



UNIVERSIDAD DE SONORA
Departamento de Física

DESARROLLO EXPERIMENTAL II
EXPLORACIÓN DE SISTEMAS CONFINADOS
Por WyL Alberto Félix Guillen

1. Introducción

La estructura de los sistemas moleculares en bulto está fuertemente determinada por las interacciones entre las partículas constituyentes del mismo. Para el caso de los sistemas fluidos, las interacciones repulsivas de corto alcance son sustanciales, y estudios con simulaciones computacionales se han utilizado para mostrar que estas interacciones repulsivas de corto alcance pueden modelarse como de núcleo duro (esferas o discos duros). Para modelar un líquido, sin embargo, se requiere el concurso de una componente atractiva como parte del potencial de interacción entre las partículas del sistema.

Cuando los sistemas moleculares se encuentran en condiciones de confinamiento, es decir, en presencia de paredes que delimitan su entorno, la homogeneidad del sistema se ve trastocada por la presencia de estas paredes o campos de confinamiento (campos externos) y el sistema de partículas responde reestructurándose también de acuerdo a esta interacción externa, es decir, se manifiesta la inhomogeneidad del mismo. La forma en la que se estructura un fluido inhomogéneo es entonces el producto configuracional de la competencia entre las interacciones entre las partículas y la interacción externa. Es importante señalar que el confinamiento es solamente una de las formas de generar sistemas inhomogéneos.

El objetivo de este proyecto es explorar las propiedades estructurales y de autodifusión de sistemas inhomogéneos, mediante la simulación con Dinámica Browniana de sistemas bidimensionales confinados entre dos paredes planas, para el potenciales de interacción entre partículas $u(r)$ y pared-partícula $\phi(r)$ tipo Yukawa. Específicamente nos interesa observar el comportamiento de las funciones de distribución $g(y^*)$ y los perfiles de concentración $\rho(x^*)$ perpendiculares a las paredes. Así mismo, el desplazamiento cuadrático medio paralelo $W_y(t^*)$ y perpendicular $W_x(t^*)$ y sus correspondientes coeficientes de difusión dependientes del tiempo.

2. Contexto

Para el caso de sistemas en bulto (homogéneos) hemos planteado como propiedad estructural importante a la función de distribución radial $g(r^*)$, que pertenece a las funciones de distribución de dos partículas dentro de la física estadística, y que nos proporciona información sobre la forma en que se estructuran en promedio las partículas entre sí:

$$g(r^*) \equiv \frac{N(r^*)}{N_{gi}(r^*)}. \quad (2.1)$$

Similarmente, podemos preguntarnos sobre la forma en que las partículas se estructuran en promedio en alguna dirección preferencial, es por ello que para los sistemas confinados como los que se plantean en este proyecto (figura 1), será interesante observar la forma en que se estructuran las partículas en la dirección no-confinada y que en **este protocolo es la dirección y** . En este caso y de forma similar a la ecuación (2.1) la definiremos de la siguiente forma:

$$g(y^*) \equiv \frac{N(y^*)}{N_{gi}(y^*)}. \quad (2.2)$$

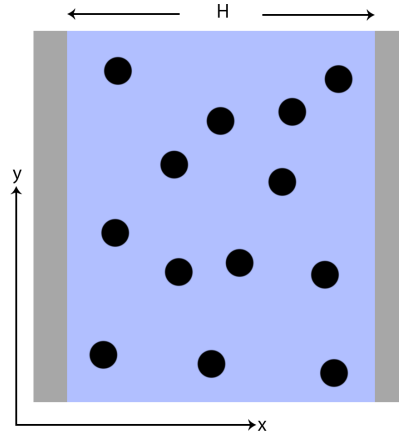


Figura 1: Sistema confinado entre placas.

Cómo puede observarse en la literatura, la propiedad más estudiada en el caso de fluidos inhomogéneos es sin duda alguna el perfil de concentración en la dirección perpendicular a las paredes confinantes, que, en nuestro caso, corresponderá a la dirección horizontal x . Desde el contexto de la física estadística, esta propiedad corresponde a la familia de las funciones de distribución de una partícula, es decir, responde a la pregunta sobre cómo se distribuyen en promedio las partículas respecto a las paredes.

Nos interesa abordar en este proyecto el cálculo del perfil de concentración $\rho(x^*)$ que definiremos cómo:

$$\rho(x^*) \equiv \frac{N(x^*)}{N_{gi}(x^*)}. \quad (2.3)$$

3. Sistema Modelo

- I) **Interacción entre partículas $u(\mathbf{r})$** . En este proyecto se explorarán las propiedades estructurales de discos de Yukawa (YD, Yukawa Disk):

$$u(r) = A \frac{e^{-\kappa(r-\sigma)}}{r}. \quad (3.4)$$

- II) **Interacción pared-partícula $\phi(\mathbf{x})$** . Asumiremos que las paredes confinantes son tipo Yukawa (YW, Yukawa Wall):

$$\phi(x) = A_1 e^{-\kappa(\frac{H}{2}+x)} + A_2 e^{-\kappa(\frac{H}{2}-x)}, \quad (3.5)$$

con

$$-\frac{H}{2} < x < \frac{H}{2}, \quad (3.6)$$

donde colocado el origen de coordenadas en el centro entre las paredes planas, así mismo asumimos que las partículas solamente pueden encontrarse entre las dos paredes.

Luego entonces, observe que se incorpora al estudio realizado previamente de un sistema de partículas de Yukawa en bulto, los parámetros del potencial de interacción A_1 , A_2 y H del confinamiento. Supondremos que el parámetro de apantallamiento κ es el mismo para ambos modelos de interacción (partícula-partícula y pared-partícula).

4. Reducción de variables

Interacción partícula-partícula. El potencial de Yukawa puede escribirse en la forma

$$u(r) = A \frac{\exp[-\kappa(r - \sigma)]}{r}, \quad (4.7)$$

para $r > \sigma$, con r la distancia entre cada par de partículas y σ su diámetro. Como es usual, procederemos a realizar la reducción del potencial $u(r)$ para utilizarlo en la simulación. Reescribiendo el potencial

$$\begin{aligned} u(r) &= A \frac{\exp[-\kappa(r - \sigma)]}{r}, \\ &= A \frac{\exp[-\kappa\sigma(\frac{r}{\sigma} - 1)]}{r}, \\ &= \frac{A}{\sigma} \frac{\exp[-\kappa\sigma(\frac{r}{\sigma} - 1)]}{\frac{r}{\sigma}}, \\ &= \frac{A}{\sigma} \frac{\exp(\kappa\sigma) \exp[-\kappa\sigma(\frac{r}{\sigma})]}{\frac{r}{\sigma}}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

multiplicando por β

$$u^*(r^*) = A^* \frac{\exp(-\kappa^* r^*)}{r^*}, \quad (4.9)$$

donde

$$u^*(r^*) = \beta u(r^*), \quad (4.10)$$

$$A^* = \frac{\beta A \exp(\kappa\sigma)}{\sigma}, \quad (4.11)$$

$$r^* = \frac{r}{\sigma}, \quad (4.12)$$

$$\kappa^* = \kappa\sigma. \quad (4.13)$$

El potencial reducido $u^*(r^*)$, como ya se había anticipado, será el que implementaremos en el código.

Interacción pared-partícula. El potencial de interacción pared-partícula es

$$\phi(x) = A_1 e^{-\kappa(\frac{H}{2} + x)} + A_2 e^{-\kappa(\frac{H}{2} - x)}. \quad (4.14)$$

Reescribiendo el potencial:

$$\begin{aligned} \phi(x) &= A_1 \exp\left[-\kappa\left(\frac{H}{2} + x\right)\right] + A_2 \exp\left[-\kappa\left(\frac{H}{2} - x\right)\right], \\ &= A_1 \exp\left[-\kappa\sigma\left(\frac{1}{2}\frac{H}{\sigma} + \frac{x}{\sigma}\right)\right] + A_2 \exp\left[-\kappa\sigma\left(\frac{1}{2}\frac{H}{\sigma} - \frac{x}{\sigma}\right)\right], \\ &= A_1 \exp\left[-\kappa^*\left(\frac{H^*}{2} + x^*\right)\right] + A_2 \exp\left[-\kappa^*\left(\frac{H^*}{2} - x^*\right)\right], \end{aligned} \quad (4.15)$$

multiplicando por β

$$\phi^*(x^*) = A_1^* \exp(-\kappa^* x^*) + A_2^* \exp(\kappa^* x^*), \quad (4.16)$$

donde

$$\phi^*(x^*) = \beta\phi(x^*), \quad (4.17)$$

$$A_1^* = \beta A_1 \exp\left(-\frac{\kappa^* H^*}{2}\right), \quad (4.18)$$

$$A_2^* = \beta A_2 \exp\left(-\frac{\kappa^* H^*}{2}\right), \quad (4.19)$$

$$\kappa^* = \kappa\sigma, \quad (4.20)$$

$$H^* = \frac{H}{\sigma}, \quad (4.21)$$

$$x^* = \frac{x}{\sigma}. \quad (4.22)$$

La fuerza, ya reducida, que ejercen las paredes sobre cada partícula es

$$F^* = -\frac{d\phi^*(x^*)}{dx^*}. \quad (4.23)$$

Usando (4.16)

$$F^* = \kappa^* [A_1^* \exp(-\kappa^* x^*) - A_2^* \exp(\kappa^* x^*)]. \quad (4.24)$$

Esta expresión será utilizada en el código, específicamente en la subrutina **SUB_Fuerzas**.

5. Exploración 1

En esta primera exploración de sistemas con confinamiento se exploran tres sistemas con todos los valores de los parámetros iguales excepto la fracción en volumen ϕ y su tiempo de paso DT correspondiente. Se incluyen las gráficas de termalización, la función de distribución vertical $g(y^*)$, perfil de concentración $\rho(x^*)$ y propiedades de autodifusión en cada una de las dos direcciones, X y Y. Finalmente se comparan los resultados gráficamente.

5.1. Parámetros de simulación

En la tabla 1 se muestran los datos de simulación elegidos.

Parámetros de la simulación	
Número de partículas (N)	216
Configuraciones totales (NSTEP)	100000
Configuración de equilibrio (NENER)	80000
Frecuencia de muestreo (NFREC)	2
Frecuencia de muestreo (NFREC2)	2
Tamaño del ensemble (NN2)	10000
Intensidad del potencial de partículas (A)	500
Parámetro de apantallamiento (ZK)	0.149
Intensidad del potencial de pared-partícula (A1)	500
Intensidad del potencial de pared-partícula (A2)	500
Valor del ancho (HSTAR)	100

Tabla 1

Para

1. $\phi = 0,0005$ y $DT = 0,005$,
2. $\phi = 0,0007$ y $DT = 0,007$,
3. $\phi = 0,0009$ y $DT = 0,009$.

La selección de los valores de los parámetros de simulación estuvo basada en la experiencia de haber hecho muchas pruebas.

5.2. Termalización

En la figura 2(a) se muestra la curva de termalización para el caso 1, mientras que en la figura 2(b) el caso 2. Por otra parte, en la figura 3(a) se muestra la curva de termalización para el caso 3. Finalmente, en la figura 3(b) se muestra la comparación entre los casos anteriores.

