



UNIVERSIDAD TECNICA
FEDERICO SANTA MARIA



Universidad Técnica Federico Santa María

Departamento de Ingeniería Mecánica

Método de imágenes en un sistema de dos interfaces paralelas

ICM-392 - Investigación Aplicada II

Profesor: Christopher Cooper V., Ph.D.

Alumno: Nicolás Espinoza M.

Valparaíso - Septiembre, 2018

Contenidos

1	Introducción	3
2	Marco Teórico	5
2.1	El campo eléctrico y el potencial eléctrico	5
2.2	La permitividad de un medio material, la polarización y el campo eléctrico microscópico	6
2.2.1	Campo eléctrico local, y polarización	6
2.2.2	Permitividad de un medio macroscópico	8
2.3	Desplazamiento eléctrico y campo eléctrico en un dieléctrico	9
2.4	Método de imágenes	10
3	Modelo de un sistema de tres medios dieléctricos con dos interfaces	11
3.1	Campo de reacción en un sistema con una interfaz y una carga puntual . . .	11
3.2	Sistema con dos interfaces paralelas y cargas en el medio	13
4	Continuación de trabajo	13

1 Introducción

En las últimas décadas ha crecido el interés por modelar de forma más precisa el comportamiento de sistemas biológicos, destacando las células y sus componentes y procesos. Es en esta línea de investigación que surgen y se desarrollan métodos para representar las interacciones que ocurren tanto dentro de la célula como a nivel extracelular.

Sin embargo, la complejidad de estos fenómenos hace que sea imposible hasta el momento abarcar de manera completa la naturaleza del proceso biológico correspondiente. Es por esto que actualmente se estudian de manera exhaustiva nuevas formas de representar los sistemas biológicos o sus elementos conformantes, recurriendo a múltiples disciplinas y enfoques. Por nombrar ejemplos de ramas de la ciencia relevantes tenemos la electrodinámica, la termodinámica, la mecánica de sólidos, mecánica estadística, aunque de ninguna manera son las únicas. Además, al igual que en muchas otras áreas, la computación se tomó gran parte del escenario, volviéndose quizás la herramienta más útil y usada en las investigaciones y avances en la comprensión de la biología celular.

Para modelar la fenomenología de los sistemas biológicos según las diferentes disciplinas científicas mencionadas se utiliza una cantidad de métodos computacionales, de los cuales quizás los más conocidos son la dinámica molecular (MD) en casos explícitos y el método de elementos finitos (FEM) en casos implícitos. Por supuesto y como todo en la vida, ambos tienen sus ventajas y desventajas; un punto en contra que tienen en común ambos tipos de modelación es que en general son lentos. Por esto es que ha empezado a tomar cada vez más fuerza el método de elementos de borde/frontera (BEM), que permite resolver problemas físicos comparativamente rápido a expensas de una formulación más compleja.

Es con miras a definir dicha formulación que se presenta este informe. El objetivo global corresponde a *definir un modelo que permita representar el comportamiento electrostático de una membrana celular, y la importancia de incluirla en modelaciones de interacciones celulares*. A través de esto se puede determinar si vale la pena considerar el aporte **electrostático** de una bicapa fosfolipídica en la energía de enlace de las proteínas de membrana celulares. Hay que tener presente que además existen otros fenómenos que no se consideran por la gran complejidad que conllevan; por ejemplo, la inversión de carga de la membrana, la onda mecánica consecuente (o causal), etc, ya que en algunos casos ni siquiera se entiende bien su naturaleza.

El presente texto busca entonces *presentar la física que ocurre tras una interacción electrostática en medios dieléctricos, trabajando un método que permita modelar una membrana celular a partir de un sistema de tres medios separados por dos interfaces, con cargas distribuidas en el medio encerrado*. Sumado a esto se presentan resúmenes de publicaciones relevantes para la línea de estudio pertinente a este escrito, y que incluso podrían servir para mejorar la precisión del modelo al representar de manera más fiel la física de las interacciones de interés, al sumar otro tipo de interacciones o fenómenos, o al plantear respuestas a interrogantes que pudieran surgir en un futuro.

