

INTERACCIONES COMPETITIVAS EN MATERIA BLANDA

DE LA HIPERUNIFORMIDAD AL DISEÑO DE MATERIALES

Antonio Díaz Pozuelo¹

Cecilia Bores²

Diego González Salgado³

Enrique Lomba^{1,4}

Eva González Noya¹

¹ Instituto de Química Física Blas Cabrera (IQF-CSIC), Madrid.

² Department of Physics and Astronomy, Union College, Nueva York.

³ Facultade de Ciencias, Universidad de Vigo.

⁴ Grupo NAFOMAT, Facultade de Física, Universidade de Santiago de Compostela

AUTOENSAMBLAJE: EL LENGUAJE UNIVERSAL DEL ORDEN

- El **autoensamblaje** es el proceso **espontáneo** mediante el cual componentes desordenados se organizan por sí mismos para formar estructuras ordenadas y funcionales. Es un **fenómeno universal** que no requiere dirección externa y ocurre en absolutamente todas las escalas de la naturaleza.

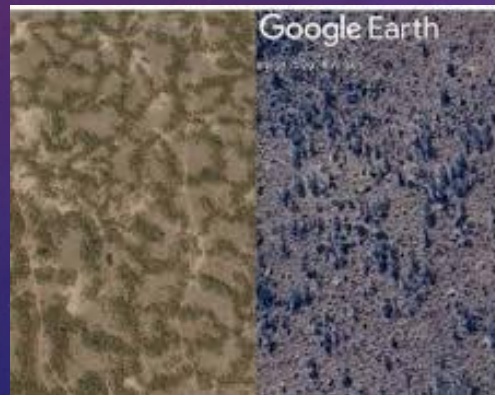
- **Cúmulos Globulares**

Cientos de miles de estrellas se agrupan de forma natural y espontánea en el espacio, formando estructuras esféricas increíblemente densas, estables y perfectamente organizadas.



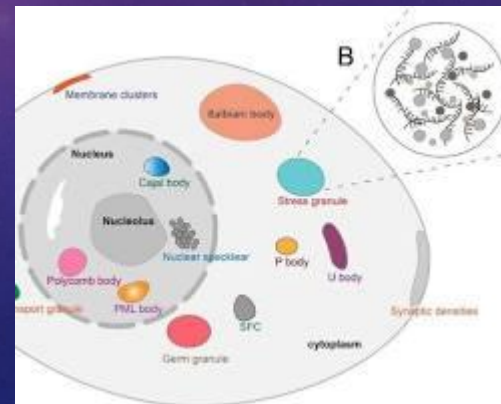
- **Patrones de Vegetación**

Los árboles y arbustos de la sabana no crecen al azar. La comunidad vegetal se organiza por sí sola, emergiendo patrones espaciales periódicos (como estructuras lamelares o bandas) que se extienden por kilómetros.



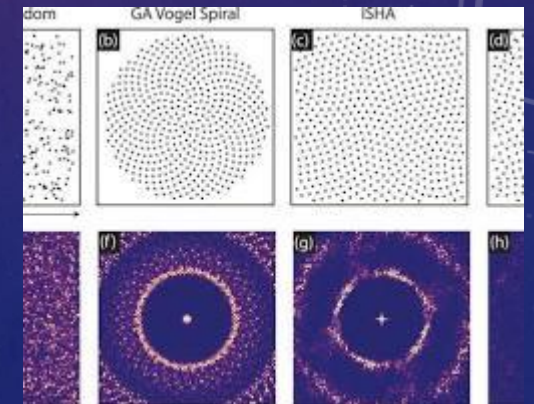
- **Agregados Coloidales**

En el interior de nuestras células, diferentes biomoléculas se agrupan espontáneamente. Forman condensados o agregados coloidales, organizando el espacio sin necesidad de membranas físicas.



- **Metamateriales**

La materia puede autoensamblarse en estados exóticos, como los **materiales hiperuniformes**. Esto da lugar a metamateriales con capacidades ópticas y acústicas como la alta reflectancia, un índice de refracción variable o la capacidad de guiar ondas.



¿QUÉ ES UN SISTEMA HIPERUNIFORME?

- Un sistema se considera **hiperuniforme** (Torquato, 2021) cuando **suprime las fluctuaciones de densidad** para longitudes de onda de largo alcance (**distancias macroscópicas**).

$$\lim_{k \rightarrow 0} S(k) = 0$$

• LÍQUIDOS Y VIDRIOS (desorden)

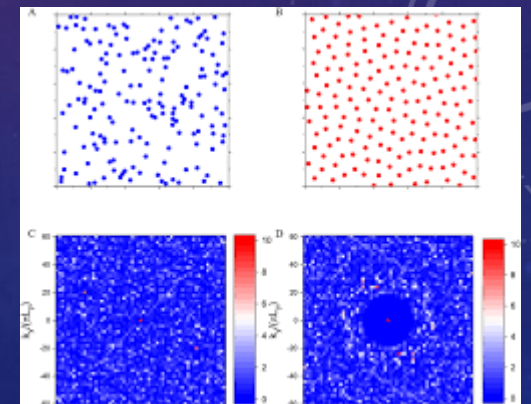
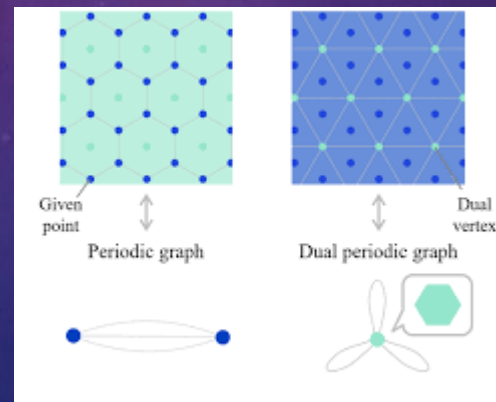
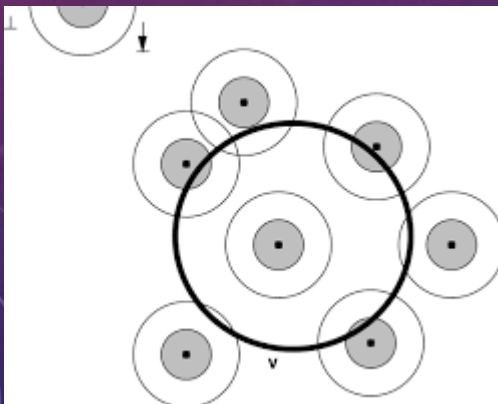
- **Estructura local:** Desordenada e isotrópica (sin simetría direccional).
- **Fluctuaciones a gran escala:** Altas.
- **Espacio recíproco:** $S(k \rightarrow 0) > 0$.