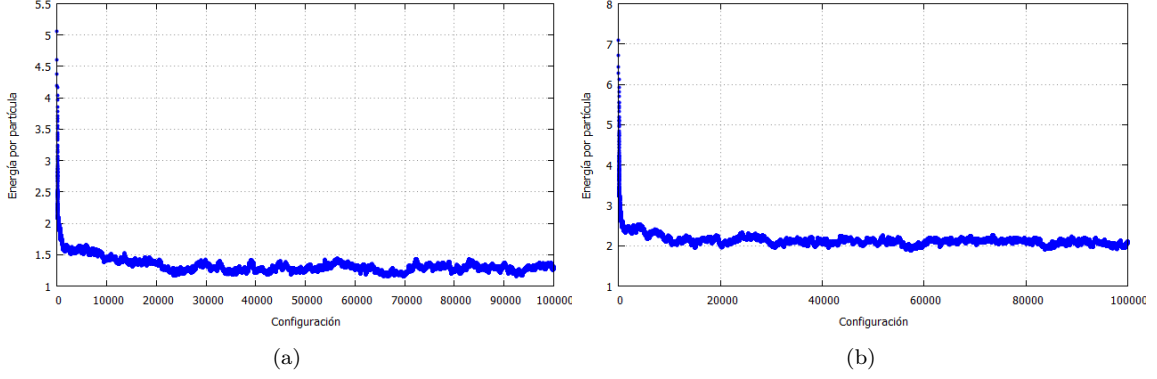


Figura 2

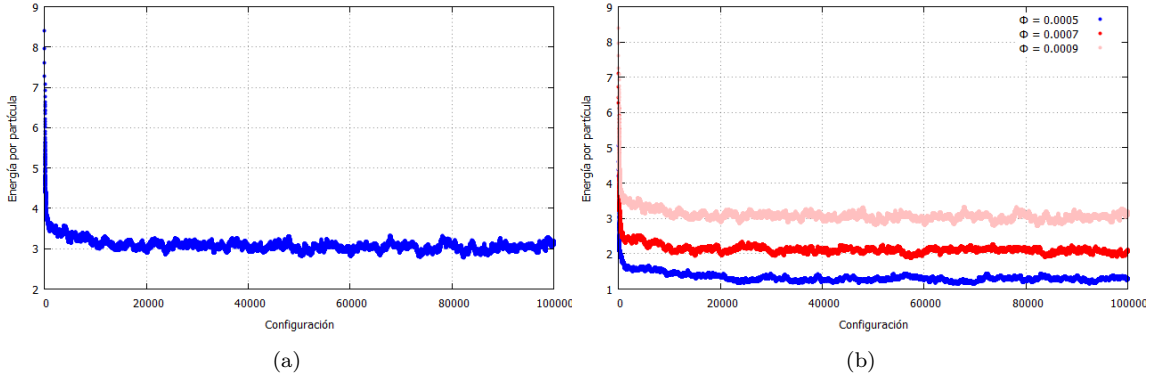


Figura 3

Observaciones: En los tres casos la energía termaliza relativamente rápido, sin embargo, su fluctuación alrededor de algún valor no es tan suave. En la figura 3(b) se observa que cuanto mayor sea la concentración en volumen, mayor es la energía por partícula.

5.3. Función de distribución vertical $g(y^*)$

En la figura 4(a) se muestra la $g(y^*)$ para el caso 1, mientras que en la figura 4(b) el caso 2. Por otra parte, en la figura 5(a) se muestra la $g(y^*)$ para el caso 3. Finalmente, en la figura 5(b) se muestra la comparación entre los casos anteriores.

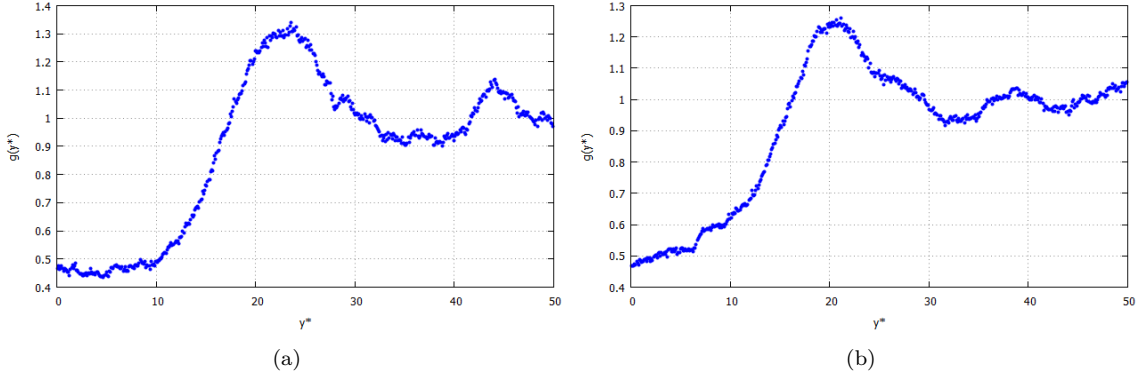


Figura 4

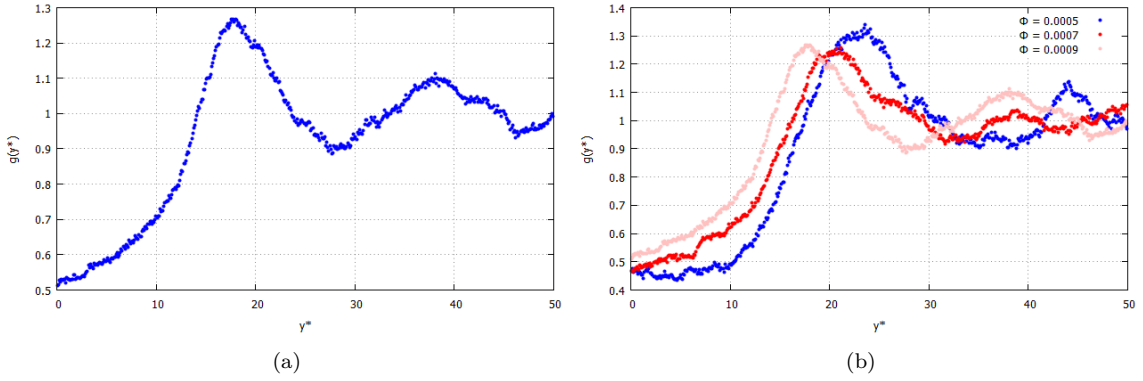


Figura 5

Observaciones: en las cuatro gráficas el eje horizontal está truncado hasta el valor de $HSTAR/2$, que en este caso es 50. La primera observación importante es que en todos los casos la $g(y^*)$ no inicia en cero. En la figura 5(b) se observa que la altura de los picos más pronunciados son ligeramente similares, además que están desplazados unos de otros; cuanto mayor es la fracción en volumen más hacia la izquierda se desplaza el pico más pronunciado, lo cual es consistente con lo que esperamos.

5.4. Perfil de concentración $\rho(x^*)$

En la figura 6(a) se muestra el perfil de concentración $\rho(x^*)$ para el caso 1, mientras que en la figura 6(b) el caso 2. Por otra parte, en la figura 7(a) se muestra el perfil de concentración $\rho(x^*)$ para el caso 3. Finalmente, en la figura 7(b) se muestra la comparación entre los casos anteriores.

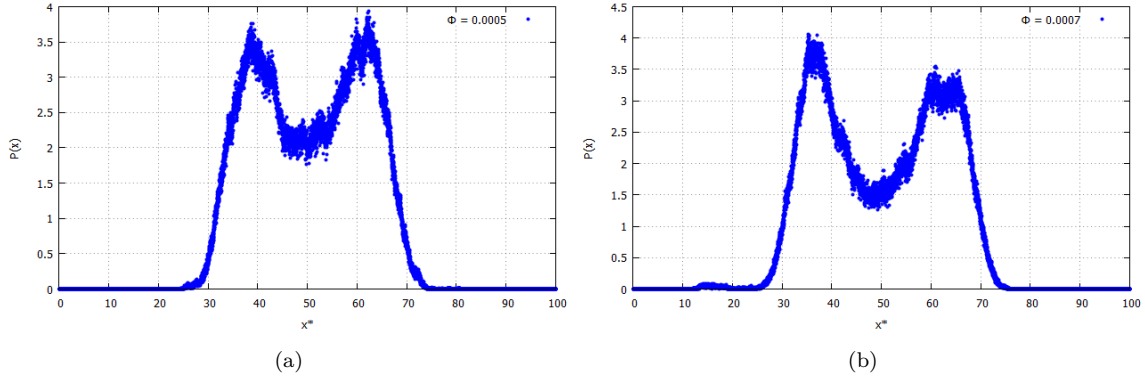


Figura 6

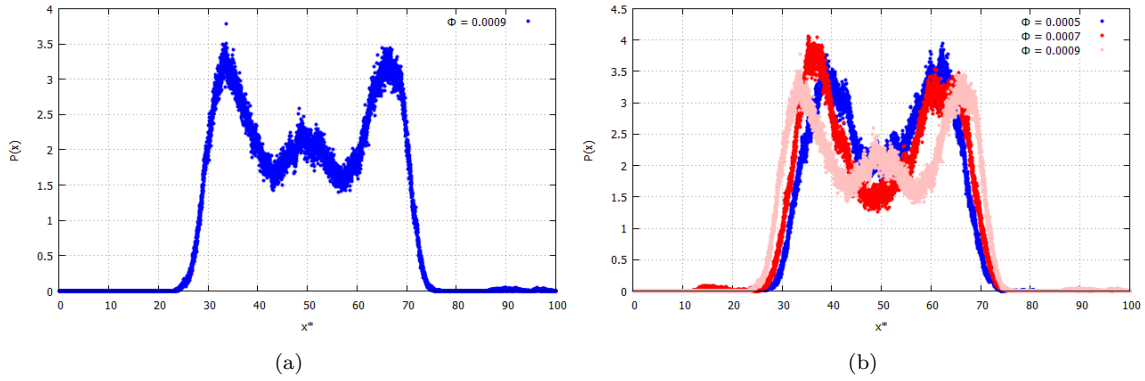


Figura 7

Observaciones: En los casos 1 y 2 el número de picos es dos; en el caso 1 más simétrico que en el caso 2, ambos son relativamente simétricos respecto al centro de la celda (en el eje horizontal). En el caso 3 comienza a formarse un tercer pico como consecuencia de aumentar la fracción en volumen. En términos de las configuraciones finales, en el caso 1 y 2 las partículas se arreglan alrededor de dos columnas; tres columnas en el caso 3.

De la figura 7(b) concluimos que cuanto más alta es la fracción en volumen, más ancho es el perfil de concentración.

5.5. Desplazamiento cuadrático medio en Y

En la figura 8(a) se muestra el desplazamiento cuadrático en Y para el caso 1, mientras que en la figura 8(b) el caso 2. Por otra parte, en la figura 9(a) se muestra el desplazamiento cuadrático en Y para el caso 3. Finalmente, en la figura 9(b) se muestra la comparación entre los casos anteriores.

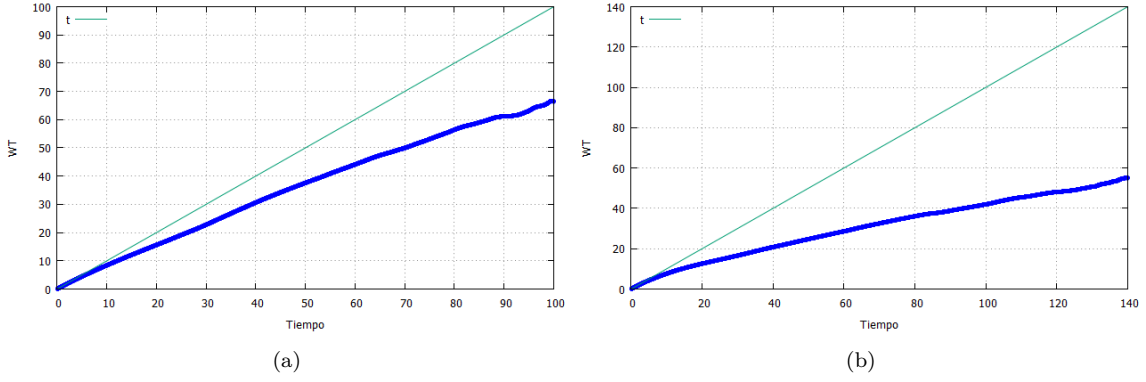


Figura 8

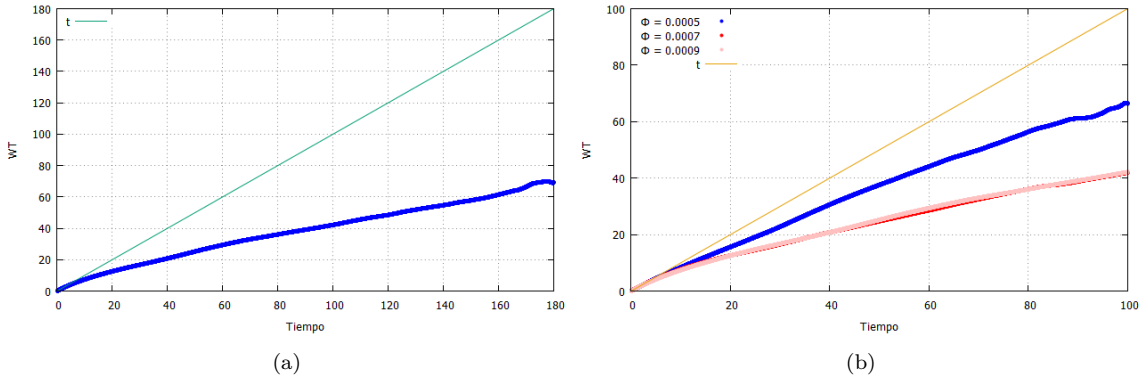


Figura 9

Observaciones: El comportamiento general de los tres casos es el esperado; para tiempos pequeños el desplazamiento cuadrático medio tiene un comportamiento lineal (e igual a la identidad), mientras que para tiempos mayores se aleja de ésta. Se observa, además, que en el caso 1 el desplazamiento cuadrático medio está más próximo a la recta que los otros dos casos. En la figura 9 se aprecia que para el caso 2 y 3 los resultados coinciden, lo cual resulta bastante interesante.