En primer lugar se presenta una introducción a la teoría que permite trabajar los sistemas dieléctricos con interfaz de forma macroscópica y mediante el método de imágenes. Luego se

procede a introducir y replicar un método que resulta muy atractivo de modelar con BEM, pero en este caso se trabaja con diferencias finitas de primer orden; el objetivo es determinar un punto en que el error numérico sea suficientemente bajo como para considerarlo despreciable. Luego se presentan los resúmenes de publicaciones antes mencionados, para terminar con una serie de conclusiones y el trabajo que se busca desarrollar a partir de todo lo visto en este informe.

2 Marco Teórico

2.1 El campo eléctrico y el potencial eléctrico

El campo eléctrico correspondiente a una carga puntual q que se encuentra en el vacío en la posición \vec{x}_0 viene dado por la conocida ecuación

$$\vec{E}_{(\vec{x})} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\vec{x} - \vec{x}_0)}{|\vec{x} - \vec{x}_0|^3} \quad (1)$$

siendo ϵ_0 la permitividad macroscópica del vacío, una medida de cómo fluye el campo eléctrico en el vacío. Por supuesto, en el caso ejemplificado en la Ec. (1), no hay un medio que reaccione, por lo que $\epsilon = 0$ es nuestra referencia. De ahora en adelante se trabaja con ϵ propio de un dieléctrico; además se elabora más sobre la permitividad en la sección siguiente.

Cuando se cuenta con N cargas puntuales, la Ecuación (1) se convierte en una sumatoria sobre todos los elementos del sistema de cargas a considerar

$$\vec{E}_{(\vec{x})} = \sum_{i=1}^N \frac{q_i}{4\pi\epsilon} \frac{(\vec{x} - \vec{x}_i)}{|\vec{x} - \vec{x}_i|^3} \quad (2)$$

Para los casos en que nos encontramos con un medio continuo y en que tenemos una distribución de carga $\rho_{(\vec{x})}$ de algún tipo, nuestra sumatoria se vuelve una integral, pues $N \rightarrow \infty$.

$$\vec{E}_{(\vec{x})} = \int_V \frac{\rho_{(\vec{x}_0)}}{4\pi\epsilon} \frac{(\vec{x} - \vec{x}_0)}{|\vec{x} - \vec{x}_0|^3} dV \quad (3)$$

Si ahora consideramos el flujo del campo eléctrico a través de una superficie cerrada que rodee completamente al medio analizado, obtenemos

$$\int_{\partial V} \vec{E}_{(\vec{x})} \cdot d\vec{S} = \int_V \left(\int_{\partial V} \frac{\rho_{(\vec{x}_0)}}{4\pi\epsilon} \frac{(\vec{x} - \vec{x}_0)}{|\vec{x} - \vec{x}_0|^3} \cdot d\vec{S} \right) dV = \int_V \frac{\rho}{\epsilon} dV \quad (4)$$

Esta es la ley de Gauss en forma integral. Con el teorema de la divergencia aplicado a la Ec. (4) se llega a la ley de Gauss en forma diferencial:

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon} \quad (5)$$

Por otro lado, como el campo eléctrico es un campo vectorial irrotacional, se puede aplicar el teorema fundamental del cálculo para obtener su función potencial. Como $\vec{E}_{(\vec{x})}$ es una variable sólo de la diferencia de posiciones entre la de la carga y el punto de evaluación $|\vec{x} - \vec{x}_0|$ (función solo del radio), la integración es directa si la referencia para el potencial eléctrico se toma como 0 al infinito, quedando

$$\vec{E} = \nabla\phi \quad \rightarrow \quad \phi_{(\vec{x})} = - \int_{\infty}^{\vec{x}} \vec{E}_{(\vec{x})} d\vec{x} = - \int_{\infty}^{\vec{x}} \frac{q}{4\pi\epsilon} \frac{(\vec{x} - \vec{x}_0)}{|\vec{x} - \vec{x}_0|^3} = \frac{q}{4\pi\epsilon} \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_0|} \quad (6)$$

Esto es en los casos en que se tenga una carga puntual, como en el caso de la Ec. (1). Para una carga distribuida se debe considerar la Ec. (4), lo que nos lleva a

$$\phi_{(\vec{x})} = \int_V \frac{\rho_{(\vec{x}_0)}}{4\pi\epsilon} \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_0|} dV \quad (7)$$

En los casos en que el medio en el que está la carga q no sea el vacío, se debe considerar que la materia que lo compone si reaccionará al campo eléctrico asociado a q ; en estos casos, $\epsilon \neq \epsilon_0$. Es decir, hay que aclarar que las Ecs. (4) y (5) no están completas, pues falta considerar el efecto de la *polarización*. Además resulta interesante entender qué es realmente la permitividad, que esta relacionada directamente con la polarización del medio; a continuación explicaremos estos puntos.