• CRISTALES (orden)

- **Estructura local:** Altamente ordenada y anisotrópica (simetría direccional rota).
- **Fluctuaciones a gran escala:** Suprimidas.
- **Espacio recíproco:** $S(k \rightarrow 0) = 0$.

• HIPERUNIFORMIDAD (orden oculto)

- **Estructura local:** Desordenada e isotrópica (como un líquido).
- **Fluctuaciones a gran escala:** Anómalamente suprimidas (como un cristal)
- **Espacio recíproco:** $\lim_{k \rightarrow 0} S(k) = 0$



GENERACIÓN DE SISTEMAS HIPERUNIFORMES: DINÁMICA MOLECULAR

- La Ecuación de Movimiento (**Segunda Ley de Newton**)

$$m_i a_i = F_i \leftrightarrow m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i$$

- El Origen de la Fuerza (**El Gradiente del Potencial**)

$$F_i = -\nabla_{r_i} U(r_i, \dots, r_N)$$

- Obteniendo la Posición (**Integración Numérica**)

$$r_i(t + \Delta t) \approx r_i(t) + v_i(t)\Delta t - \frac{\nabla_{r_i} U}{2m_i} \Delta t^2$$

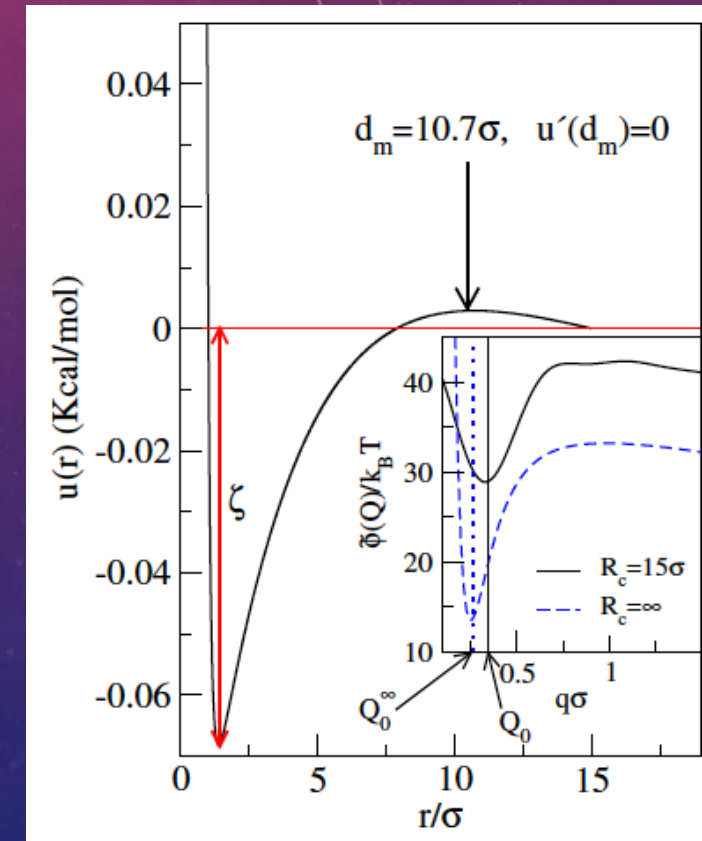
- A través de este cálculo continuo, vemos que es la forma geométrica del **potencial U** la que dicta hacia dónde se **mueve la partícula** en el siguiente instante de tiempo para minimizar su energía.
- Simulación de dinámica molecular: **LAMMPS** colectivo canónico (NVT) con densidades bajas y temperaturas reducidas altas: $k_b T / \zeta = 3 - 15$

LAS REGLAS DEL JUEGO: EL POTENCIAL SALR

- Para lograr que las partículas se autoensamblen, utilizamos un **potencial tipo SALR** continuo. Concretamente, empleamos una versión del potencial de Kac de **dos exponenciales** modificado con un **núcleo blando** para la dinámica molecular:

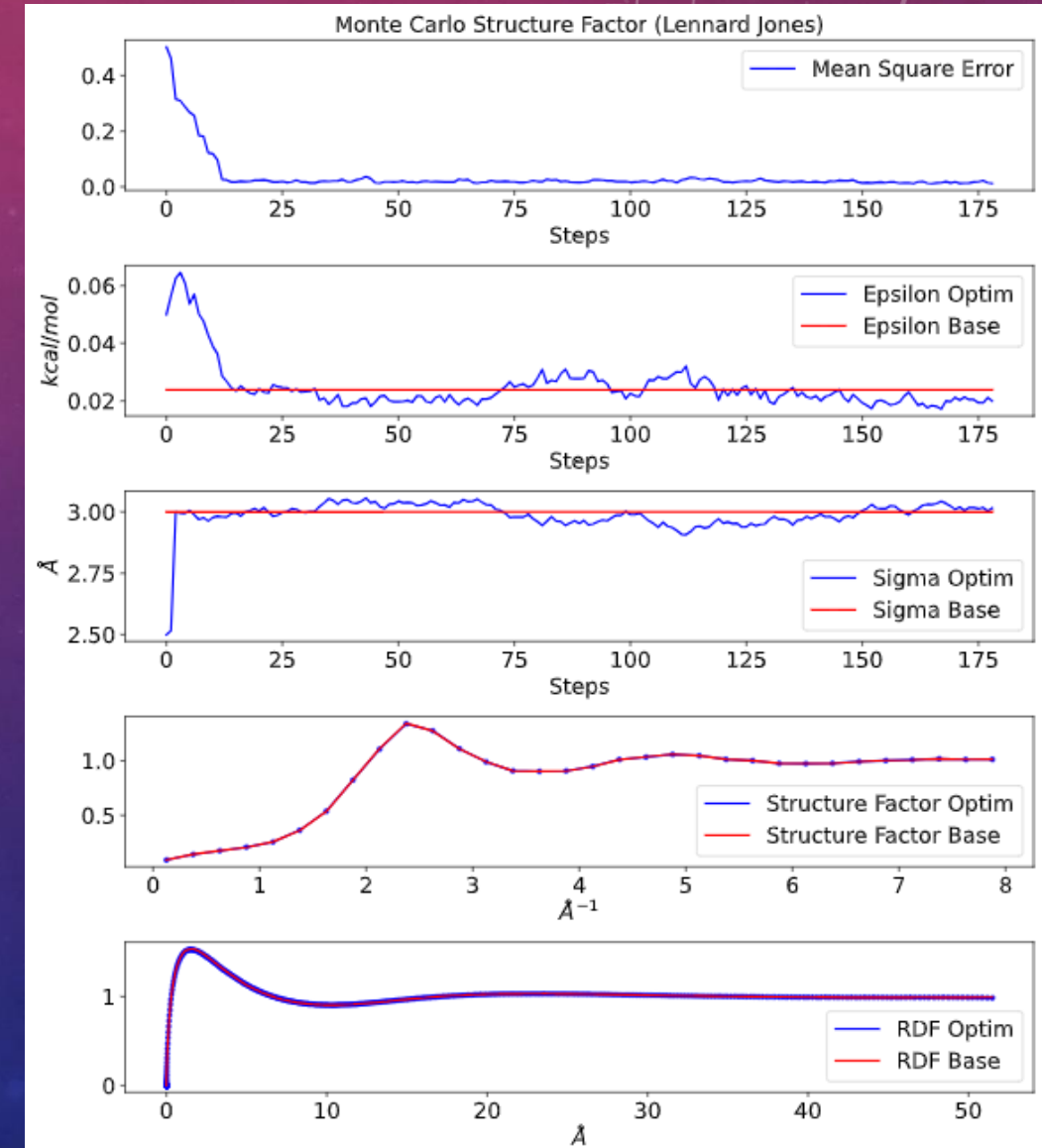
$$u^{SALR}(r) = \varepsilon \left[K_r e^{-\alpha_r r/\sigma} - K_a e^{-\alpha_a r/\sigma} + \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{10} \right]$$