5.6. Coeficiente de difusión en Y

En la figura 10(a) se muestra el coeficiente de difusión en Y para el caso 1, mientras que en la figura 10(b) el caso 2. Por otra parte, en la figura 11(a) se muestra el coeficiente de difusión en Y para el caso 3. Finalmente, en la figura 11(b) se muestra la comparación entre los casos anteriores.

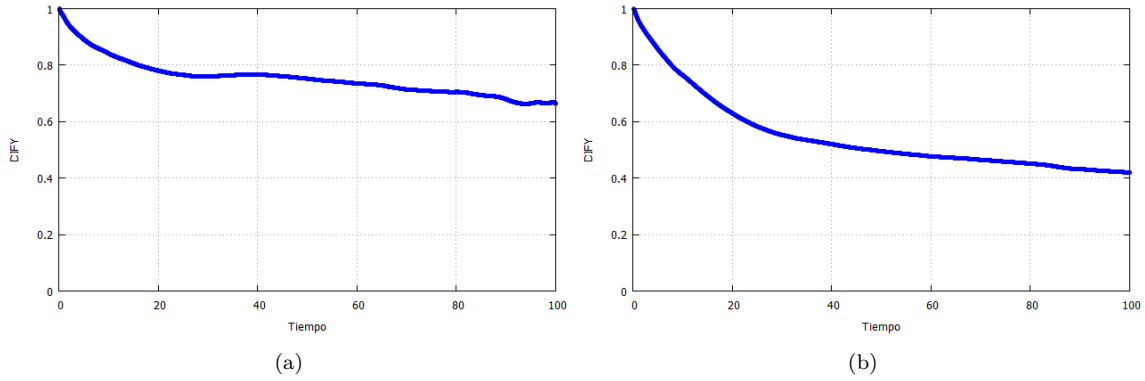


Figura 10

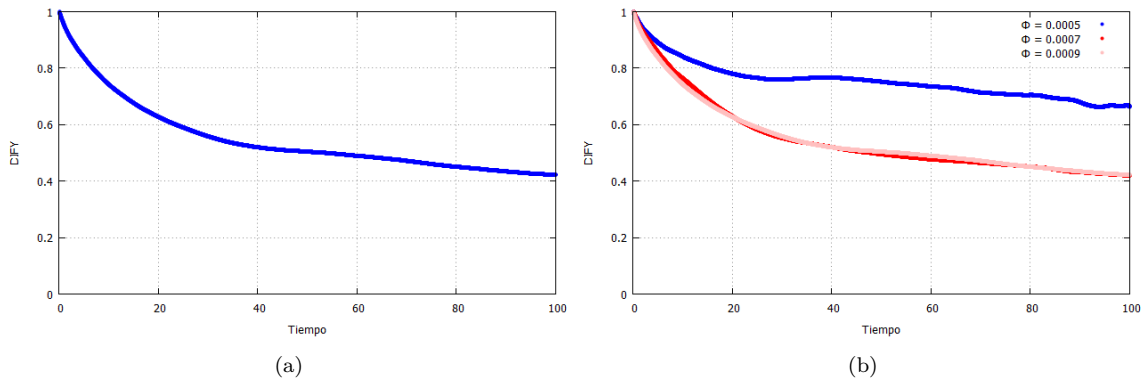


Figura 11

Observaciones: El comportamiento general del coeficiente de difusión en los tres casos es el esperado; comienza en uno y disminuye cuando el tiempo aumenta. En la figura 11 se aprecia que en los casos más concentrados el coeficiente de difusión es menor que en los menos concentrados, lo cual es consistente con nuestra visión intuitiva del sistema; las partículas tienen menos espacio donde moverse.

5.7. Desplazamiento cuadrático medio en X

En la figura 12(a) se muestra el desplazamiento cuadrático en X para el caso 1, mientras que en la figura 12(b) el caso 2. Por otra parte, en la figura 13(a) se muestra el desplazamiento cuadrático en X para el caso 3. Finalmente, en la figura 13(b) se muestra la comparación entre los casos anteriores.

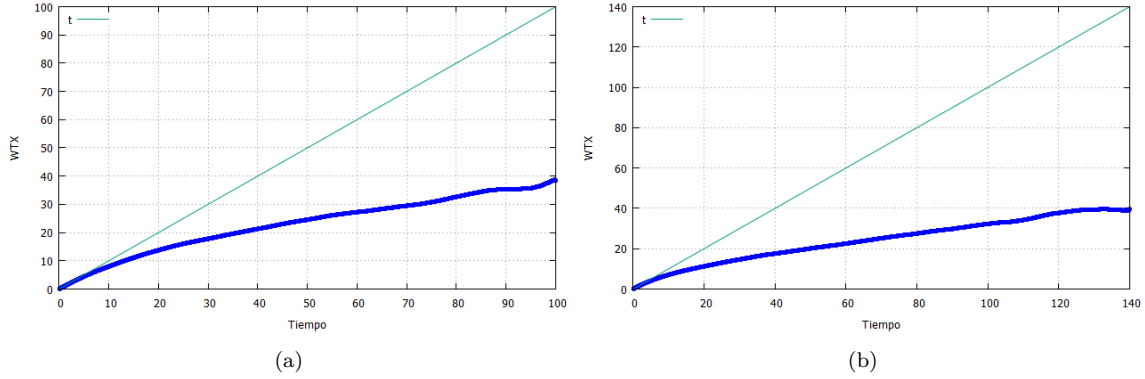


Figura 12

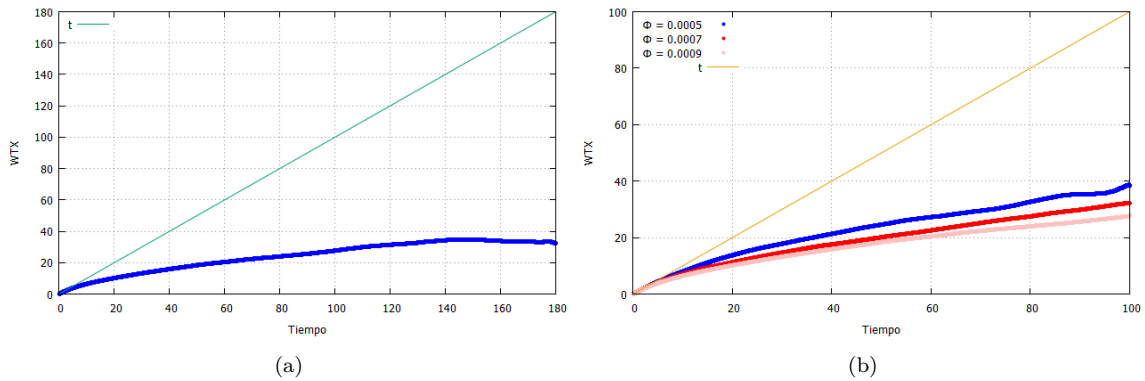


Figura 13

Observaciones: el comportamiento general es similar al comportamiento a lo largo del eje Y, sin embargo, aquí si apreciamos que los tres casos difieren, tal como se muestra en la figura 13(b); cuanto mayor es la fracción en volumen menor es el desplazamiento cuadrático medio. Aquí sí son apreciables las diferencias porque en este eje es donde están las paredes confinantes.

5.8. Coeficiente de difusión en X

En la figura 14(a) se muestra el coeficiente de difusión en X para el caso 1, mientras que en la figura 14(b) el caso 2. Por otra parte, en la figura 15(a) se muestra el coeficiente de difusión en X para el caso 3. Finalmente, en la figura 15(b) se muestra la comparación entre los casos anteriores.

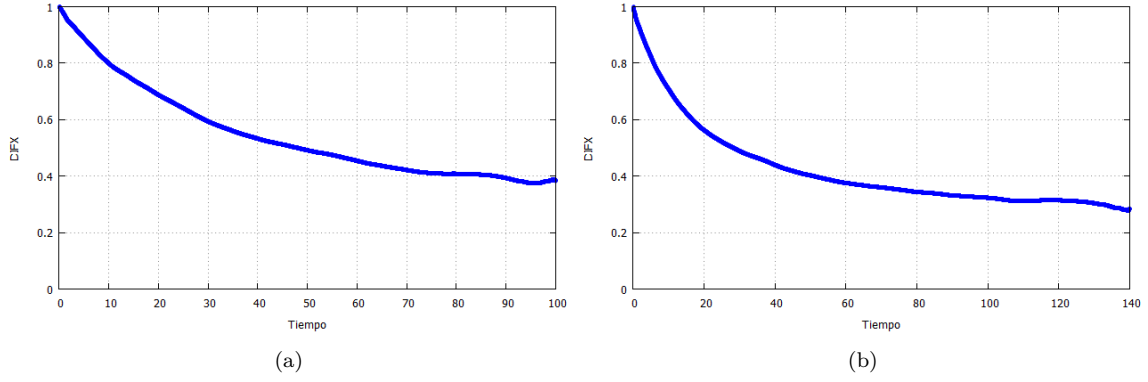


Figura 14

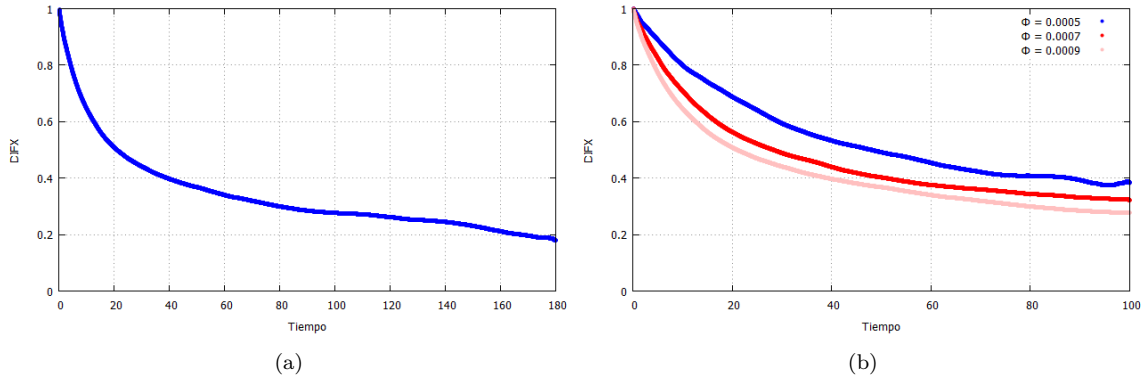


Figura 15

Observaciones: El comportamiento general es el esperado, en todos los casos el coeficiente de difusión inicia en la unidad y disminuye cuando el tiempo aumenta. De nuevo, aquí sí se hace apreciable la diferencia pues en este eje es donde están las paredes confinantes, ver figura 15.

6. Exploración 2

Se explora el sistema para otro conjunto de valores de los parámetros. Se incluye la configuración inicial y final, la curva de termalización, el perfil de concentración $\rho(x)$, la función de distribución vertical $g(y^*)$ y las propiedades de autodifusión en cada una de las direcciones, X y Y.

6.1. Parámetros de simulación

En la tabla 2 se muestran los datos de simulación elegidos.

Parámetros de la simulación	
Número de partículas (N)	216
Configuraciones totales (NSTEP)	100000
Configuración de equilibrio (NENER)	90000
Frecuencia de muestreo (NFREC)	1
Frecuencia de muestreo (NFREC2)	1
Tamaño del ensemble (NN2)	10000
Fracción en volumen (PHI)	0.0009
Tamaño de paso (DT)	0.009
Intensidad del potencial de partículas (A)	500
Parámetro de apantallamiento (ZK)	0.149
Intensidad del potencial de pared-partícula (A1)	1000
Intensidad del potencial de pared-partícula (A2)	1000
Valor del ancho (HSTAR)	60

Tabla 2

6.2. Configuración inicial y final

En la figura 16 se muestra la configuración inicial y la configuración final.

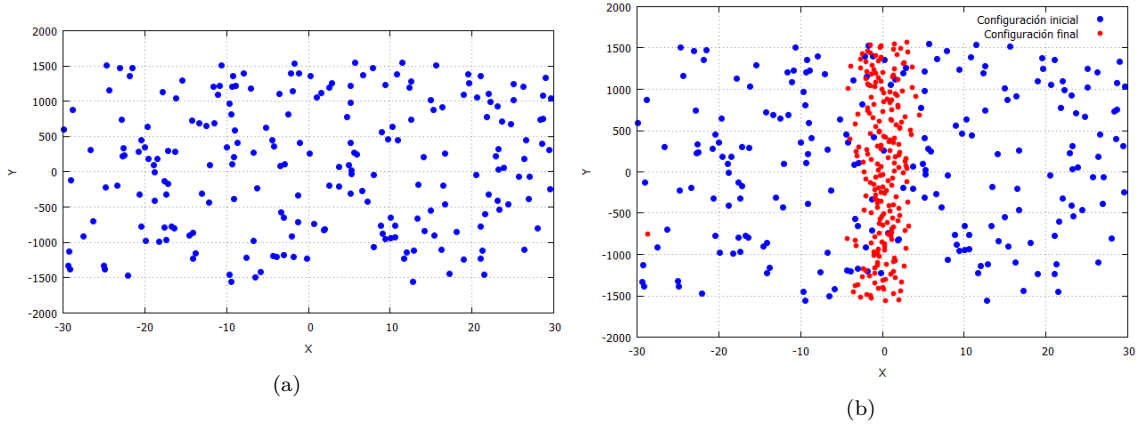


Figura 16: En la **figura (a)** se muestra la configuración inicial aleatoria. En la **figura (b)** se muestra la configuración inicial y final (puntos rojos).