2.2 La permitividad de un medio material, la polarización y el campo eléctrico microscópico

Se puede entender la constante dieléctrica de un material (o permitividad) como una medida del reordenamiento de las partículas de un medio a nivel molecular frente a la presencia de un campo eléctrico externo y provocando así que dichas partículas generen un *campo eléctrico inducido*, que es opuesto en sentido al original, pero no necesariamente de la misma intensidad; este disminuye el flujo neto del campo eléctrico externo, por lo que impide en cierta medida su paso, dando su nombre a la propiedad - en qué grado las moléculas del material **permiten** el flujo de campo eléctrico.

La permitividad que se utiliza en las Ecs. de la sección anterior es llamada también *constante dieléctrica* del medio, y en realidad es un concepto derivado de la susceptibilidad eléctrica y de lo que ocurre a nivel molecular en el medio dieléctrico afectado por un campo eléctrico. En el caso del vacío se dijo que no existe un medio que reaccione a la presencia de una carga (y por ende no “siente” el campo eléctrico), por lo que la constante dieléctrica del vacío es la referencia. Por el contrario, en un dieléctrico si se tiene una reacción al campo eléctrico; en este caso es importante explicar qué pasa con el campo eléctrico a nivel microscópico y cómo eso se relaciona con la susceptibilidad eléctrica. Los términos microscópico y local se utilizan indistintamente [3].

2.2.1 Campo eléctrico local, y polarización

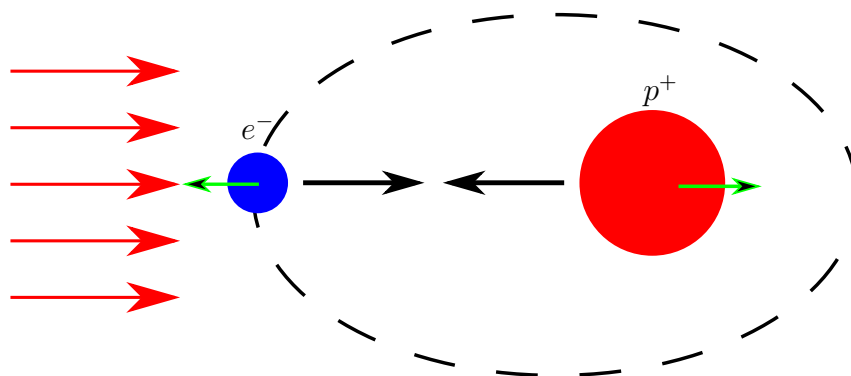


Figura 1: Efecto de un campo sobre la forma de un átomo. El electrón (en realidad la nube electrónica) es “jalado” por el campo, mientras que el protón es “empujado”, induciendo así un dipolo.

Cuando se aplica un campo eléctrico externo a un cuerpo o medio (macroscópico) dieléctrico, las partículas constituyentes de los átomos se comportan de forma especial. Por ejemplo, en

la Figura 1 se muestra un átomo simple de hidrógeno que se reordena bajo la acción de un campo externo que rompe el equilibrio eléctrico del átomo, generando así un campo eléctrico opuesto cuyas líneas de campo (inducido) van del protón hacia el electrón (se representa la nube electrónica con un solo electrón por simplicidad). Este efecto es la polarización, e induce un momento dipolar \vec{p} en los átomos afectados por el campo eléctrico a nivel local.