- **Atracción a Corto Alcance** (El término $-K_a$): Provoca la **agregación espontánea**, hace que las partículas se agrupen
- **Repulsión a Largo Alcance** (El término K_r): **Evita** que el sistema sufra **una transición de fase macroscópica** (condensación/separación de fases). Es la clave de la autolimitación.
- **Núcleo Blando** (El término a la 10): **Evita la superposición física** de las partículas a distancias muy cortas.
- Interacción competitiva genera un **sistema intrínsecamente frustrado** → interacción *net*a entre clústeres se vuelve repulsiva a gran distancia.
- **Repulsión de largo alcance bloquea la dinámica de los agregados** (fase vítrea de clústeres) → suprime fuertemente las fluctuaciones de densidad a gran escala (**hiperuniformidad**).
- La distancia de correlación media entre agregados es aprox. $\lambda_m \approx 2d_m$
- Potencial truncado y desplazado en $R_c = 60\sigma$



AFINANDO LAS REGLAS: MONTE CARLO INVERSO ACELERADO

- **Ajuste de parámetros:** conocemos la estructura final a lograr \rightarrow Monte Carlo Inverso con funciones objetivo $g(r)$ y $S(Q)$.
- Desarrollo de dos programas (GPL) en Python + Fortran **CUDA**
 - https://github.com/adpozuelo/mc_structurefactor
 - https://github.com/adpozuelo/mc_radialdistributionfunction



ANALIZANDO EL CAOS: BIG DATA Y DINÁMICA MOLECULAR

- Una simulación genera Terabytes de datos con las posiciones y velocidades de 218.000 partículas en millones de instantes de tiempo.
- Para extraer **las propiedades físicas**, necesitamos saber **qué partículas forman un agregado, cuánto dura, cómo se mueve y cómo se estructura internamente**.
- Realizar este cómputo en **CPU** (aunque sea de forma paralela) es **inviable**.
- Desarrollo de programa (*GPL*) en Fortran **CUDA**
 - https://github.com/elomba/trj_analysis
- Reescritos y optimizados los algoritmos de cálculo para que se ejecuten en paralelo **utilizando técnicas de computación paralela** en las tarjetas gráficas (**GPUs**) de NVIDIA.
 - Clustering
 - Implementación de **G-DBSCAN** (*Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise*). Algoritmo que rastrea en paralelo qué partículas forman un agregado.
 - Análisis Morfológico y Estructural
 - **Radios de Giro (R_g)** y **Centro de Masas**: Para medir el tamaño y posición de cada clúster.
 - **Perfiles de Densidad ($\rho_{cl}(r)$)**: Para determinar la estructura interna (núcleo líquido vs. corona gaseosa) y calcular el radio de Gibbs.
 - **Función de Distribución Radial ($g(r)$)** y **Factor de Estructura ($S(Q)$)**: Evaluados tanto a nivel intra-clúster (partículas) como inter-clúster (agregados).
 - Análisis Dinámico
 - **Desplazamiento Cuadrático Medio (MSD)**: Para estudiar regímenes de difusión (balístico, subdifusivo, etc.).
 - **Autocorrelación de Velocidades (VACF)**: Para la obtención del espectro de frecuencias vibracionales $Z(\nu)$.

ACELERACIÓN GPU Y RENDIMIENTO MÁXIMO

- **Hardware:** Procesador Intel Xeon Gold 6548Y+ dual (*CPU*) contra una NVIDIA RTX Pro 4500 Blackwell (*GPU*)
- **Software *CPU*:** LAMMPS (compute rdf y compute orientorder/bond), Freud 3.5.0 (StaticStructureFactorDirect) y versión propia¹ Numba (DBSCAN).

Table 1: Benchmark comparison between CPU and GPU implementations for structural analysis calculations.

| Method | 97,336 particles | | | 216,000 particles | | |
|---------------------------------|------------------|---------|---------|-------------------|---------|---------|
| | CPU (s) | GPU (s) | Speedup | CPU (s) | GPU (s) | Speedup |
| $g(r)$ | 8.40 | 0.03 | 280× | 17.40 | 0.165 | 105× |
| $Q_4, Q_6, Q_8, Q_{10}, Q_{12}$ | 0.02 | 0.003 | 6.7× | 0.17 | 0.008 | 21× |
| $S(Q)$ | 4.45 | 0.09 | 49× | 22.00 | 0.29 | 76× |
| Cluster analysis | 0.12 | 26.6 | 220× | 0.25 | 64.0 | 250× |

- ¹ Rodrigo Lomba, Antonio Díaz Pozuelo, <https://oa.upm.es/94883/>, https://github.com/rlombamoreno/TFG_DBSCAN, (2026).
- Thompson, A. P., et al. "LAMMPS - a flexible simulation tool..." Comput. Phys. Commun. 271, 108171 (2021).
- Ramasubramani, V., et al. "freud: A software suite for high throughput analysis..." Comput. Phys. Commun. 254, 107275 (2020).

