

Influencia de coloides pasivos en suspensiones de coloides activos

D. Rogel-Rodríguez^{1,2}, R. Martínez^{1,2,3}, F. Alarcón^{1,2} y C. Valeriani^{1,2}

¹Departamento de Estructura de la Materia, Física Térmica y Electrónica, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, Spain

²Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC), 28040 Madrid, Spain

³IFIMAC, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de Madrid, Ciudad Universitaria de Cantoblanco, 28049 Madrid, Spain

Los sistemas de coloides activos están inherentemente fuera del equilibrio, lo cual muchas veces da lugar a comportamientos emergentes interesantes, como lo son la separación de fases inducida por motilidad (MIPS) en sistemas sin ninguna interacción atractiva o de alineamiento. Añadir coloides pasivos a un sistema activo abre la puerta a una infinidad de aplicaciones, en la que destacan el autoensamblaje a la carta y las mediciones micro-reológicas [1]. En este trabajo se ha investigado mediante simulaciones computacionales el comportamiento de las fases de sistemas bidimensionales de mezclas de partículas brownianas esféricas activas y pasivas.

Se ha empleado dinámica browniana para simular sistemas de $N = N_a + N_p$ coloides circulares, donde N_a es el número de partículas activas y N_p el número de partículas pasivas, en una caja de longitud L con condiciones periódicas de contorno, con entre 90000 y 180000 coloides en total. Ambos tipos de partículas tienen diámetro $\sigma = 1$ y están sometidas a movimiento browniano, teniendo las activas una fuerza de propulsión de magnitud $|F_a|$ en la dirección de su vector orientación \vec{n} . Las ecuaciones de movimiento para la posición de la partícula i -ésima, \vec{r}_i , y para su correspondiente \vec{n}_i pueden escribirse como

$$\begin{aligned} \dot{\vec{r}}_i &= \frac{D}{k_B T} \left(- \sum_{j \neq i} \nabla V(r_{ij}) + |F_a| \vec{n}_i \right) + \sqrt{2D} \vec{\xi}_i, \\ \dot{\vec{n}}_i &= \sqrt{2D_r} \vec{\xi}_i \times \vec{n}_i, \end{aligned}$$

donde $V(r_{ij})$ es el potencial de interacción a pares entre cualquier par de partículas pasivas o activas, k_B es la constante de Boltzmann, T es la temperatura, y las componentes de $\vec{\xi}_i$ representan procesos estocásticos de ruido blanco y media nula. La relación entre el coeficiente de difusión translacional D y el rotacional D_r es la dada por las ecuaciones de Stokes-Einstein, $D_r = 3D/\sigma^2$. Las partículas pasivas obedecen a las mismas ecuaciones, con $|F_a| = 0$. Como potencial de interacción se ha empleado el potencial puramente repulsivo de Weeks-Chandler-Andersen (WCA) [3].

Se ha estudiado la MIPS de sistemas con diferentes fracciones de partículas pasivas N_p/N , para distintos números de Péclet y densidades en área ϕ , definidas como $Pe = 3v/(\sigma D_r)$ y $\phi = \pi N \sigma^2 / (4L^2)$ respectivamente, donde $v = |F_a|D/k_B T$ es la velocidad de autopropulsión. Los diagramas de fases obtenidos para cada fracción N_p/N se muestran en la fig. 1, donde se observa que, pese a que la presencia de partículas pasivas en el sistema activo dificulta la MIPS, ésta puede darse incluso cuando el 70% de los coloides son pasivos. Cuando los coloides pasivos son el 80% o más, no se ha observado MIPS a ningún ϕ en el rango de números de Péclet evaluados (hasta $Pe = 250$).

Por otro lado, se ha observado que en sistemas con mez-

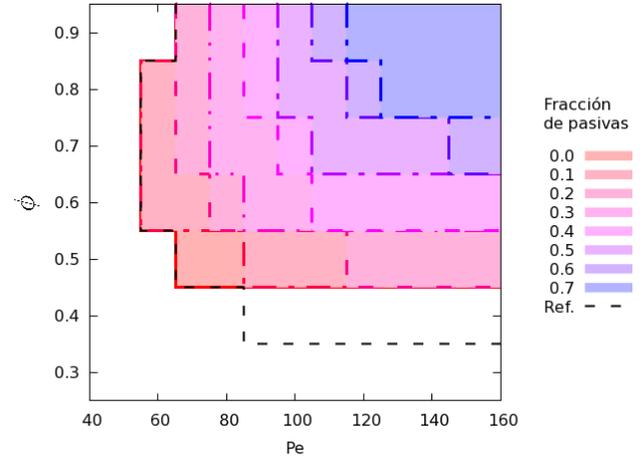


Fig. 1. Diagrama de fases de sistemas de mezclas de coloides activos y pasivos en función de la densidad en área ϕ y el número de Péclet para diferentes fracciones N_p/N de componentes pasivos. La línea negra punteada corresponde a la ref. [2], donde $|F_a| = \text{cte}$ y Pe cambia con D_r .

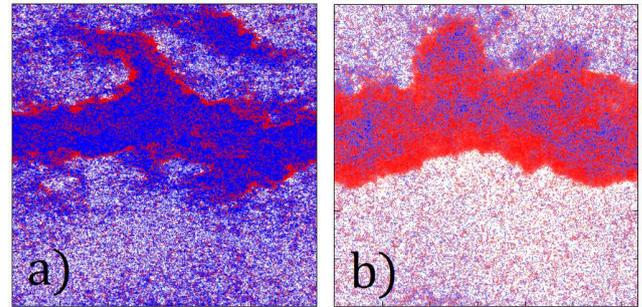


Fig. 2. Fotos de dos simulaciones de mezclas en la fase separada (en rojo, coloides activos y en azul los pasivos): (a) $N_p/N = 0.6$, $\phi = 0.8$, $Pe = 190$, (b) $N_p/N = 0.3$, $\phi = 0.7$, $Pe = 170$.

clas de coloides activos y pasivos, la MIPS es muy dinámica, y se produce mediante la formación espontánea de frentes activos que encierran núcleos pasivos y favorecen su cristalización. Ejemplos de estas configuraciones se muestran en la fig. 2. Esto es relevante de cara a diseñar dispositivos experimentales para el ensamblado direccionado mediante el empleo de partículas activas.

-
- [1] A. Wysocki, R. G. Winkler, and G. Gompper, *New J. Phys.* **18**, 123030 (2016).
 [2] J. Stenhammar, D. Marenduzzo, R. J. Allen, and M. E. Cates, *Soft Matter* **10**, 1489-1499 (2014).
 [3] J. D. Weeks, D. Chandler, and H. C. Andersen, *J. Chem. Phys.* **54**, 5237-5247 (1971).