$$\vec{p} = \alpha \vec{E}^{loc} \quad (8)$$

α se conoce como la polarizabilidad microscópica, un coeficiente de proporcionalidad que representa qué tanto se polariza la especie analizada - la magnitud del momento dipolar inducido - en presencia de un cierto campo eléctrico local \vec{E}^{loc} . Por supuesto, esta es una relación constitutiva, porque α depende del material o elemento estudiado. Ahora hacemos la distinción entre los distintos campos eléctricos de interés para este apartado:

$$\begin{aligned} \vec{E}^{ext} &\longrightarrow \text{Campo eléctrico externo} \\ \vec{E}^{loc} &\longrightarrow \text{Campo eléctrico local} \\ \vec{E}^{ind} &\longrightarrow \text{Campo eléctrico inducido (microscópico)} \\ \vec{E} &\longrightarrow \text{Campo eléctrico macroscópico} \end{aligned}$$

y definimos la relación entre los tres como

$$\vec{E}^{loc} = \vec{E}^{ind} + \vec{E}^{ext} \quad (9)$$

Es conveniente explicar que si bien se define uno de los campos como microscópico o local, esto no es el campo debido a un único átomo o molécula, sino el propio de un volumen macroscópicamente pequeño pero microscópicamente grande; por lo tanto, los términos local y microscópico son en realidad promedios sobre volúmenes más pequeños que el campo de las ecuaciones de Maxwell. Hay que notar también que si el campo eléctrico se transmite por el vacío, $\vec{E}^{ind} = 0$ y por ende $\vec{E}^{ext} = \vec{E}^{loc} = \vec{E}$. No se entra en detalle respecto al álgebra pues existen referencias sobre el tema, como por ejemplo el texto de Kantorovich [3], pero después de algo de trabajo se llega a la expresión para el campo eléctrico local, también llamado campo de Lorentz, en función del campo macroscópico

$$\vec{E}^{loc} = \vec{E}(1 + \kappa) \quad (10)$$

donde κ es un factor de corrección que depende del ordenamiento microscópico. El campo eléctrico local es el campo que siente cada uno de los muchos volúmenes pequeños que, en conjunto, componen el medio macroscópico que estamos estudiando. Por último se presenta la definición de densidad de polarización \vec{P} para cerrar el círculo de relaciones entre el dieléctrico estudiado a nivel macroscópico y microscópico. La densidad de polarización por unidad de volumen se define de dos maneras; esto sale de diversas fuentes, pero W. Cai [4] lo resume todo de forma simple:

$$\vec{P}_{(\vec{x})} = \sum_i N_i \alpha_i \left[\vec{E}_{(\vec{x})}^{loc} \right]_i = \sum_i N_i \vec{p}_i \quad (11)$$

$$\vec{P}_{(\vec{x})} = \epsilon_0 \chi \vec{E}_{(\vec{x})} \quad (12)$$

con N_i la densidad numérica (*number density*) del i -ésimo átomo por unidad de volumen, y χ la susceptibilidad del medio dieléctrico (que en el caso del vacío es 0). Antes de continuar

el desarrollo, se procede a definir qué son la densidad de polarización y la susceptibilidad. Como concepto, la densidad de polarización es la polarización a nivel macroscópico, por unidad de volumen, debida a todos los momentos dipolares inducidos en las moléculas de dicho volumen asociados al campo eléctrico que los induce. Por otra parte, la susceptibilidad permite relacionar un campo eléctrico macroscópico con los efectos que este tiene en el momento dipolar de las partículas en un volumen a través de la densidad de polarización, como se indica en la Ec. (12); más allá de ser una constante de proporcionalidad, indica de forma promediada cómo influye el campo eléctrico en la orientación de los dipolos, y cómo varía el momentum dipolar del medio a nivel macroscópico en presencia del campo eléctrico. Hay que resaltar que esto no implica traslación o *migración* electrónica, sino solo rotación del átomo o molécula para la reorientación del dipolo, intentando alinearlos con el campo.

Para terminar esta parte del desarrollo teórico, de las Ecs. (10-12) y sabiendo que el campo macroscópico es el mismo, se puede deducir que

$$\vec{P}_{(\vec{x})} = \epsilon_0 \chi \vec{E}_{(\vec{x})} = \vec{E}_{(\vec{x})} \sum_i N_i \alpha_i (1 + \kappa_i) \implies \epsilon_0 \chi = \sum_i N_i \alpha_i (1 + \kappa_i) \quad (13)$$

Un caso particular es la teoría de Clausius-Mossotti, en cuyo caso el valor de $\kappa_i = \kappa$ es $\chi/3$; uno de los supuestos es que la distribución molecular es una malla cúbica regular.

Con esto se puede entender de manera general cómo se relacionan el campo eléctrico macroscópico y microscópico. El propósito de este apartado es simplemente aclarar que ambos análisis no son independientes y que el tratamiento de continuo que se dará en lo sucesivo esta fundamentado en teoría del comportamiento eléctrico molecular molecular; es por esto que se omiten pasos y sólo se presentan resultados que se consideran importantes.

