se obtiene que la distancia intercluster corresponde a $c = 1.445$.

En el caso del Bosónico con $\gamma = 3$ cómo está representado en la Fig.16(b). Se puede ver que para algunos valores de \tilde{D} sí que se encuentran valores de la tasa de crecimiento positivos y para otros no, al igual que en el GEM. En este caso el valor crítico corresponde a $\tilde{D}_c = 0.0219$ y el valor de $k_c = 5.417$, por lo tanto, la distancia intercluster es próxima a $c^* = 2\pi/k_c = 1.16$. A partir del cálculo analítico se obtiene que $c = 1.278$.

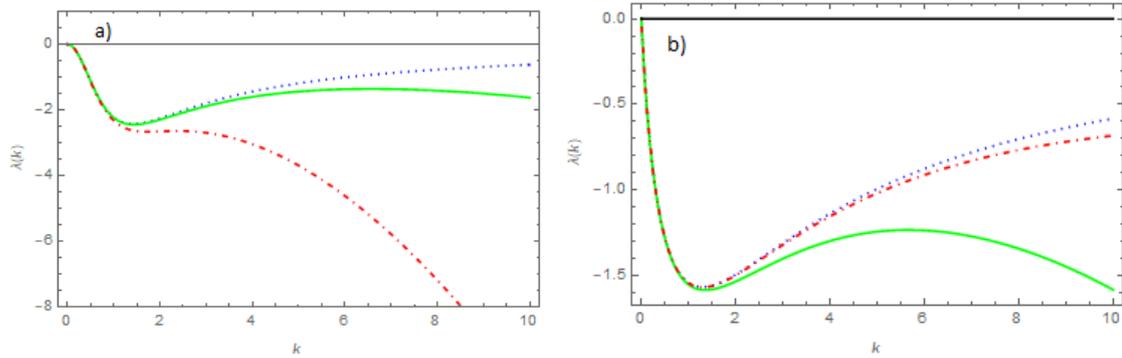


Figura 17. Tasa de crecimiento para GEM-1 y Bosónico con $\gamma = 1$. (a) GEM-1 para los valores de $\tilde{D} = 0.00$ (Azul punteada), 0.01 (Verde continua), 0.10 (Roja discontinua). (b) Bosónico con $\gamma = 1$ para los valores $\tilde{D} = 0.00$ (Roja discontinua), 0.01 (Roja discontinua), 0.10 (Verde continua)

Tanto en el GEM-1 como en el Bosónico, se puede visualizar en la Fig.17 que la tasa de crecimiento siempre es negativa, independientemente del valor de \tilde{D} , de manera que la perturbación decae rápidamente. Por esta razón, las partículas se hallarán en la solución homogénea y no se crearán patrones. Como se ha indicado anteriormente, también se puede ver a partir de la transformada de Fourier que no se formaran patrones ya que no presenta valores negativos como podemos ver en la Fig.3 y Fig.6. En cambio, para el GEM-3 o GEM-6, la transformada de Fourier presenta valores negativos y por tanto pueden crear los patrones.

Como vemos, aunque parezca contraintuitivo, nos aparecen una agrupación bajo un potencial repulsivo. De modo que no es una consecuencia de efectos puramente locales, sino que implica una minimización global de la energía, mediante interacciones entre clusters. Es decir, para los potenciales repulsivos suficientemente blandos, la repulsión de los clusters vecinos puede exceder la repulsión intracluster y conducir a un contacto de partícula efectiva en el cluster [12]. Por esta razón, como se ha observado, podemos afirmar que para el caso GEM- α con $\alpha > 2$ o en el Bosónico con $\gamma > 2$ lo que se obtiene es que las fuerzas de repulsión dentro del cluster son mayores que la producida por los clusters vecinos.