ANATOMÍA DE LOS AGREGADOS COLOIDALES

• Dinámica de supervivencia

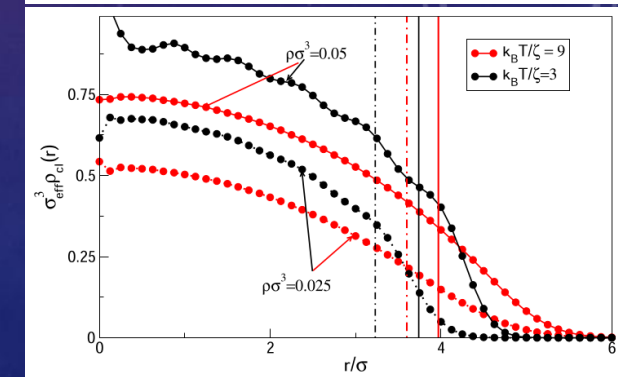
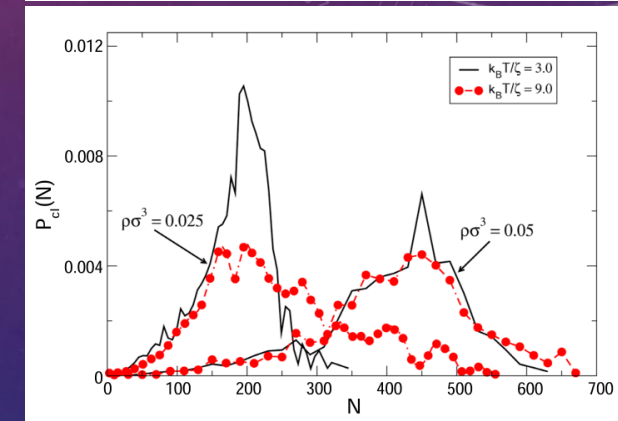
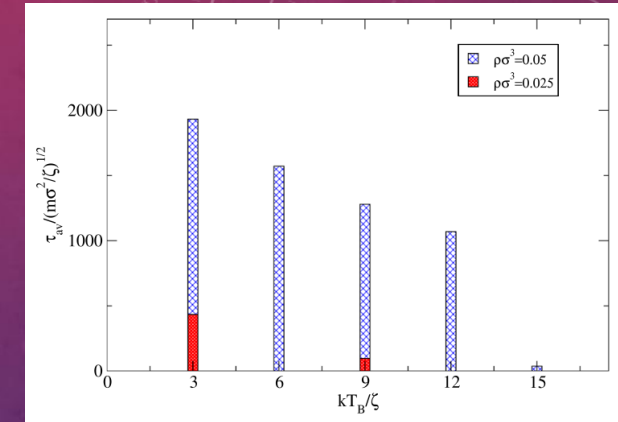
- A bajas temperaturas, los agregados coloidales son estructuras altamente estables y longevas.
- Sin embargo, a altas temperaturas y bajas densidades, el sistema entra en una **dinámica rápida y caótica** donde los agregados se **dividen y se fusionan** de forma constante.

• Tamaños y Poblaciones

- La distribución del tamaño de los agregados **depende fuertemente de la densidad global del sistema**:
 - A ρ alta la T influye poco.
 - A ρ baja y T alta aumenta la dispersión de tamaños: **coalescencia de agregados**.

• El Perfil de Densidad

- Los agregados **no son esferas duras y perfectas**. Tienen una estructura de "núcleo-atmósfera".
- El **interior del agregado** (núcleo) presenta una densidad muy alta, típica del **estado líquido**.
- A medida que nos **alejamos del centro**, la estructura externa se vuelve difusa y corresponde a un **comportamiento más propio de un gas** ($R > R_{gibbs}$).



DINÁMICA: LA PARADOJA DEL MOVIMIENTO

• Movimiento Individual

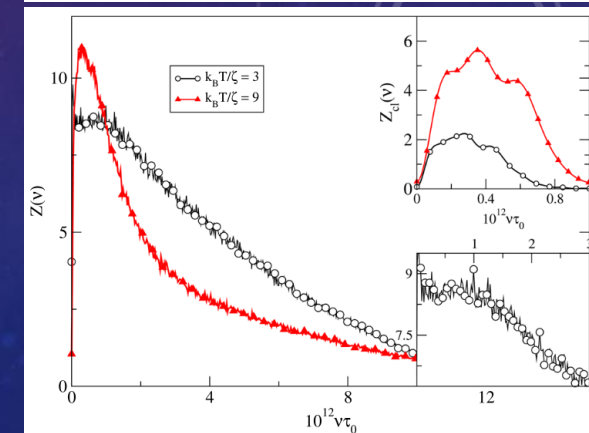
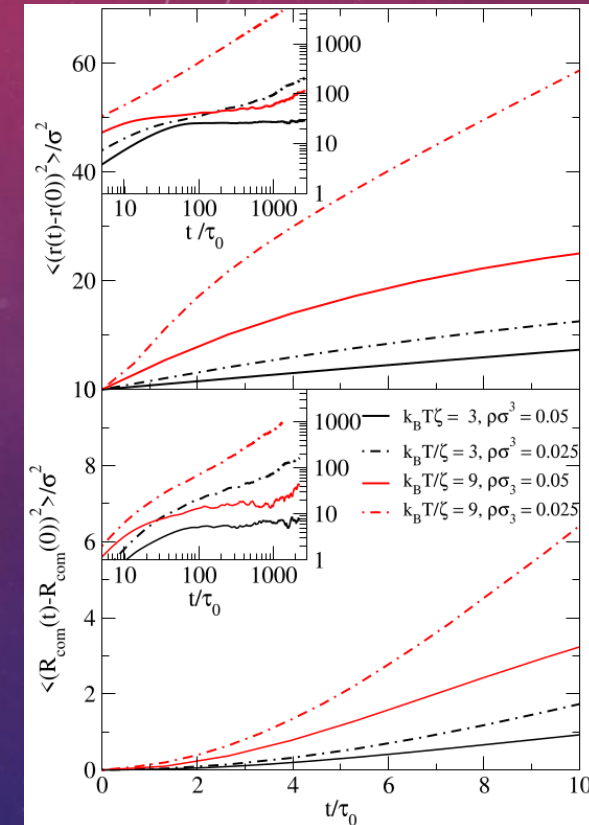
- A corta escala, si miramos las **partículas individuales**, se mueven y se desplazan rápidamente dentro de su propio agregado. Su dinámica inicial es puramente difusiva (típica de un **líquido**).
- A tiempos medios, el **desplazamiento** se frena (**subdifusión**) porque las partículas "chocan" contra el límite invisible de su propio agregado (**fuerza atractiva**).