Observaciones: Las partículas tienden a concentrarse en el valor de HCUT, que es la mitad del ancho de la caja. Lo anterior es consecuencia de la interacción de las partículas con las paredes confinantes, que en este caso es muy intensa.

6.3. Termalización

En la figura 17 se muestra la curva de termalización.

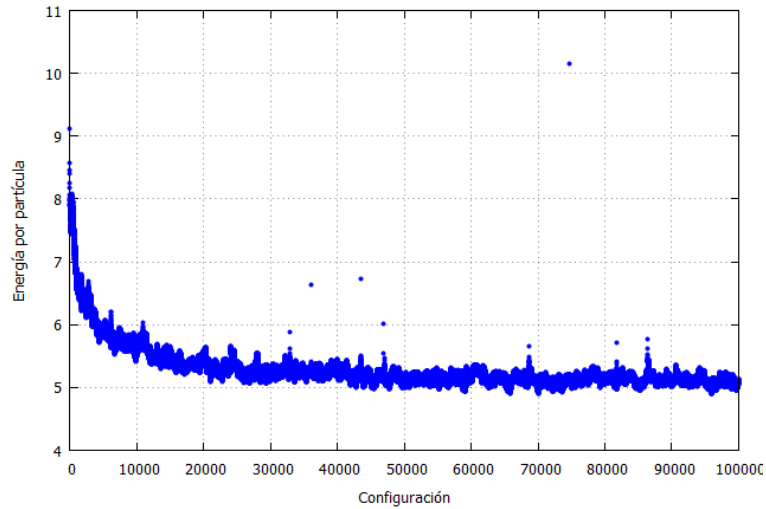


Figura 17: Curva de termalización. Se almacenaron configuraciones a partir de la configuración 90000.

Observaciones: aunque hay algunos puntos que se alejan mucho del valor promedio de la energía

no hay problema, pues las configuraciones de equilibrio se tomaron a partir de la configuración 90000, en donde no ocurre lo expuesto anteriormente.

6.4. Perfil de concentración $\rho(x)$ y función de distribución vertical $g(y^*)$

En la figura 18 se muestra el perfil de concentración y la función de distribución vertical.

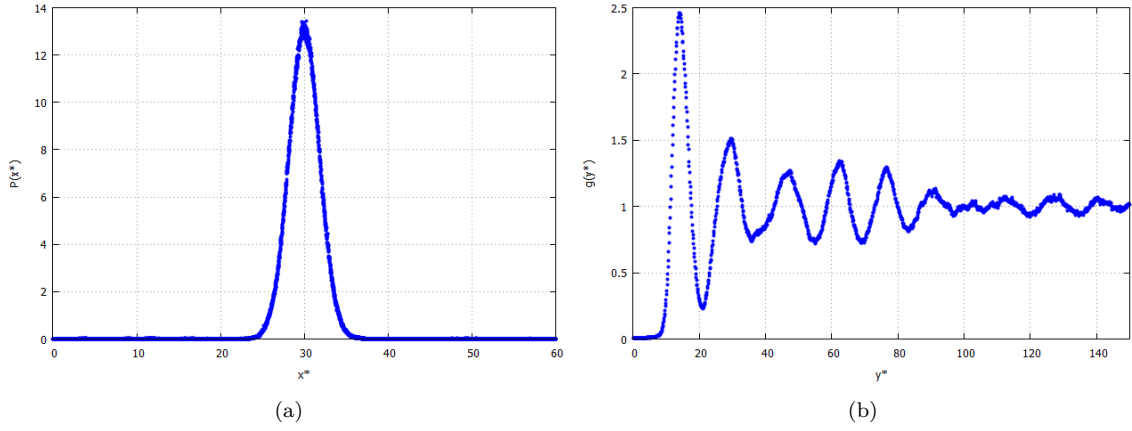


Figura 18: En la **figura (a)** se muestra el perfil de concentración $\rho(x)$. En la **figura (b)** se muestra la función de distribución vertical $g(y^*)$.

Observaciones: como lo habíamos descrito anteriormente, las partículas se concentran alrededor del valor HCUT.

6.5. Desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de difusión en Y

En la figura 19 se muestra el desplazamiento cuadrático y el coeficiente de difusión en la dirección Y.

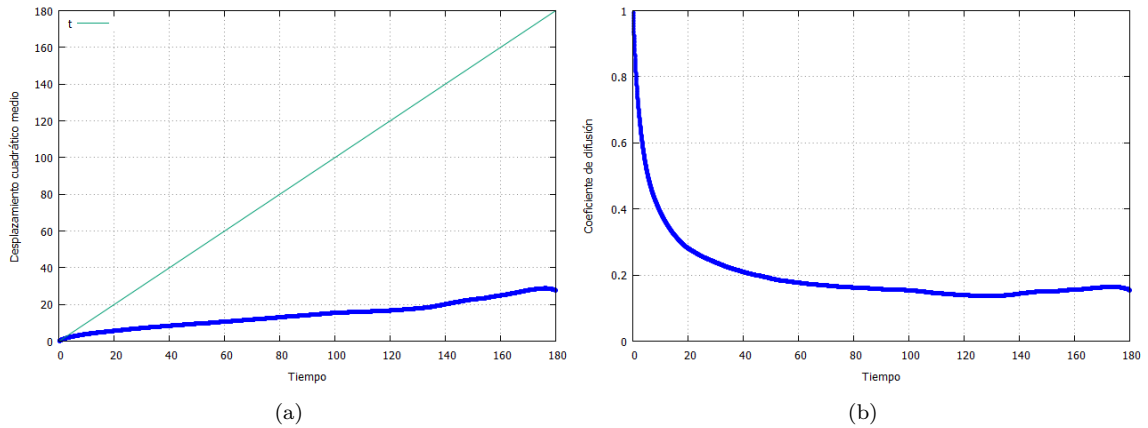


Figura 19: En la **figura (a)** se muestra el desplazamiento cuadrático medio en Y. En la **figura (b)** se muestra el coeficiente de difusión en Y.

Observaciones: Para ambas propiedades el comportamiento es el esperado; el desplazamiento cuadrático medio comienza a alejarse de la recta cuando el tiempo aumenta mientras que el coeficiente de difusión inicia en la unidad y disminuye hasta tener una forma similar a una recta horizontal.

6.6. Desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de difusión en X

En la figura 20 se muestra el desplazamiento cuadrático y el coeficiente de difusión en la dirección X.

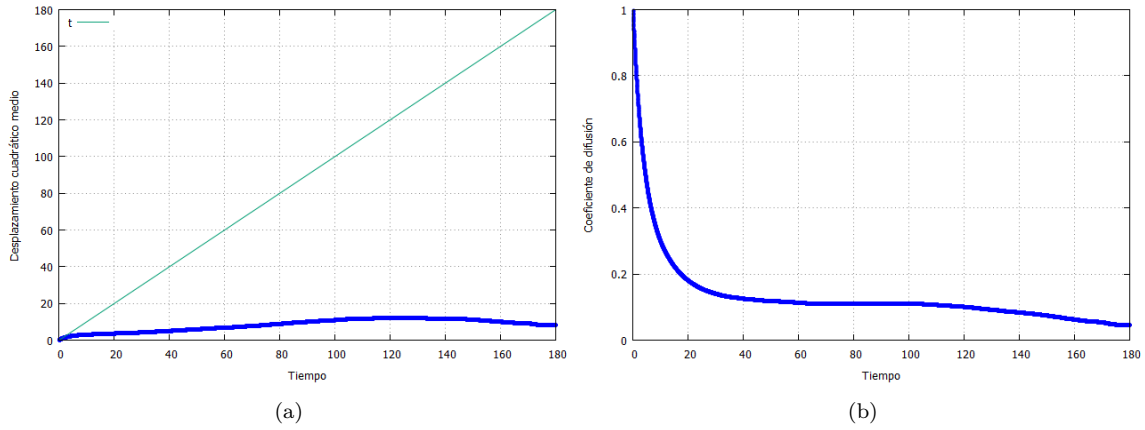


Figura 20: En la **figura (a)** se muestra el desplazamiento cuadrático medio en X. En la **figura (b)** se muestra el coeficiente de difusión en X.

Observaciones: la pendiente del desplazamiento cuadrático medio es menor que en la dirección Y, consecuencia de que en la dirección actual, X, el sistema está confinado.

7. Exploración 3

Se explora el sistema para otro conjunto de valores de los parámetros. Se incluye la configuración inicial y final, la curva de termalización, el perfil de concentración $\rho(x)$, la función de distribución vertical $g(y^*)$ y las propiedades de autodifusión en cada una de las direcciones, X y Y.

7.1. Parámetros de simulación

En la tabla 3 se muestran los datos de simulación elegidos.

Parámetros de la simulación	
Número de partículas (N)	216
Configuraciones totales (NSTEP)	100000
Configuración de equilibrio (NENER)	80000
Frecuencia de muestreo (NFREC)	2
Frecuencia de muestreo (NFREC2)	2
Tamaño del ensemble (NN2)	10000
Fracción en volumen (PHI)	0.001
Tamaño de paso (DT)	0.01
Intensidad del potencial de partículas (A)	500
Parámetro de apantallamiento (ZK)	0.149
Intensidad del potencial de pared-partícula (A1)	1000
Intensidad del potencial de pared-partícula (A2)	1000
Valor del ancho (HSTAR)	70

Tabla 3

7.2. Configuración inicial y final

En la figura 21 se muestra la configuración inicial y la configuración final.

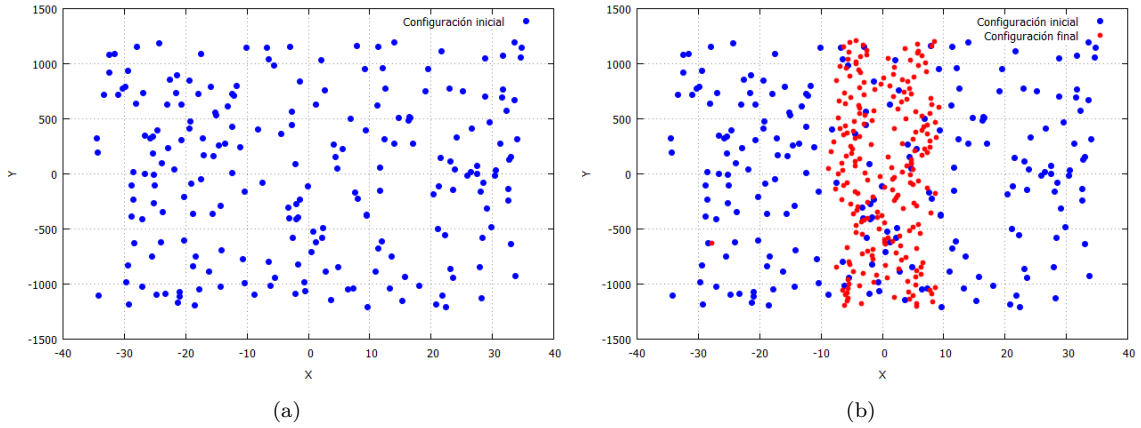


Figura 21: En la **figura (a)** se muestra la configuración inicial aleatoria. En la **figura (b)** se muestra la configuración inicial y final (puntos rojos).

Observaciones: La configuración final se arregla de una forma muy interesante; se alcanzan a distinguir dos columnas de partículas que se concentran alrededor de HCUT. Además, la forma en que lo hacen es relativamente simétrica.

7.3. Termalización

En la figura 22 se muestra la curva de termalización.