2.2.2 Permitividad de un medio macroscópico

Ya se explicó qué son la susceptibilidad y densidad de polarización, por lo que se procede a definir un poco mejor qué es la permitividad, profundizando en lo que se mencionó en la Sección 2.2. Primero corresponde aclarar que la permitividad es netamente una propiedad macroscópica del medio, pero se prefiere caer en la redundancia un par de veces, como en el caso del título de esta sección, de manera de reafirmar este punto. Cuando un campo eléctrico afecta un medio dieléctrico, los dipolos no solo se intentan alinear con las líneas de campo, sino que además hay un movimiento de cargas libres dentro del cuerpo. Sumado a esto está el hecho de que los átomos conformantes del medio rompen el estado de equilibrio, pues los protones son repelidos por el campo, mientras que los electrones son atraídos por este (Fig. 2). Este efecto genera que se formen dipolos, y en consecuencia que haya un momento dipolar en el medio; es por esta razón que la susceptibilidad se relaciona con la permitividad. Teniendo presentes los fenómenos recién nombrados, se reitera la definición de permitividad o constante dieléctrica como una cuantificación macroscópica promedio de la tendencia de un medio (en este caso un dieléctrico) a oponerse al flujo de campo eléctrico por alguno de los mecanismos nombrados anteriormente.

Existen tres *permitividades* de interés para este desarrollo: la permitividad del vacío ϵ_0 , la permitividad propia de un material ϵ , y la permitividad relativa o constante dieléctrica, a

la que en este caso se da más importancia

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon}{\epsilon_0} = \epsilon_0(1 + \chi) \quad (14)$$

(llamada k en algunas fuentes). De ahora en adelante, ϵ a secas pasa a ser la permitividad relativa y se denomina simplemente *permitividad* o *constante dieléctrica* de un medio.¹

2.3 Desplazamiento eléctrico y campo eléctrico en un dieléctrico

En lo sucesivo, todo el trabajo es relativo a un medio o campo macroscópico. En este informe no se trabaja directamente con los momentos dipolares, la susceptibilidad, o incluso con la densidad de polarización, sino que se presenta una sola ecuación que engloba todos los efectos de un campo eléctrico sobre un dieléctrico; para llegar a dicha ecuación se utilizan las ecuaciones ya introducidas y un par de relaciones nuevas.

La Ec. (12) es una expresión que asocia el campo eléctrico y la densidad de polarización, establecida a través de la susceptibilidad y la permitividad. Además, de la Ec. (5) tenemos la ley de Gauss para una distribución de carga, que tiene que ver únicamente con la permitividad.

Si se asume que el flujo de campo eléctrico se debe a contribuciones de la distribución de carga y de la polarización del medio unicamente, entonces se puede expresar dicho flujo de campo eléctrico como

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho - \nabla \cdot \vec{P}}{\epsilon_0} \quad (15)$$

Se define entonces el *desplazamiento eléctrico* como

$$\vec{D} = \vec{E} + \vec{P} = \epsilon_0 \vec{E}(1 + \chi) \quad (16)$$

lo que nos permite escribir la Ec. (15) como

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho \quad (17)$$

Esto corresponde al efecto completo del flujo de campo eléctrico sobre el medio. En general se asocia el campo eléctrico \vec{E} a las cargas libres (free charges) y la densidad de polarización \vec{P} a las cargas fijas (bound charges), pero para el objetivo de este texto eso no es relevante.

Siguiendo con la idea, recordando que ahora $\epsilon_r = \epsilon$, suponiendo que la permitividad es una propiedad isotrópica y usando la Ec. (14) en la (16), podemos obtener

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} \quad \Big/ \quad \nabla \cdot \quad \rightarrow \quad \nabla \cdot \vec{D} = \nabla \cdot (\epsilon \vec{E}) = \nabla(\epsilon) \cdot \vec{E} + \epsilon \nabla \cdot \vec{E} = \rho \quad (18)$$

Aún más, si la permitividad del medio es constante sobre el mismo, entonces el término $\nabla(\epsilon) \cdot \vec{E}$ se anula.