• Movimiento Colectivo

- Si miramos el centro de masas del **agregado completo**, vemos que se mueven (**vibran**), pero apenas se desplazan.
- A altas densidades, la repulsión de largo alcance crea un "atasco". Los **clústeres** oscilan en su sitio, pero su **difusión neta es casi nula**, confirmando el estado **cuasivítreo**.

• Espectro de Frecuencias vibracionales ($Z(\nu)$)

- Alta frecuencia (**Partículas**): Los altos valores en $Z(0)$ nos confirman la **dinámica fluida** y de desplazamiento de las partículas individuales dentro del clúster.
- Baja frecuencia (**Agregados**): El espectro de los clústeres, sin embargo, tiende a cero ($Z_{cl}(0) \rightarrow 0$). Las frecuencias observadas indican que el agregado está **vibrando en su sitio sin desplazarse**, atrapado por la repulsión de sus vecinos.



EL ORDEN OCULTO: HIPERUNIFORMIDAD EFECTIVA

• Estructura Espacial ($g(r)$)

- Desorden ordenado: La gráfica $g_{cl-cl}(r)$ nos muestra cómo se distribuyen los agregados en el espacio. A **altas densidades**, vemos un **desdoblamiento en la segunda capa de coordinación**, lo que es una firma inconfundible de que tenemos una **estructura amorfa** (desordenada), como un **vidrio**.
- Interior líquido: En contraste, la **estructura interna** del clúster ($g_{intracluster}(r)$) sigue siendo claramente **líquida**

• Factor de Estructura ($S_{cl-cl}(Q)$)

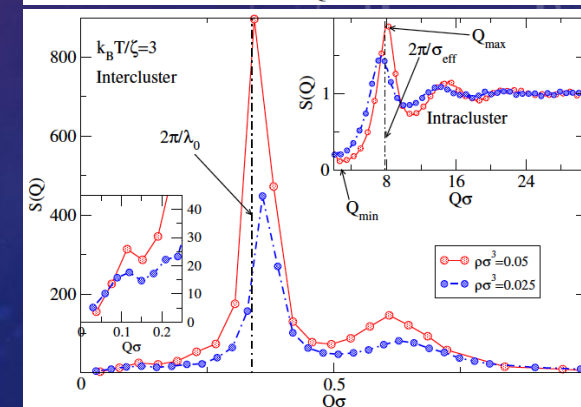
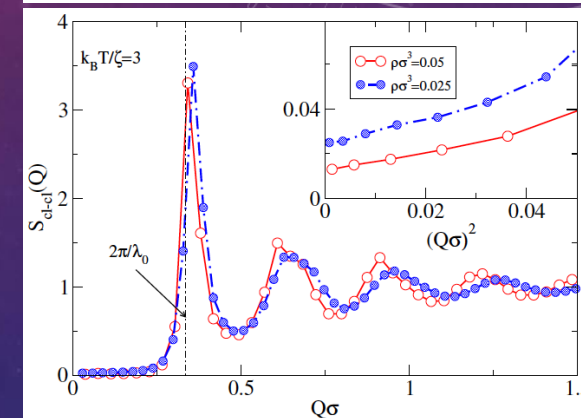
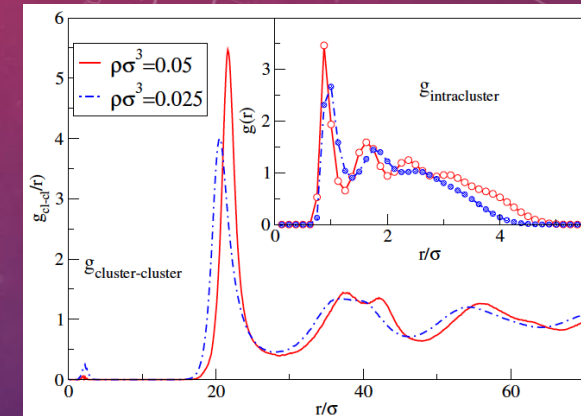
- Estado "congelado": El **pico principal** del factor de estructura entre agregados **supera el límite de Hansen-Verlet (>2.86)**. Esto confirma que, aunque están desordenados, los **clústeres** están rígidamente bloqueados como en un **sólido**
- **Hiperuniformidad Efectiva**: Para **longitudes de onda largas** ($Q \leq 0.2\sigma^{-1}$), el valor de $S(Q)$ cae drásticamente hasta casi cero. Obtenemos un índice de atenuación enorme ($H \geq 10^2$), confirmando matemáticamente que hemos logrado un **material efectivamente hiperuniforme de Clase I**.

• El Reto del Sistema Global ($S(Q)$ total)

- Aunque la "red" de agregados es hiperuniforme, si miramos el **sistema global partícula a partícula**, la perfección disminuye. Esto se debe a que hay algunas "**partículas libres**" flotando como gas y a que los agregados no son exactamente idénticos en tamaño (**polidispersidad**).

• Precisión en el límite $Q \rightarrow 0$

- Como se observa en el recuadro interior del factor de estructura, **nos faltan puntos en el límite $Q \rightarrow 0$** .
- En simulaciones **3D**, sondear longitudes de onda más grandes exige **cajas de simulación inmensas**. Duplicar la caja multiplica por 8 las partículas, volviéndolo **computacionalmente inasumible con dinámica molecular**.
- Para ganar resolución y observar el comportamiento macroscópico puro, **proponemos dos alternativas**:
 - **Reducción dimensional**: Pasar a sistemas en **2D**, donde el coste computacional crece mucho más despacio (L^2), permitiendo simular áreas gigantescas.
 - **Cambio de paradigma**: Mantener el estudio en 3D pero abandonar el cálculo de fuerzas de la Dinámica Molecular, pasando a la mecánica estadística pura mediante métodos de **Monte Carlo**.