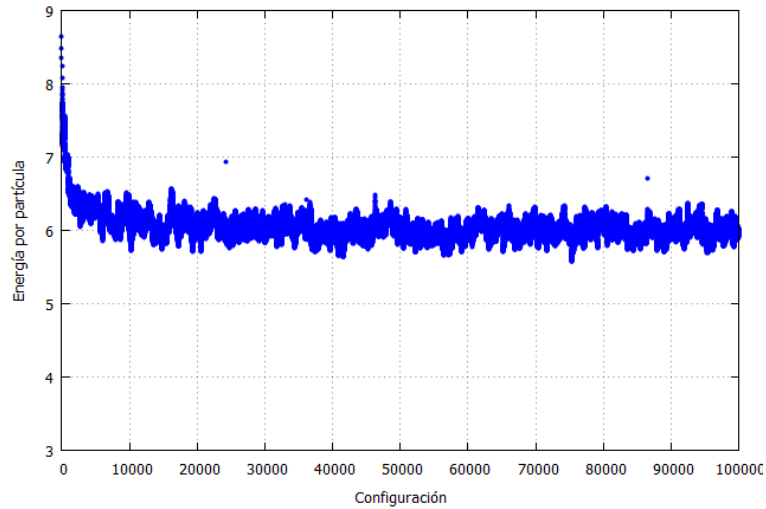


Figura 22: Curva de termalización. Se almacenaron configuraciones a partir de la configuración 80000.

Observaciones: El punto individual que se observa entre la configuración 80000 y 90000 no es

un traslape, solo un aumento en la energía. Aseguro lo anterior porque le indiqué al código que se detenga si hay traslape en alguna configuración de equilibrio.

7.4. Perfil de concentración $\rho(x)$ y función de distribución vertical $g(y^*)$

En la figura 23 se muestra el perfil de concentración y la función de distribución vertical. **Obser-**

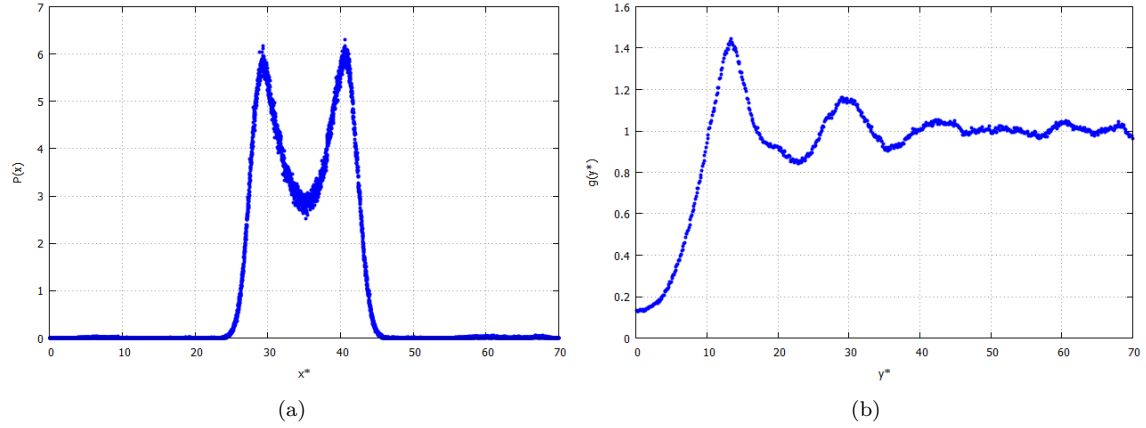


Figura 23: En la **figura (a)** se muestra el perfil de concentración $\rho(x)$. En la **figura (b)** se muestra la función de distribución vertical $g(y^*)$.

vaciones: Como lo habíamos comentado, el perfil de concentración confirma cuantitativamente lo que habíamos descrito; las partículas se forman en dos columnas y lo hacen de forma simétrica respecto al valor HCUT.

7.5. Desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de difusión en Y

En la figura 24 se muestra el desplazamiento cuadrático y el coeficiente de difusión en la dirección Y.

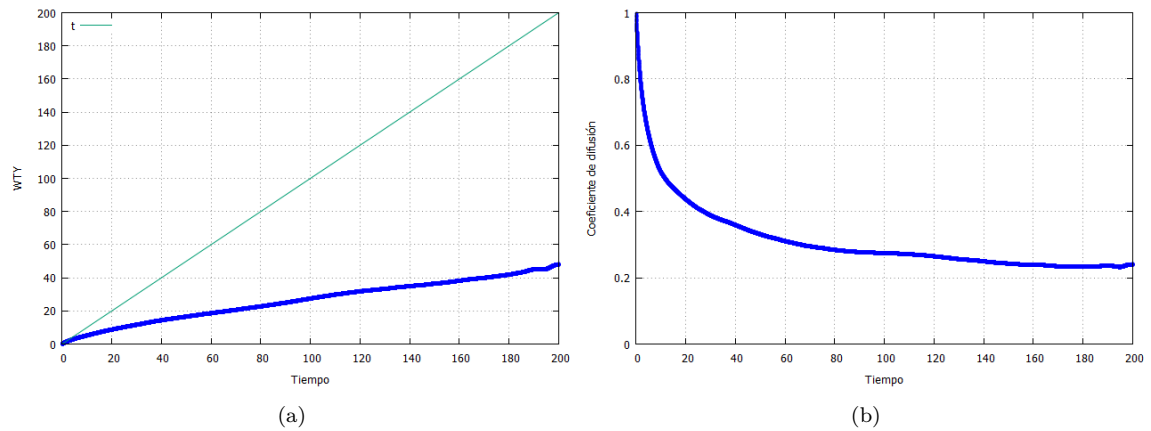


Figura 24: En la **figura (a)** se muestra el desplazamiento cuadrático medio en Y. En la **figura (b)** se muestra el coeficiente de difusión en Y.

7.6. Desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de difusión en X

En la figura 25 se muestra el desplazamiento cuadrático y el coeficiente de difusión en la dirección X.

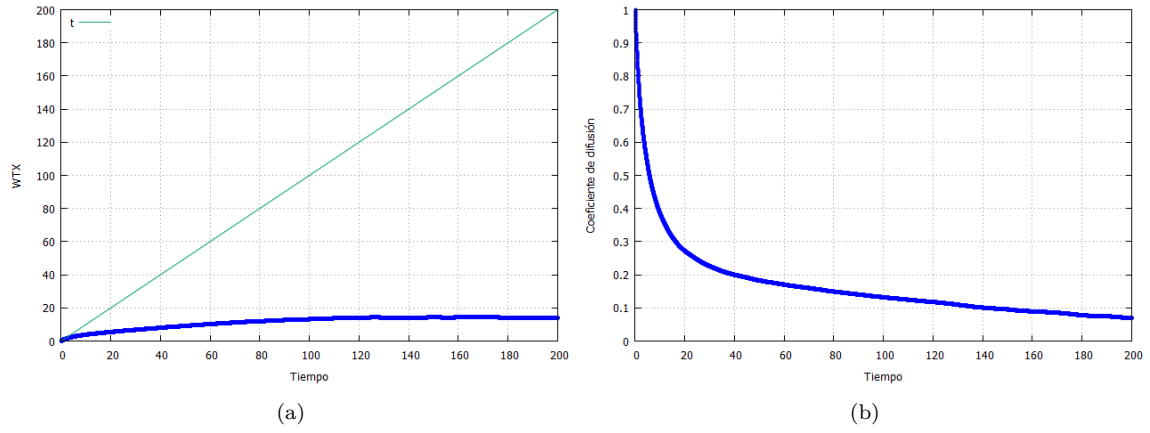


Figura 25: En la **figura (a)** se muestra el desplazamiento cuadrático medio en X. En la **figura (b)** se muestra el coeficiente de difusión en X.

Observaciones: el comportamiento general es el esperado, por lo que ya se ha comentado anteriormente en los otros casos.

8. Exploración 4

Se explora el sistema para otro conjunto de valores de los parámetros. Se incluye la configuración inicial y final, la curva de termalización, el perfil de concentración $\rho(x)$, la función de distribución vertical $g(y^*)$ y las propiedades de autodifusión en cada una de las direcciones, X y Y.

8.1. Parámetros de simulación

En la tabla 4 se muestran los datos de simulación elegidos.

Parámetros de la simulación	
Número de partículas (N)	216
Configuraciones totales (NSTEP)	100000
Configuración de equilibrio (NENER)	80000
Frecuencia de muestreo (NFREC)	2
Frecuencia de muestreo (NFREC2)	2
Tamaño del ensemble (NN2)	10000
Fracción en volumen (PHI)	0.003
Tamaño de paso (DT)	0.03
Intensidad del potencial de partículas (A)	500
Parámetro de apantallamiento (ZK)	0.149
Intensidad del potencial de pared-partícula (A1)	1000
Intensidad del potencial de pared-partícula (A2)	1000
Valor del ancho (HSTAR)	80

Tabla 4

8.2. Configuración inicial y final

En la figura 26 se muestra la configuración inicial y la configuración final.

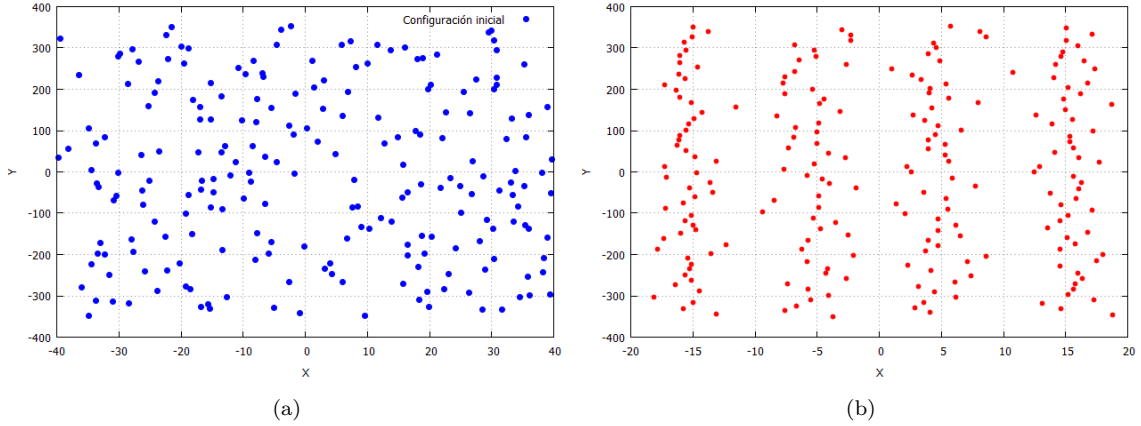


Figura 26: En la **figura (a)** se muestra la configuración inicial aleatoria. En la **figura (b)** se muestra la configuración final.

Observaciones: La configuración final se arregla de una forma muy interesante; se alcanzan a distinguir cuatro columnas de partículas que se concentran alrededor de HCUT. Además, la forma en que lo hacen es relativamente simétrica.

8.3. Termalización

En la figura 27 se muestra la curva de termalización.

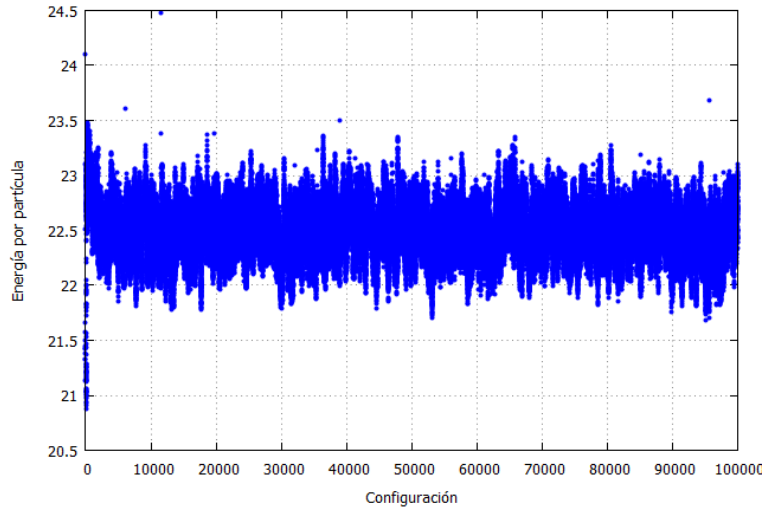


Figura 27: Curva de termalización. Se almacenaron configuraciones a partir de la configuración 80000.

Observaciones: El punto individual que se observa entre la configuración 90000 y 100000 no es

un traslape, solo un aumento en la energía. Aseguro lo anterior porque le indiqué al código que se detenga si hay traslape en alguna configuración de equilibrio.

8.4. Perfil de concentración $\rho(x)$ y función de distribución vertical $g(y^*)$

En la figura 28 se muestra el perfil de concentración y la función de distribución vertical.