¹En estricto rigor, la constante dieléctrica es $\epsilon_r \cdot \epsilon_0$, pero por costumbre se utiliza este término para la propiedad adimensional en este informe.

Es así que recuperamos la ecuación de la que prácticamente parte el desarrollo de la teoría, la ley de Gauss.

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon} \quad (19)$$

El gran progreso es haber demostrado que no solo sirve para calcular el campo eléctrico en el vacío, sino que se puede aplicar a los dieléctricos en general y que incluso se consideran los efectos de polarización inducidos.

2.4 Método de imágenes

En la teoría electrostática hay ocasiones en que hay que trabajar con interfaces que separan distintos medios dieléctricos. El método de imágenes destaca por su simpleza en este tipo de escenarios. La idea es que cargas en un medio inducirán un campo opuesto en el otro, el denominado campo de reacción. A su vez este campo inducido afectará al campo en el primer medio, por lo que hay que encontrar una expresión para el comportamiento de los campos eléctricos en los dos medios; por supuesto, este problema no se soluciona simplemente con aplicar la Ec. (1).

El método de imágenes facilita la resolución del problema de una forma simple: En vez de considerar la polarización y el consecuente campo inducido por el segundo medio como un todo, se hace más fácil poner una carga o distribución de cargas imágenes (puede ser incluso una distribución continua) de tal forma que el efecto de dicha carga sobre el primer medio sea el mismo que si hubiera un campo de reacción. Para esto uno analiza los distintos medios por separado en vez de como un sistema.

Como la interfaz es un límite para el espacio de análisis, es aquí donde se analizan las condiciones de frontera. Para un sistema de coordenadas adecuado al problema, existen condiciones para la componente normal del campo y para su componente tangencial justo en la interfaz. Matemáticamente esto es

$$\epsilon_1 \vec{E}_1 \cdot \vec{n} = \epsilon_2 \vec{E}_2 \cdot \vec{n} \quad (20)$$

$$\vec{E}_1 \cdot \vec{t} = \vec{E}_2 \cdot \vec{t} \quad (21)$$

En este caso, \vec{n} es un vector normal a la superficie interfaz, y \vec{t} un vector tangencial a la misma. En palabras, las Ecs. (20) y (21) nos indican que hay un salto en la componente normal del campo eléctrico igual a ϵ_1/ϵ_2 , pero hay continuidad en su componente tangencial. Como ejemplo se tiene el caso más simple, con dos dieléctricos homogéneos isotrópicos ($\epsilon = cte$) en la Fig. 3. La idea es determinar qué valor tiene que tener la o las cargas imagen necesarias, que pueden ser continuas o discretas, en función de los parámetros que si se conocen en el sistema. En el caso particular de que la interfaz sea una placa cargada de espesor infinitesimal y los medios a analizar tengan la misma constante dieléctrica, se llega al resultado elemental de un salto en la componente normal del campo eléctrico dado por

$$(\vec{E}_2 - \vec{E}_1) \cdot \vec{n} = \frac{\sigma}{\epsilon_m} \quad (22)$$

con σ la densidad superficial de carga y ϵ_m la constante dieléctrica de los medios que rodean al plano.

Se desarrolla más a cavallidad el tema en lo sucesivo, ya que forma parte del problema clave que motiva este escrito. Se presenta un desarrollo del caso planteado con el sistema de ecuaciones, y se analiza un sistema con dos interfaces paralelas, todo mediante el método de imágenes.

3 Modelo de un sistema de tres medios dieléctricos con dos interfaces

La presente sección se basa fundamentalmente en el desarrollo visto en la publicación de Yang, Liaw y Limn [5] y en reproducir sus resultados para determinar un par de parámetros y si efectivamente resulta viable, con miras a trabajos futuros.

En este paper se presenta un método basado en el método de cargas imagen aplicado a sistemas rectangulares con más de una interfaz, denominado método RIC - Rectangular Image Charge. Un sistema de una interfaz planar infinita tiene una solución analítica para el caso de una carga puntual, pero si se considera el caso de un sistema con dos interfaces planares paralelas y una carga puntual en el medio dieléctrico encerrado, el problema se complica. La solución de hecho se convierte en una sumatoria infinita porque el campo causado por la polarización de un medio polariza en cierto grado a los otros, y a su vez dicha polarización induce una reacción en el primer medio. Esta cadena de inducciones de campo eléctrico es infinita, similar al efecto que se produce cuando se miran dos espejos opuestos. Pasando al lado más matemático, se presenta en primera instancia el caso con una interfaz y luego con dos interfaces paralelas.