Hemos comprobado que la posible formación de los clusters no es causada solamente por la difusión, sino más concretamente por el parámetro \tilde{D} , el cual recordemos que tenía la forma $\tilde{D} = D/\epsilon R \rho_0$. Por tanto vemos que influyen tanto la constante de difusión como la intensidad del potencial, el rango de interacción de potencial mencionado o la densidad de partículas, aunque en nuestro caso este último se ha mantenido constante en todo el estudio. Por esta razón, ya que hemos visto que para obtener dichos clusters $\tilde{D} < \tilde{D}_c$, esto puede suceder de distintas formas. Una primera manera podría ser disminuyendo la constante de difusión, lo que esto se traduce a una disminución de la temperatura ya que este parámetro estaba relacionado con la temperatura y la constante de Boltzmann. Aunque como hemos dicho anteriormente, el potencial también influye tanto con el parámetro ϵ como con el parámetro R . Por esta razón, si aumentamos la intensidad del potencial o aumentamos la distancia de interacción hacemos que sea más posible la formación de clusters. Por lo tanto, vemos que para obtener dichos clusters lo que necesitamos es un sistema de partículas, con una constante de difusión baja, que el potencial de interacción actué a largas distancias y valores altos de densidad y, sobre todo, que la transformada de Fourier del potencial presenté valores negativos.

5. Conclusiones

En este trabajo hemos analizado en detalle algunas de las propiedades que se presentan en un sistema de partículas brownianas que interactúan mediante un potencial de dos cuerpos repulsivos de núcleo blanco. El resultado más relevante y muy inesperado, es que dentro de un rango de parámetros las partículas se agregan en cúmulos que se organizan periódicamente en el espacio a pesar de la repulsión entre ellas. Se han estudiado dos potenciales y se ha observado es que, a pesar de sus diferencias, ambos daban resultados comunes y compartían bastantes características, la diferencia estaba presente sobre todo si hablamos de sus características cuantitativas y no cualitativas.

Al estudiar la ecuación determinística de Dean-Kawasaki, hemos obtenido las condiciones para la formación de patrones. Se ha observado que para ello lo que tiene que ocurrir es que la transformada de Fourier del potencial de interacción debe tener valores negativos y que un determinado parámetro, el cual es una combinación de distintos parámetros del sistema debía ser menor a un valor crítico. Esta situación se presenta favorablemente en casos donde el potencial es intenso y el coeficiente de difusión causado por la presencia del medio, debe ser suficientemente pequeña.

Como hemos observado en la función de distribución radial, cuando la difusión es pequeña se obtiene que los clusters tienen una forma parecida a una gaussiana causada por la repulsión entre partículas cercanas y la difusión, que tiende a aumentar el ancho del cúmulo y la repulsión de las partículas de los cúmulos vecinos que tienden a estrechar los cúmulos. Ambas fuerzas se equilibran de tal manera que sea posible la creación de estos clusters. Todo esto causado debido a la inestabilidad que presenta el estado homogéneo en estos casos tan determinados.

Por último, cabe destacar que se ha notado un aumento notable del tiempo de agrupación de las partículas en los clusters en determinados casos. Es decir, para llegar desde un estado inicial donde las partículas estaban repartidas uniformemente por todo el espacio, hasta el estado donde las partículas estaban agrupadas en clusters, era mucho menor en los casos donde todas las partículas estaban caracterizadas con los mismos parámetros. Se ha observado que en los casos donde teníamos mezclas de partículas con distintos parámetros o mezcla de interacciones, el tiempo hasta llegar hasta este estado final, podía ser hasta cinco o diez veces mayor.

APÉNDICE: Dispersión cuadrática

Para la demostración, el cálculo se iniciará desde la ecuación del movimiento browniano sin interacción en 1D ya que el cálculo es análogo en una o en dos dimensiones.