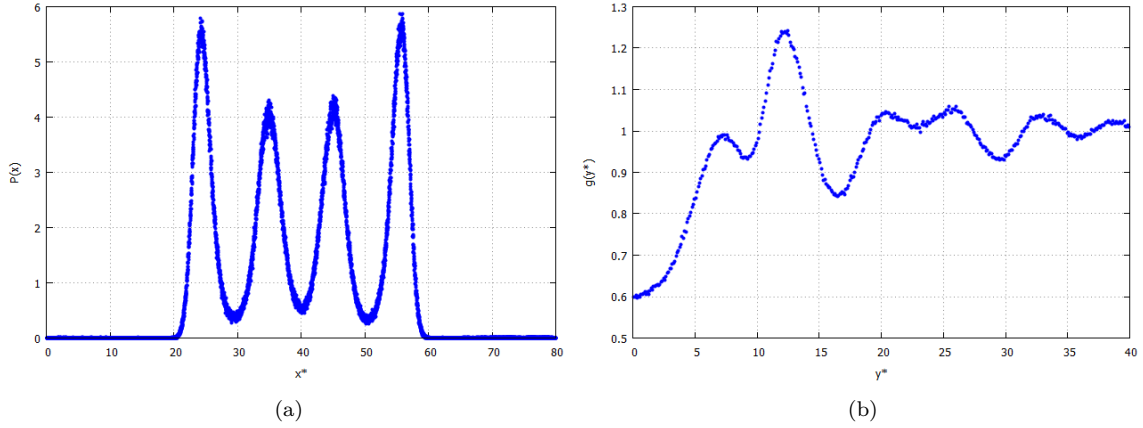


Figura 28: En la **figura (a)** se muestra el perfil de concentración $\rho(x)$. En la **figura (b)** se muestra la función de distribución vertical $g(y^*)$.

Observaciones: Las partículas se forman en cuatro columnas y lo hacen de forma simétrica respecto al valor HCUT. Además notemos la forma tan interesante la de $g(y^*)$, nos indica la estructura que tiene el sistema en la dirección Y.

8.5. Desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de difusión en Y

En la figura 29 se muestra el desplazamiento cuadrático y el coeficiente de difusión en la dirección Y.

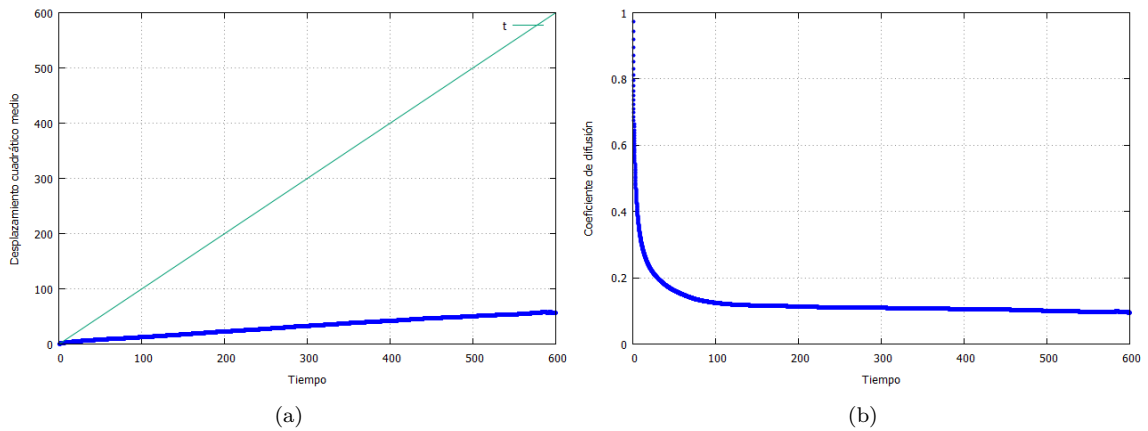


Figura 29: En la **figura (a)** se muestra el desplazamiento cuadrático medio en Y. En la **figura (b)** se muestra el coeficiente de difusión en Y.

8.6. Desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de difusión en X

En la figura 30 se muestra el desplazamiento cuadrático y el coeficiente de difusión en la dirección X.

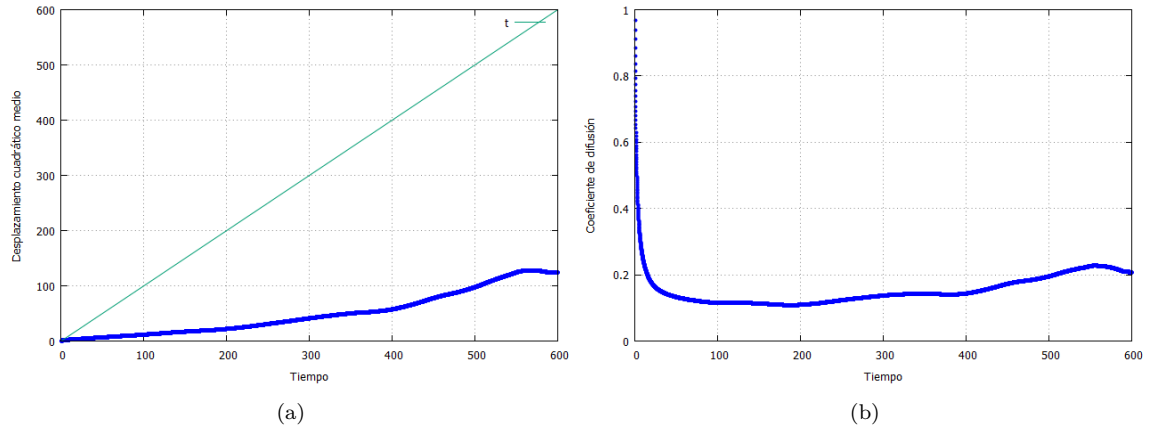


Figura 30: En la **figura (a)** se muestra el desplazamiento cuadrático medio en X. En la **figura (b)** se muestra el coeficiente de difusión en X.

Observaciones: el comportamiento general es el esperado, por lo que ya se ha comentado anteriormente en los otros casos.

9. Exploración 5

Se explora el sistema para otro conjunto de valores de los parámetros. Se incluye la configuración inicial y final, la curva de termalización, el perfil de concentración $\rho(x)$, la función de distribución vertical $g(y^*)$ y las propiedades de autodifusión en cada una de las direcciones, X y Y.

9.1. Parámetros de simulación

En la tabla 5 se muestran los datos de simulación elegidos.

Parámetros de la simulación	
Número de partículas (N)	216
Configuraciones totales (NSTEP)	100000
Configuración de equilibrio (NENER)	80000
Frecuencia de muestreo (NFREC)	2
Frecuencia de muestreo (NFREC2)	2
Tamaño del ensemble (NN2)	10000
Fracción en volumen (PHI)	0.005
Tamaño de paso (DT)	0.05
Intensidad del potencial de partículas (A)	500
Parámetro de apantallamiento (ZK)	0.149
Intensidad del potencial de pared-partícula (A1)	1000
Intensidad del potencial de pared-partícula (A2)	1000
Valor del ancho (HSTAR)	90

Tabla 5

9.2. Configuración inicial y final

En la figura 31 se muestra la configuración inicial y la configuración final.

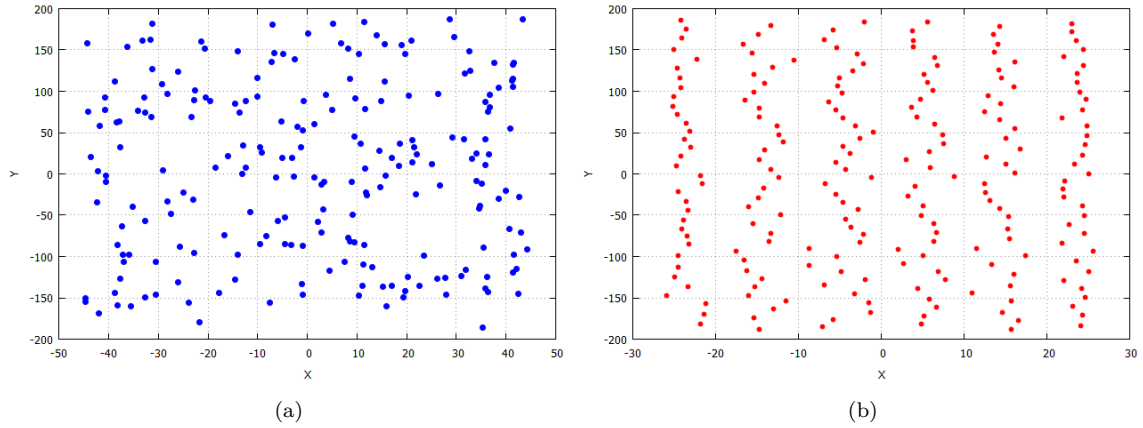


Figura 31: En la **figura (a)** se muestra la configuración inicial aleatoria. En la **figura (b)** se muestra la configuración final.

Observaciones: La configuración final se arregla de una forma muy interesante; se alcanzan a distinguir seis columnas de partículas que se concentran alrededor de HCUT. Además, la forma en que lo hacen es relativamente simétrica.

9.3. Termalización

En la figura 32 se muestra la curva de termalización.

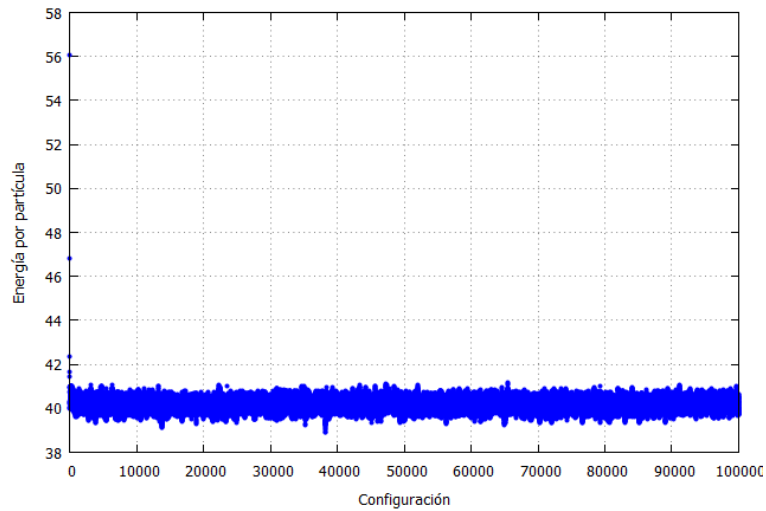


Figura 32: Curva de termalización. Se almacenaron configuraciones a partir de la configuración 80000.

Observaciones: La energía termaliza muy rápidamente.

9.4. Perfil de concentración $\rho(x)$ y función de distribución vertical $g(y^*)$

En la figura 33 se muestra el perfil de concentración y la función de distribución vertical.

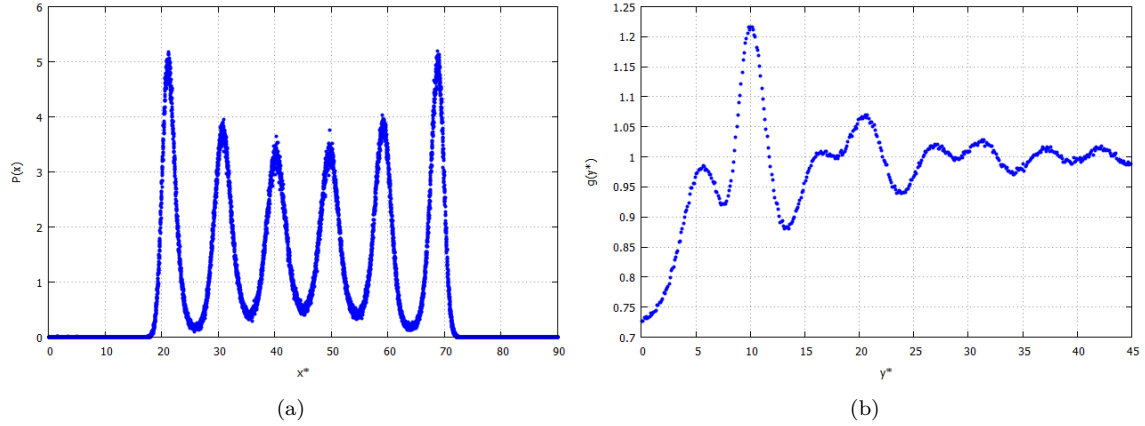


Figura 33: En la **figura (a)** se muestra el perfil de concentración $\rho(x)$. En la **figura (b)** se muestra la función de distribución vertical $g(y^*)$.

Observaciones: Las partículas se forman en seis columnas y lo hacen de forma simétrica respecto al valor HCUT. Además notemos la forma tan interesante la de $g(y^*)$, nos indica la estructura que tiene el sistema en la dirección Y.

9.5. Desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de difusión en Y

En la figura 34 se muestra el desplazamiento cuadrático y el coeficiente de difusión en la dirección Y.