3.1 Campo de reacción en un sistema con una interfaz y una carga puntual

En primer lugar se tiene un caso simple, presente en la mayoría de los libros de electrodinámica, que consiste en una carga en un medio 1 y una interfaz que separa a este último de un medio 2; el caso en cuestión se presenta en la Figura 4. El campo eléctrico viene dado por la Ec. (2), y tiene como condiciones de contorno las presentadas en las Ecs. (20) y (21). El potencial en algún punto P en el medio 1 viene dado por el potencial de una carga q real y la carga imagen q_1 , que representa el campo de reacción del medio 2 a causa de q . Además el potencial en el medio 2 ya no es debido únicamente a la carga q , pues el medio dieléctrico reacciona; esto se representa por una nueva carga imagen q_2 .

No es complejo realizar el desarrollo, remplazando la expresión para el campo en las condiciones de contorno. Con un poco de álgebra se puede llegar a una forma de escribir las cargas q_1 y q_2 en función de la carga q , así como de las permitividades de los medios. Se muestra a continuación un paso a paso breve de cómo se resuelve el sistema. Si ϕ_1 es el potencial para

algún punto en el medio 1, y ϕ_2 es el potencial en el medio 2, se tiene

$$\phi_1 = \frac{1}{4\pi\epsilon_1} \left(\frac{q}{\sqrt{r^2 + (z-d)^2}} + \frac{q_1}{\sqrt{r^2 + (z+d)^2}} \right) \quad (23)$$

$$\phi_2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_2} \left(\frac{q_2}{\sqrt{r^2 + (z-d)^2}} \right) \quad (24)$$

Derivando estas expresiones y remplazándolas en la condición de contorno (20) se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones 2x2

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial z} \left[\epsilon_1 \cdot \left(\frac{q}{4\pi\epsilon_1} \frac{1}{\sqrt{r^2 + (z-d)^2}} + \frac{q_1}{4\pi\epsilon_1} \frac{1}{\sqrt{r^2 + (z+d)^2}} \right) \right]_{z=0} = \\ & \frac{\partial}{\partial z} \left[\epsilon_2 \cdot \left(\frac{q_2}{4\pi\epsilon_2} \frac{1}{\sqrt{r^2 + (z-d)^2}} \right) \right]_{z=0} \\ \Rightarrow & d \cdot \left(\frac{q}{\sqrt{(r^2 + (-d)^2)^3}} - \frac{q_1}{\sqrt{(r^2 + d^2)^3}} \right) = d \cdot \left(\frac{q_2}{\sqrt{(r^2 + (-d)^2)^3}} \right) \\ \Rightarrow & q - q_1 = q_2 \end{aligned} \quad (25)$$

Para el caso de la condición de contorno (21) se remplazan también las expresiones de $\partial_r \phi_1$ y $\partial_r \phi_2$, pero en este caso no se simplifican las permitividades, por lo que se llega a una expresión que las incluye:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{q}{4\pi\epsilon_1} \frac{1}{\sqrt{r^2 + (z-d)^2}} + \frac{q_1}{4\pi\epsilon_1} \frac{1}{\sqrt{r^2 + (z+d)^2}} \right)_{z=0} = \\ & \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{q_2}{4\pi\epsilon_2} \frac{1}{\sqrt{r^2 + (z-d)^2}} \right)_{z=0} \\ \Rightarrow & \frac{r}{\epsilon_1} \cdot \left(\frac{q}{\sqrt{(r^2 + (-d)^2)^3}} + \frac{q_1}{\sqrt{(r^2 + d^2)^3}} \right) = \frac{r}{\epsilon_2} \cdot \left(\frac{q_2}{\sqrt{(r^2 + (-d)^2)^3}} \right) \\ \Rightarrow & \frac{1}{\epsilon_1} (q + q_1) = \frac{q_2}{\epsilon_2} \end{aligned} \quad (26)$$

Ahora, del sistema que conforman las Ecs. (25) y (26), se obtiene la expresión para las cargas imagen en función de los parámetros conocidos del sistema:

$$q_1 = - \left(\frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2 + \epsilon_1} \right) \cdot q \quad (27)$$

$$q_2 = \left(\frac{2\epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \right) \cdot q \quad (28)$$

Luego, el potencial en cualquier punto en el espacio se trabaja dependiendo de en qué medio se ubica dicho punto, y para calcular su valor se utilizan las Ecs. (23) y (24) dependiendo de dónde se encuentra; por supuesto, esto remplazando los valores de q_1 y q_2 por los de las Ecs. (27) y (28).