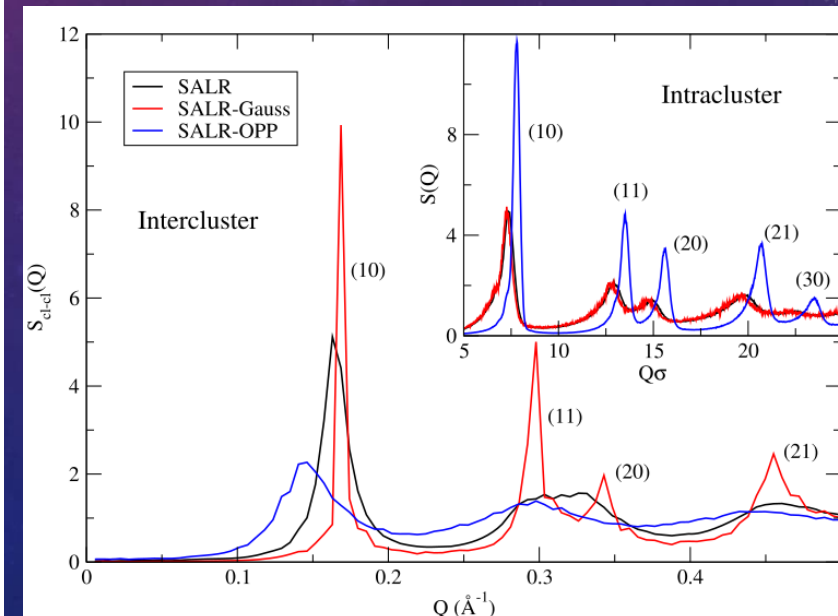
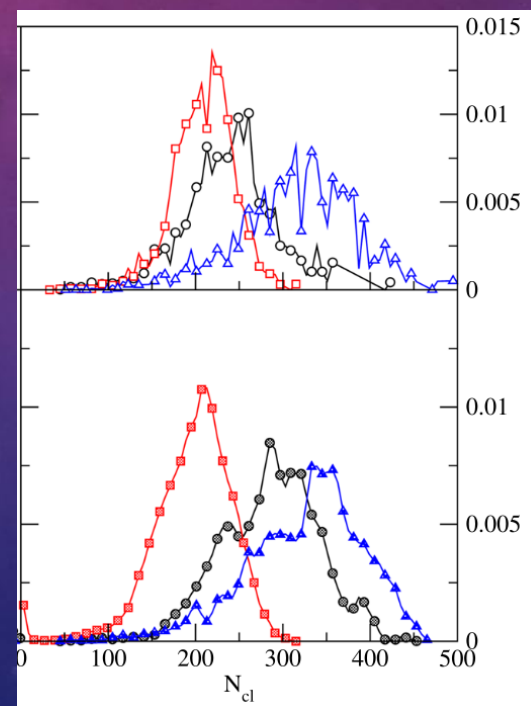
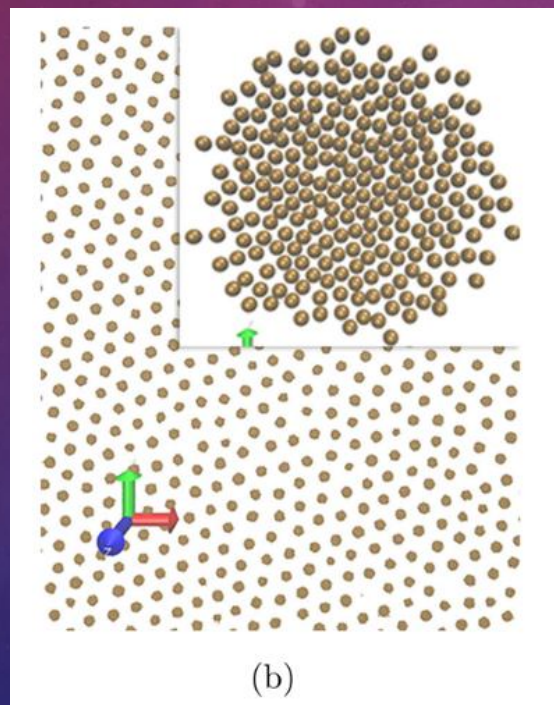
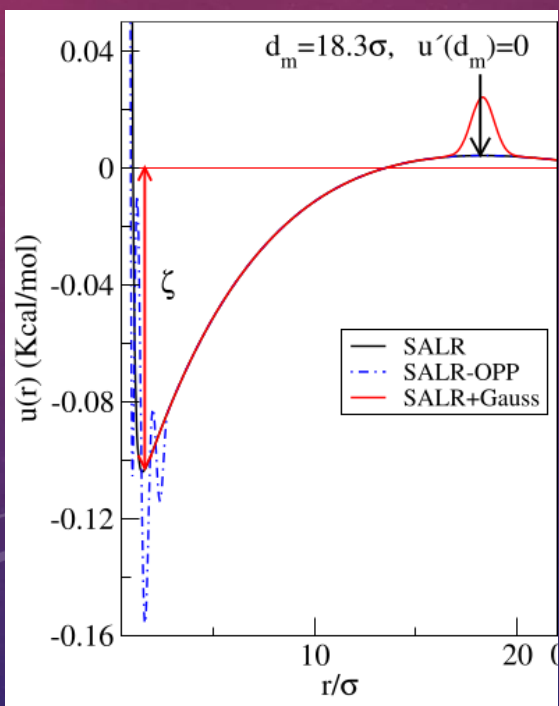


ESCALANDO A 2D Y EL POTENCIAL SALR-GAUSS

- Al pasar a un **entorno 2D**, eliminamos la frustración geométrica del 3D y simulamos áreas gigantescas para acceder por fin a escalas macroscópicas y **resolver el límite $Q \rightarrow 0$** .
- El **Potencial SALR-Gauss**: Para forzar a los agregados a tener exactamente el mismo tamaño, sumamos un **término gaussiano** al máximo repulsivo del potencial SALR. Actúa aumentando artificialmente la "**barrera de nucleación**" en la distancia d_m (**limita el crecimiento**).