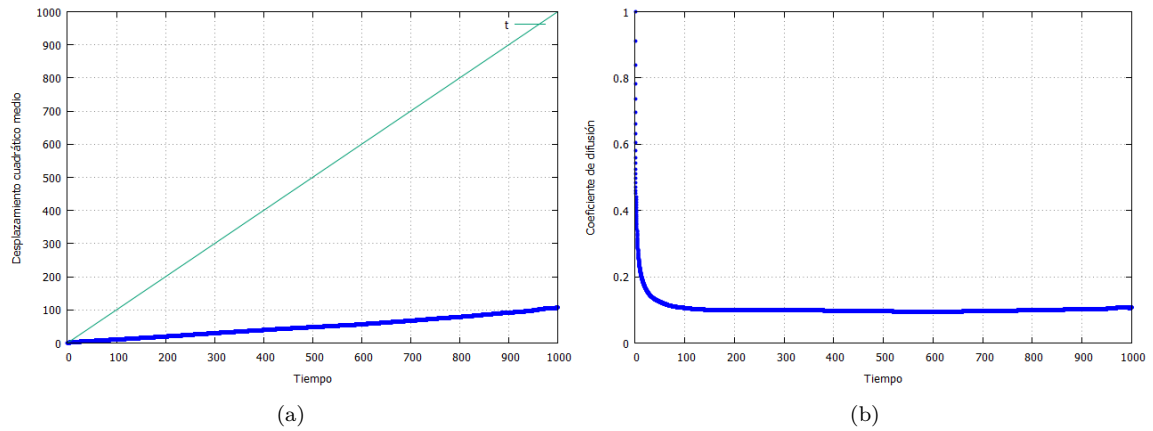


Figura 34: En la **figura (a)** se muestra el desplazamiento cuadrático medio en Y. En la **figura (b)** se muestra el coeficiente de difusión en Y.

9.6. Desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de difusión en X

En la figura 35 se muestra el desplazamiento cuadrático y el coeficiente de difusión en la dirección X.

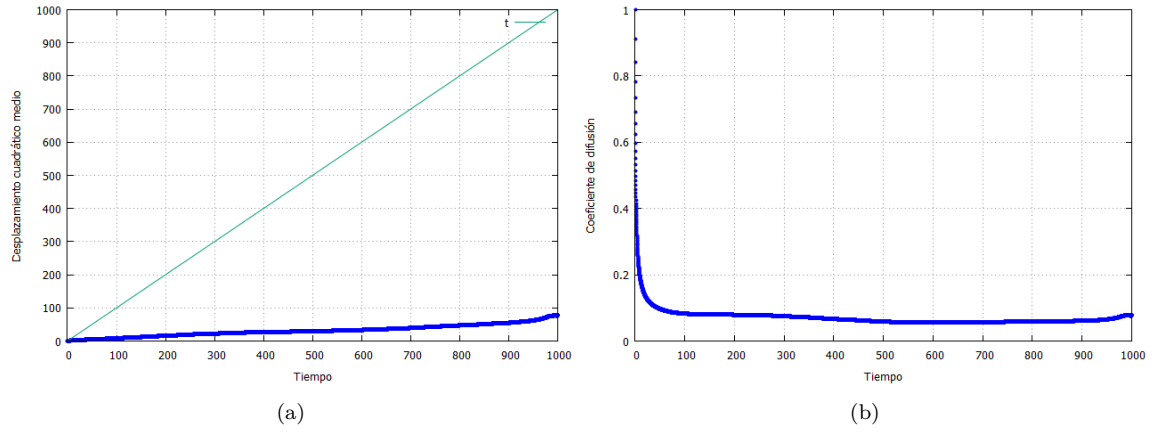


Figura 35: En la **figura (a)** se muestra el desplazamiento cuadrático medio en X. En la **figura (b)** se muestra el coeficiente de difusión en X.

10. Exploración 6

Se explora el sistema para otro conjunto de valores de los parámetros. Se incluye la configuración inicial y final, la curva de termalización, el perfil de concentración $\rho(x)$, la función de distribución vertical $g(y^*)$ y las propiedades de autodifusión en cada una de las direcciones, X y Y.

10.1. Parámetros de simulación

En la tabla 6 se muestran los datos de simulación elegidos.

Parámetros de la simulación	
Número de partículas (N)	216
Configuraciones totales (NSTEP)	100000
Configuración de equilibrio (NENER)	80000
Frecuencia de muestreo (NFREC)	2
Frecuencia de muestreo (NFREC2)	2
Tamaño del ensemble (NN2)	10000
Fracción en volumen (PHI)	0.007
Tamaño de paso (DT)	0.07
Intensidad del potencial de partículas (A)	500
Parámetro de apantallamiento (ZK)	0.149
Intensidad del potencial de pared-partícula (A1)	1000
Intensidad del potencial de pared-partícula (A2)	1000
Valor del ancho (HSTAR)	100

Tabla 6

10.2. Configuración inicial y final

En la figura 36 se muestra la configuración inicial y la configuración final.

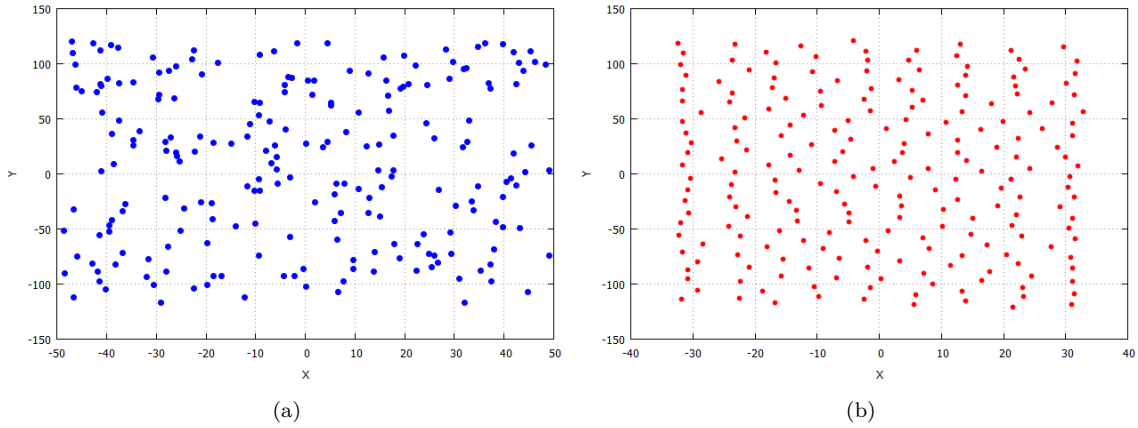


Figura 36: En la **figura (a)** se muestra la configuración inicial aleatoria. En la **figura (b)** se muestra la configuración final.

Observaciones: La configuración final se arregla de una forma muy interesante; se alcanzan a distinguir ocho columnas de partículas que se concentran alrededor de HCUT. Además, la forma en que lo hacen es relativamente simétrica.

10.3. Termalización

En la figura 37 se muestra la curva de termalización.

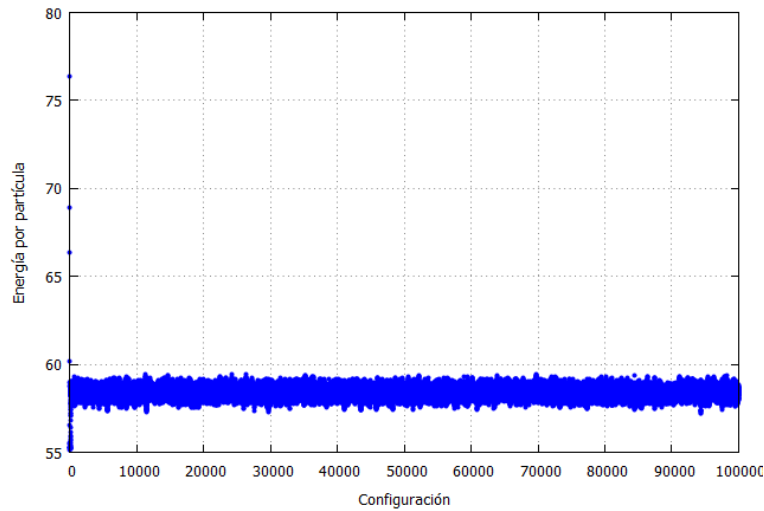


Figura 37: Curva de termalización. Se almacenaron configuraciones a partir de la configuración 80000.

Observaciones: La energía termaliza muy rápidamente.

10.4. Perfil de concentración $\rho(x)$ y función de distribución vertical $g(y^*)$

En la figura 38 se muestra el perfil de concentración y la función de distribución vertical.

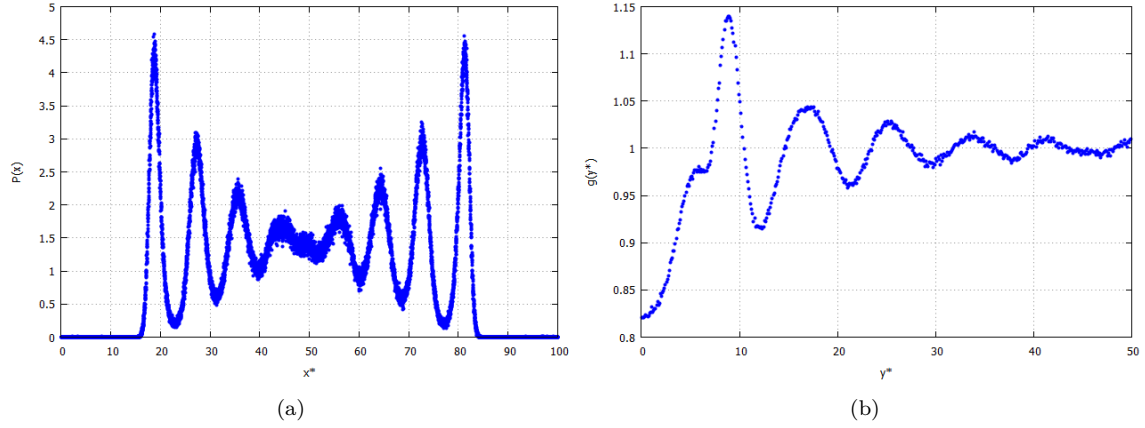


Figura 38: En la **figura (a)** se muestra el perfil de concentración $\rho(x)$. En la **figura (b)** se muestra la función de distribución vertical $g(y^*)$.

Observaciones: Las partículas se forman en ocho columnas y lo hacen de forma relativamente simétrica respecto al valor HCUT. Además notemos la forma tan interesante la de $g(y^*)$, nos indica la estructura que tiene el sistema en la dirección Y.

10.5. Desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de difusión en Y

En la figura 39 se muestra el desplazamiento cuadrático y el coeficiente de difusión en la dirección Y.

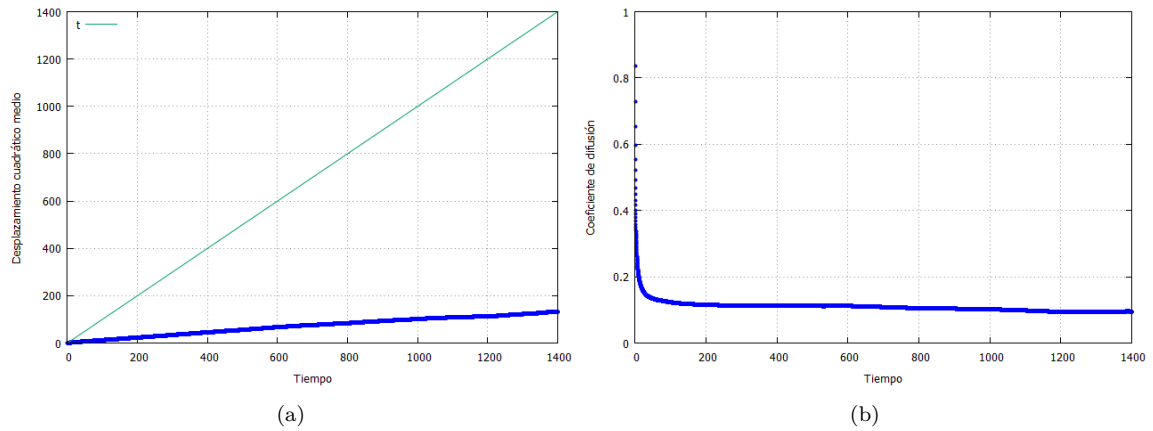


Figura 39: En la **figura (a)** se muestra el desplazamiento cuadrático medio en Y. En la **figura (b)** se muestra el coeficiente de difusión en Y.

10.6. Desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de difusión en X

En la figura 40 se muestra el desplazamiento cuadrático y el coeficiente de difusión en la dirección X.