3.2 Sistema con dos interfaces paralelas y cargas en el medio

En este caso se complica la explicación y por ende la expresión matemática que representa al sistema. Si se tienen tres medios dieléctricos, y la carga puntual se ubica en el segundo - el primero y el tercero encierran al segundo - entonces ocurre que si la carga polariza al medio 3, este y la carga puntual generan un campo de reacción en el medio 1, el cual induce una reacción en el medio 3 que se debe considerar junto con la inicialmente producida por la carga puntual. Este efecto sigue infinitamente, y a nivel estático corresponde a una sumatoria infinita de los efectos que tienen todas las reacciones generadas por la carga sobre todos los dieléctricos afectados. Para visualizarlo de mejor forma, una gran analogía es imaginarse lo que ocurre al pararse entre dos espejos paralelos y mirar ortogonalmente hacia uno de ellos.

La fórmula matemática como tal que representa dicho sistema, para medios 1 y 3 con la misma constante dieléctrica ϵ_1 , es [5]

$$\phi(\vec{x}) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \frac{q_i}{4\pi\epsilon_2|\vec{x} - \vec{x}_i|} \quad (29)$$

donde

$$q_i = q \left(\frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \right)^{|i|} \quad x_i = (-1)^i x_0 + i \cdot a$$

Considerar un número mayor de cargas (N) simplemente implica sumar sobre ellas y considerando el potencial debido a la interacción entre ellas, pues la sumatoria entre $-\infty$ e ∞ da cuenta del campo de reacción, haciendo que la Ec. (29) quede

$$\phi(\vec{x}) = \sum_{j=1}^N \frac{q_j}{4\pi\epsilon_2|\vec{x} - \vec{x}_j|} + \sum_{j=1}^N \sum_{i=-\infty}^{\infty} \frac{q_{j,i}}{4\pi\epsilon_2|\vec{x} - \vec{x}_{j,i}|} \quad ; \quad \vec{x} \neq \vec{x}_j \quad ; \quad \vec{x} \neq \vec{x}_{j,i} \quad (30)$$

En este caso, $\vec{x}_{j,i}$ corresponde a la posición de la i -ésima imagen de la j -ésima carga del arreglo de cargas. Así también se define $q_{j,i}$ como la i -ésima imagen de la j -ésima carga del arreglo. El primer término es el potencial en algún punto debido a las cargas, que debería resultar familiar. El segundo término corresponde al efecto del campo de reacción a causa del conjunto de cargas.

4 Continuación de trabajo

Teniendo ya definida la temática y la materia cubierta en este informe, lo que queda es hacer uso de la teoría de una forma útil y eficiente. En la sección introductoria se mencionó el método de elementos de borde BEM. Pues bien, para dar continuidad a esta línea de investigación se busca implementar dicho método a un sistema como el visto en el apartado 3.

El objetivo ideal que se plantea es establecer una forma de modelar computacionalmente una representación de una proteína sometida a interacciones electrostáticas mientras está inserta en la membrana, y en caso de ser posible

Además, hay otros puntos de investigación, como simular una o un sistema de cargas fuera de la membrana, lo que permitiría expandir

Referencias

- [1] Jackson, J. D. *Classical Electrodynamics*, Third Edition; Wiley, 1998
- [2] Griffiths, D. J. *Introduction to Electrodynamics*, Third Edition; Prentice Hall, 1999
- [3] Kantorovich, L. *Quantum Theory of the Solid State: An Introduction*, First Edition, Ch. 8; Springer, 2004
- [4] Cai, W. *Computational Methods for Electromagnetic Phenomena*, First Edition, Ch. 1, 2; Cambridge University Press, 2013
- [5] Yang, P.; Liaw, S.; Lim, C. *Representing an Infinite Solvent System with a Rectangular Finite System Using Image Charges*, J. Phys. Chem. B 2002, 106, 2973-2982