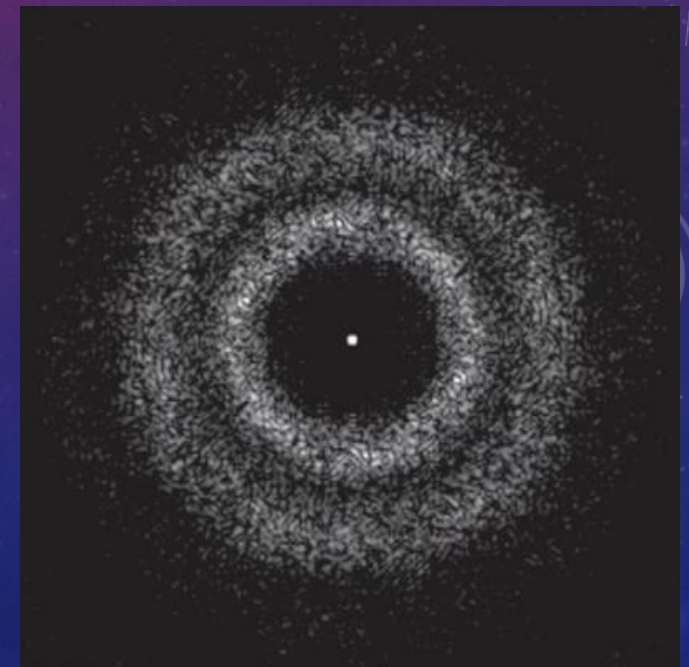
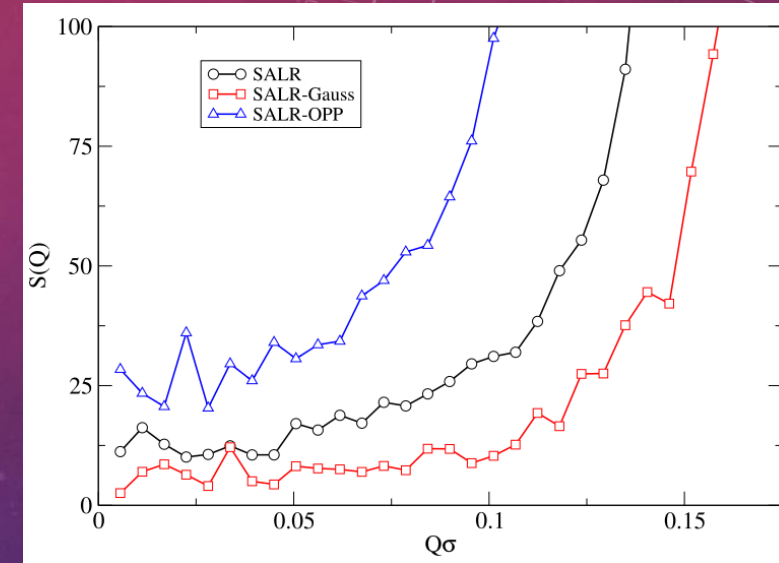
$$u(r) = u^{SALR}(r) + \varepsilon_g e^{-k_g(r-d_m)^2}$$

- En la **$g(r)$** la curva roja (SALR-Gauss) nos muestra una distribución de tamaños estrecha y simétrica, demostrando la **supresión de la polidispersidad**.
- En el **factor de estructura**, los picos altísimos y estrechos de la curva roja corresponden exactamente a las difracciones de una **red triangular perfecta**.



RESOLVIENDO EL LÍMITE MACROSCÓPICO ($Q \rightarrow 0$)

- Gracias a la **simulación masiva en 2D**, podemos sondear vectores de onda (Q) muchísimo más pequeños, obteniendo la "foto macroscópica" de las fluctuaciones.
- Al observar el **Factor de Estructura total $S(Q)$** cerca del origen, la curva roja (SALR-Gauss) experimenta una **caída en las fluctuaciones de densidad** hasta cinco veces mayor que el sistema altamente polidisperso (SALR-OPP).
- La curva cae dramáticamente hacia el cero: $\lim_{Q \rightarrow 0} S(Q) \approx 0$
- ¿Qué significa esto físicamente? Alcanzamos índices de atenuación masivos, acercándonos al comportamiento de los **sistemas hiperuniformes stealthy** (sigilosos).
- Al suprimir las fluctuaciones de densidad a gran escala, el **material se vuelve transparente** o "invisible" a determinadas **frecuencias de onda** (luz, sonido), abriendo la puerta a la creación de metamateriales y guías de onda ópticas avanzadas.
- El "**agujero negro**" alrededor del centro del patrón de difracción (captura real) es la prueba visual de la invisibilidad, **no hay absolutamente ninguna dispersión (*scattering*)** en esos ángulos pequeños (que corresponden a longitudes de onda largas).



VERSATILIDAD DEL MODELO

- **La Física Médica y Celular**

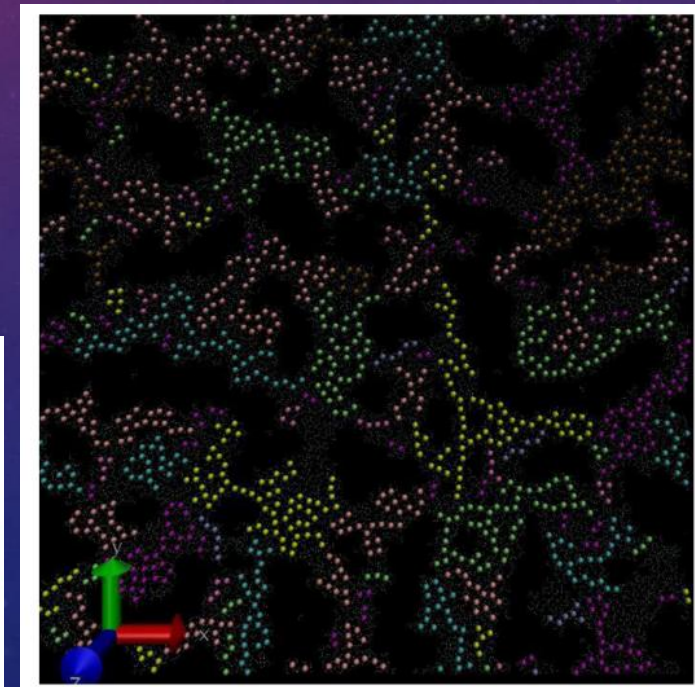
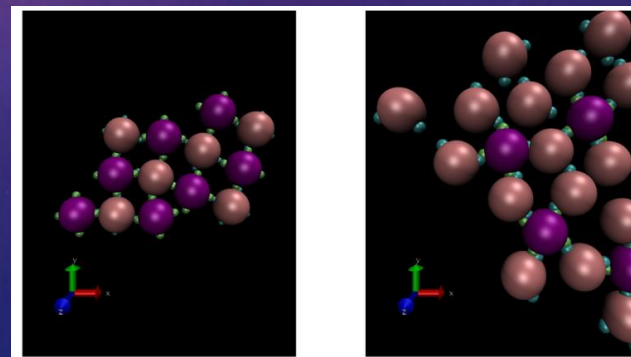
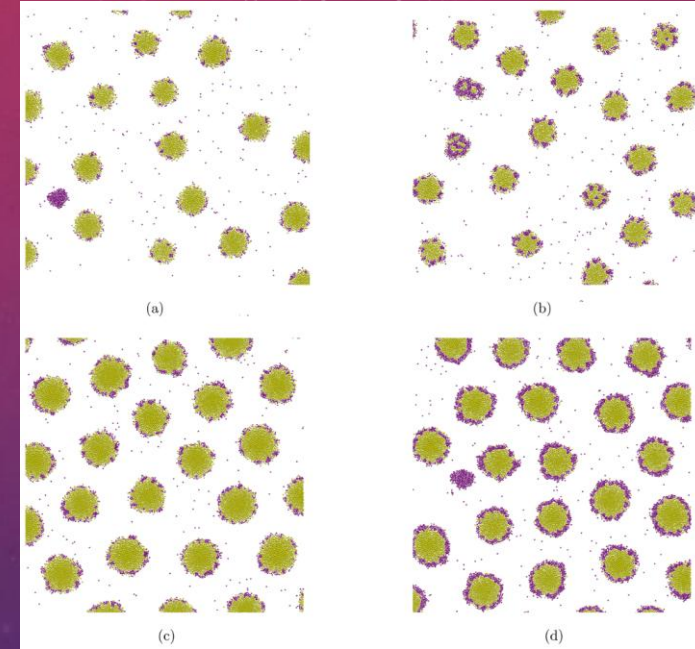
- Modificando ligeramente las reglas de nuestro modelo SALR, podemos dejar de diseñar metamateriales y **simular el interior de nuestras células**.