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = \sqrt{2k_B T \gamma} \xi - \gamma \frac{dx}{dt}. \quad (41)$$

Y observando que podemos expresar ambas derivadas de x en función de derivadas respecto de x^2 a partir de las siguientes expresiones de derivada primera y derivada segunda de x^2 :

$$\frac{d^2x^2}{dt^2} = \frac{d}{dt} \left(2x \frac{dx}{dt} \right) = 2 \left[\left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + x \frac{d^2x}{dt^2} \right], \quad (42)$$

$$\frac{dx^2}{dt} = 2x \frac{dx}{dt}. \quad (43)$$

Aislando el término que nos interesa, en la ecuación (42) el término inercial de $\frac{d^2x}{dt^2}$ y en (43) el término de velocidad $\frac{dx}{dt}$ se obtiene la igualdad:

$$x \frac{d^2x}{dt^2} = \frac{1}{2} \frac{d^2x^2}{dt^2} - \left(\frac{dx}{dt} \right)^2, \quad (44)$$

$$x \frac{dx}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dx^2}{dt}. \quad (45)$$

Introduciendo ambas expresiones en la expresión (41) obtenemos:

$$m \left(\frac{1}{2} \frac{d^2x^2}{dt^2} - \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 \right) = \sqrt{2k_B T \gamma} \xi x - \gamma \left(\frac{1}{2} \frac{dx^2}{dt} \right). \quad (46)$$

Al promediar sobre todas las partículas, recordando que el ruido blanco y la posición no están correlacionadas, podemos separar el promedio de ambos términos.

$$m \frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} = -\gamma \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} + 2m \left(\langle \frac{dx}{dt} \rangle \right)^2 + 2\sqrt{2k_B T \gamma} \langle \xi \rangle \langle x \rangle. \quad (47)$$

Y recordando que el ruido se expresaba como un ruido blanco gaussiano centrado en cero, se tiene que el promedio es cero ($\langle \xi \rangle = 0$). Por tanto, el término de ruido se puede eliminar y la ecuación pasa a ser

$$m \frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} = -\gamma \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} + 2m \langle v \rangle^2. \quad (48)$$

Utilizando la expresión de la equipartición de la energía [24]:

$$\langle \frac{1}{2} m v^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T. \quad (49)$$

Y definiendo $\phi = \frac{d\langle x^2 \rangle}{dt}$, se obtiene una ecuación fácil de resolver

$$m \frac{d\phi}{dt} = -\gamma\phi + 2k_B T \rightarrow \phi = C e^{-\frac{\gamma}{m}t} + 2 \frac{k_B T}{\gamma}. \quad (50)$$

Donde la exponencial suele tener valores muy bajos, según estimó Langevin del orden de 10^{-8} s[25]. De modo que podemos despreciar este término:

$$\phi = \frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = 2 \frac{k_B T}{\gamma}. \quad (51)$$

Y volviendo a integrar se puede obtener finalmente la solución:

$$\langle x^2 \rangle - \langle x_0^2 \rangle = 2 \frac{k_B T}{\gamma} t. \quad (52)$$

Bibliografía

- [1] G. Palla, I. Derényi, I. Farkas, and T. Vicsek, “Uncovering the overlapping community structure of complex networks in nature and society,” 2005.
- [2] D. S. Dean, “Langevin equation for the density of a system of interacting Langevin processes,” *J. Phys. A. Math. Gen.*, vol. 29, no. 24, pp. L613–L617, Dec. 1996.
- [3] A. Einstein, “Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen,” *Ann. Phys.*, vol. 322, no. 8, pp. 549–560, 1905.
- [4] D. S. Lemons and A. Gythiel, “Paul Langevin’s 1908 paper ‘On the Theory of Brownian Motion’ [‘Sur la théorie du mouvement brownien,’ *C. R. Acad. Sci. (Paris)* 146, 530–533 (1908)],” *Am. J. Phys.*, vol. 65, no. 11, p. 1079, Jun. 1998.
- [5] Gouy, “Note sur le mouvement brownien,” *J. Phys. Théorique Appliquée*, vol. 7, no. 1, pp. 561–564, 1888.
- [6] P. Mörters and Y. Peres, “Brownian Motion,” 2008.
- [7] P. G. Saffman and M. Delbrück, “Brownian motion in biological membranes.,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, vol. 72, no. 8, pp. 3111–3, Aug. 1975.
- [8] C. Kenyon and B. Wang, “A cluster of Antennapedia-class homeobox genes in a nonsegmented animal,” *Science (80-.)*, vol. 253, no. 5019, pp. 516–518, Aug. 1991.
- [9] C. N. Likos, “Effective interactions in soft condensed matter physics,” *Phys. Rep.*, vol.