- **Segregación Interna (TDP-43)**

- Usando **mezclas binarias asimétricas** ($u_{AA} \neq u_{AB} \neq u_{BB}$), inducimos una **separación de fases dentro del propio agregado**. Esto imita las estructuras núcleo-corteza de condensados de proteínas asociados a **enfermedades neurodegenerativas**, como la TDP-43.

- **Redes Direccionales (Modelo *Patchy*)**

- Introduciendo "**parches**" **direccionales de atracción y repulsión** Yukawa, simulamos **interacciones proteína-ARN**.
- Pasamos de tener "gotas" compactas a **formar cadenas y redes abiertas muy polidispersas (modelo *Scaffold-Client*)**, reproduciendo fielmente la formación estocástica de orgánulos citoplasmáticos.



CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

• Conclusiones Principales

- Hemos demostrado que los **sistemas** con interacciones competitivas (**SALR**) forman agregados estables que **alcanzan estados cuasivítreos**.
- El **control estricto de la polidispersidad** (ej. mediante barreras repulsivas) es la **clave matemática** para **suprimir las fluctuaciones a gran escala** ($Q \rightarrow 0$) y **generar hiperuniformidad efectiva**.
- La **direccionalidad (parches)** y la **asimetría** nos permiten **reproducir topologías complejas** y la segregación interna de los condensados **biomoleculares** patológicos.

• El Futuro Inmediato

- Para lograr **resolución macroscópica en 3D** sin las limitaciones de la Dinámica Molecular, hemos desarrollado un nuevo software de **Monte Carlo en GPU** (próximamente GPL).
 - **El Algoritmo Checkerboard**: El código divide la caja de simulación 3D en celdas agrupadas en 8 conjuntos independientes. Esto permite a la **GPU** realizar barridos de Monte Carlo simultáneos sobre miles de partículas sin conflictos de memoria (*conflict-free*).
 - **Física Anisotrópica y Cuaterniones**: Implementa los potenciales permitiendo simular partículas con hasta 7 "parches" direccionales. El cálculo de las rotaciones espaciales complejas se resuelve a velocidad extrema utilizando álgebra de cuaterniones.
 - **Versatilidad Termodinámica**: El motor soporta tanto el colectivo canónico (NVT) como el isotérmico-isobárico (NpT), e incluye un ajuste adaptativo automático que afina en tiempo real los desplazamientos y rotaciones.
 - **Gestión Eficiente de Datos (I/O)**: Integración de soporte nativo para trayectorias en formato binario *NetCDF*, lo que permite almacenar posiciones, cuaterniones y metadatos en archivos hasta 35 veces más pequeños que los formatos de texto clásicos, resolviendo el cuello de botella del almacenamiento.
- **El objetivo: Simular enjambres masivos de partículas en 3D para confirmar el comportamiento macroscópico puro de estos metamateriales invisibles.**

AGRADECIMIENTOS Y REFERENCIAS

- **Colaboradores Científicos:**
 - **Cecilia Bores:** Department of Physics and Astronomy, Union College (Nueva York, EE. UU.)
 - **Diego González Salgado:** Universidad de Vigo.
 - **Enrique Lomba:** Instituto de Química Física Blas Cabrera (IQF-CSIC) y Universidade de Santiago de Compostela.
 - **Eva González Noya:** Instituto de Química Física Blas Cabrera (IQF-CSIC)
- **Computación y Financiación:**
 - **Soporte Computacional:** Agradecimiento al Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) y al Instituto de Química Física Blas Cabrera (CSIC) por el acceso y uso de sus instalaciones.
 - **Apoyo Financiero (España/Europa):** Trabajo financiado por la Agencia Estatal de Investigación (MICIU/AEI) y el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) mediante los proyectos PID2020-115722GB-C22 y PID2023-151751NB-I00.
 - **Apoyo Financiero (EE. UU.):** Trabajo financiado por el Union College (Nueva York, EE. UU.)
- **Referencias Destacadas:**
 - **Díaz-Pozuelo, A., González-Salgado, D., y Lomba, E.,** *J. Chem. Phys.* 162, 074903 (2025).
 - **Bores, C., Díaz-Pozuelo, A., y Lomba, E.,** *J. Chem. Phys.* 164, 054902 (2026).
 - **Sear, R. P., Chung S. W., Markovich G., Gelbart W. M., y Heath J.,** *Phys. Rev. E* 59, R6255 (1999).
 - **Palaia, I., y Šarić, A.,** *J. Chem. Phys.* 156, 194902 (2022).
 - **Torquato, S.,** *Phys. Rep.* 745, 1 (2018).
 - **Imperio, A., y Reatto, L.,** *J. Phys.: Condens. Matter* 16, S3769 (2004).



GOBIERNO
DE ESPAÑA

MINISTERIO
DE CIENCIA, INNOVACIÓN
Y UNIVERSIDADES