- 348, no. 4–5, pp. 267–439, Jul. 2001.
- [10] C. N. Likos, B. M. Mladek, D. Gottwald, and G. Kahl, “Why do ultrasoft repulsive particles cluster and crystallize? Analytical results from density-functional theory,” *J. Chem. Phys.*, vol. 126, no. 22, p. 224502, Jun. 2007.
- [11] G. Volpe and G. Volpe, “Simulation of a Brownian particle in an optical trap,” *Am. J. Phys. J. Phys. Am. J. Phys. J. Homepage*, vol. 81, no. 36, pp. 230–435, 2013.
- [12] J. B. Delfau, H. Ollivier, C. López, B. Blasius, and E. Hernández-García, “Pattern formation with repulsive soft-core interactions: Discrete particle dynamics and Dean-Kawasaki equation,” *Phys. Rev. E*, vol. 94, no. 4, pp. 1–13, 2016.
- [13] M. San Miguel and R. Toral, “Stochastic Effects in Physical Systems,” Springer, Dordrecht, 2000, pp. 35–127.
- [14] E. Nelson, “Dynamical Theories of Brownian Motion second edition.”
- [15] C. W. (Crispin W. . Gardiner, *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry, and the natural sciences*. Springer, 2004.
- [16] K. Kawasaki, “Stochastic model of slow dynamics in supercooled liquids and dense colloidal suspensions,” *Phys. A Stat. Mech. its Appl.*, vol. 208, no. 1, pp. 35–64, Jul. 1994.
- [17] L. C. G. Rogers, L. C. G. Rogers, D. Williams, and J. Wiley, “Diffusions, Markov processes and Martingales, vol 2: Ito calculus,” 1987.
- [18] T. Munakata, “Liquid Instability and Freezing –Reductive Perturbation Approach–,” *J. Phys. Soc. Japan*, vol. 43, no. 5, pp. 1723–1728, Nov. 1977.
- [19] F. Cinti, P. Jain, M. Boninsegni, A. Micheli, P. Zoller, and G. Pupillo, “Supersolid Droplet Crystal in a Dipole-Blockaded Gas,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, no. 13, p. 135301, Sep. 2010.
- [20] N. Henkel, R. Nath, and T. Pohl, “Three-dimensional Roton-Excitations and Supersolid formation in Rydberg-excited Bose-Einstein Condensates,” 2010.
- [21] F. Cinti, T. Macr, W. Lechner, G. Pupillo, and T. Pohl, “Defect-induced supersolidity with soft-core bosons,” 2014.
- [22] F. Cinti, M. Boninsegni, and T. Pohl, “Exchange-induced crystallization of soft-core bosons,” *New J. Phys.*, vol. 16, 2014.
- [23] “Radial distribution functions.” [Online]. Available: http://rings-code.sourceforge.net/index.php?option=com_content&view=article&id=50:rdf&catid=36:phy-chi&Itemid=58. [Accessed: 18-May-2018].
- [24] T. Li, S. Kheifets, D. Medellin, and M. G. Raizen, “Measurement of the instantaneous velocity of a Brownian particle,” *Science*, vol. 328, no. 5986, pp. 1673–5, Jun. 2010.
- [25] W. Brenig, “Brownian Motion: Langevin Equation,” in *Statistical Theory of Heat*, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1989, pp. 69–72.