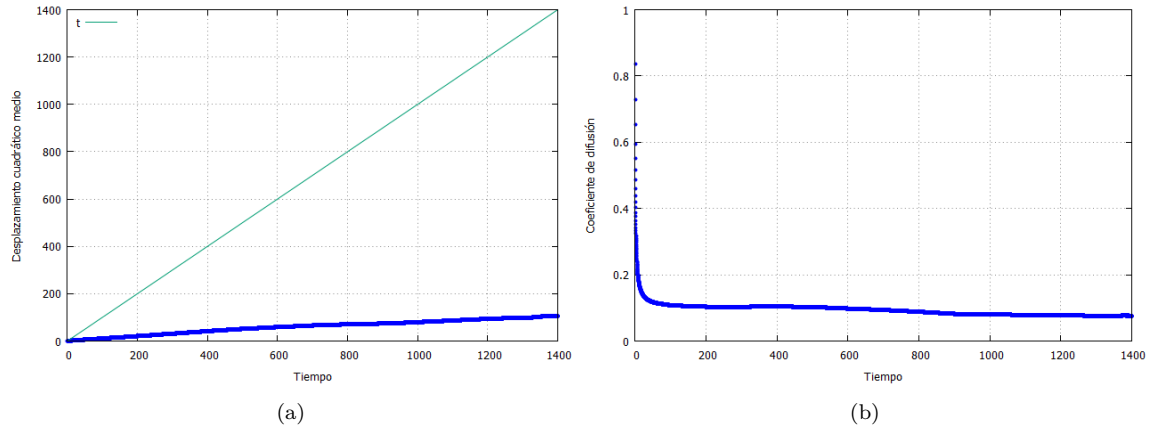


Figura 40: En la **figura (a)** se muestra el desplazamiento cuadrático medio en X. En la **figura (b)** se muestra el coeficiente de difusión en X.

Observaciones: Hasta el momento hemos aumentado la fracción en volumen y, consecuencia de esto, se hace más evidente que la pendiente, tanto del desplazamiento cuadrático medio como del coeficiente de difusión, disminuye bastante.

11. Exploración 7

Se explora el sistema para otro conjunto de valores de los parámetros. Se incluye la configuración inicial y final, la curva de termalización, el perfil de concentración $\rho(x)$, la función de distribución vertical $g(y^*)$ y las propiedades de autodifusión en cada una de las direcciones, X y Y.

11.1. Parámetros de simulación

En la tabla 7 se muestran los datos de simulación elegidos.

Parámetros de la simulación	
Número de partículas (N)	216
Configuraciones totales (NSTEP)	100000
Configuración de equilibrio (NENER)	80000
Frecuencia de muestreo (NFREC)	2
Frecuencia de muestreo (NFREC2)	2
Tamaño del ensemble (NN2)	10000
Fracción en volumen (PHI)	0.009
Tamaño de paso (DT)	0.09
Intensidad del potencial de partículas (A)	500
Parámetro de apantallamiento (ZK)	0.149
Intensidad del potencial de pared-partícula (A1)	1000
Intensidad del potencial de pared-partícula (A2)	1000
Valor del ancho (HSTAR)	110

Tabla 7

11.2. Configuración inicial y final

En la figura 41 se muestra la configuración inicial y la configuración final.

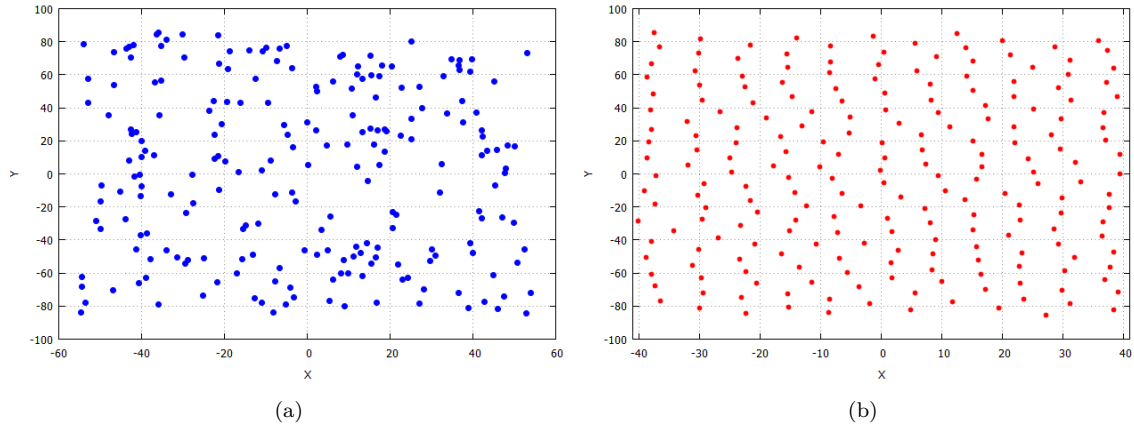


Figura 41: En la **figura (a)** se muestra la configuración inicial aleatoria. En la **figura (b)** se muestra la configuración final.

Observaciones: La configuración final se arregla de una forma muy interesante; se alcanzan a distinguir once columnas de partículas que se concentran alrededor de HCUT. Además, la forma en que lo hacen es relativamente simétrica.

11.3. Termalización

En la figura 42 se muestra la curva de termalización.

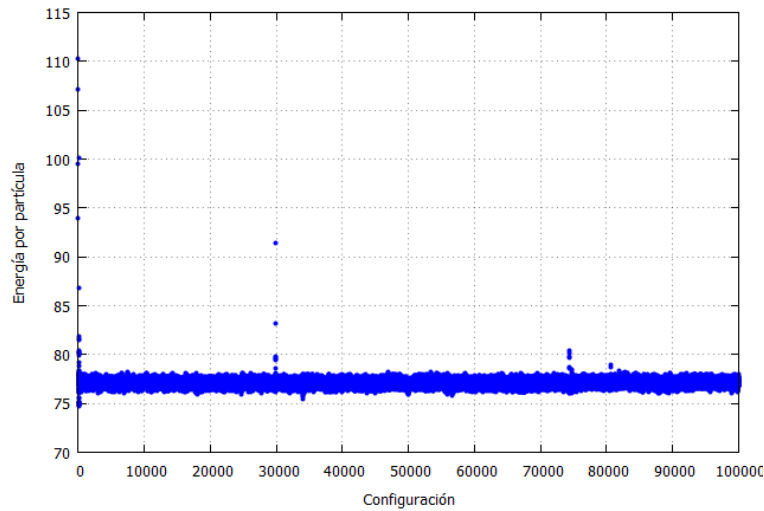


Figura 42: Curva de termalización. Se almacenaron configuraciones a partir de la configuración 80000.

Observaciones: La energía termaliza muy rápidamente.

11.4. Perfil de concentración $\rho(x)$ y función de distribución vertical $g(y^*)$

En la figura 43 se muestra el perfil de concentración y la función de distribución vertical.

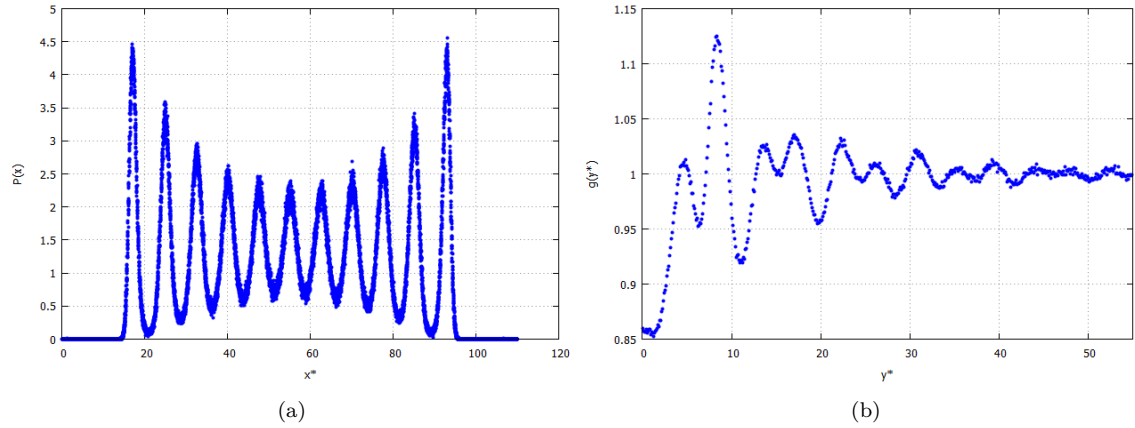


Figura 43: En la **figura (a)** se muestra el perfil de concentración $\rho(x)$. En la **figura (b)** se muestra la función de distribución vertical $g(y^*)$.

Observaciones: Las partículas se forman en once columnas y lo hacen de forma relativamente simétrica respecto al valor HCUT. Además notemos la forma tan interesante la de $g(y^*)$, nos indica la estructura que tiene el sistema en la dirección Y.

11.5. Desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de difusión en Y

En la figura 44 se muestra el desplazamiento cuadrático y el coeficiente de difusión en la dirección Y.

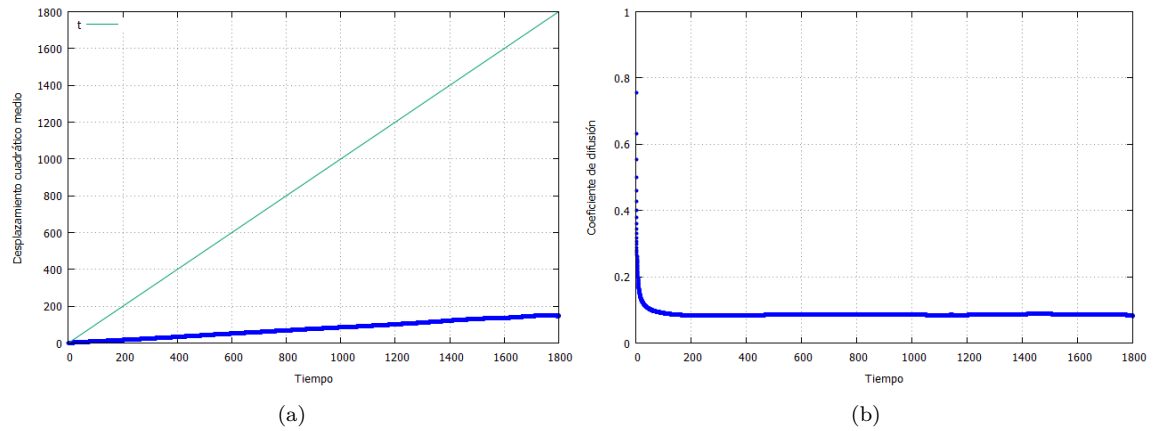


Figura 44: En la **figura (a)** se muestra el desplazamiento cuadrático medio en Y. En la **figura (b)** se muestra el coeficiente de difusión en Y.

11.6. Desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de difusión en X

En la figura 45 se muestra el desplazamiento cuadrático y el coeficiente de difusión en la dirección X.

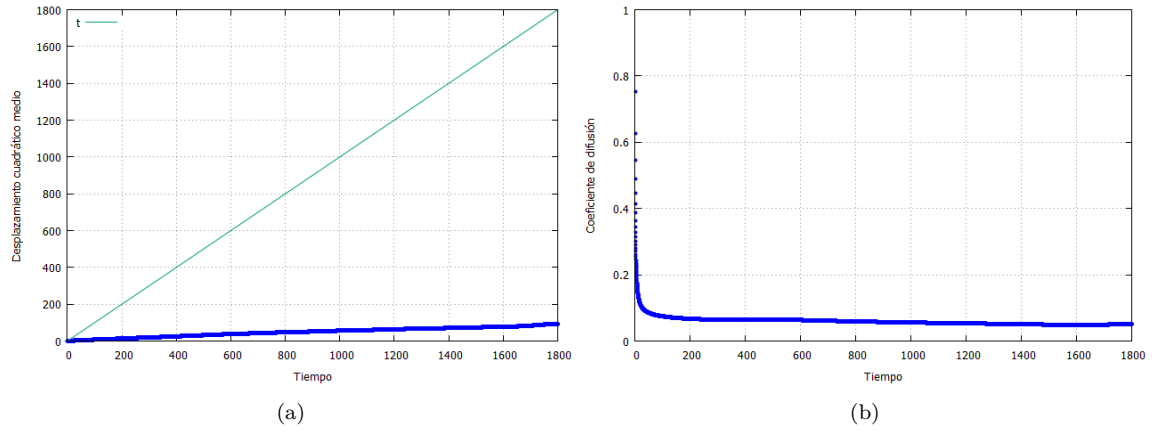


Figura 45: En la **figura (a)** se muestra el desplazamiento cuadrático medio en X. En la **figura (b)** se muestra el coeficiente de difusión en X.

12. Exploración 8

Se explora el sistema para otro conjunto de valores de los parámetros. Se incluye la configuración inicial y final, la curva de termalización, el perfil de concentración $\rho(x)$, la función de distribución vertical $g(y^*)$ y las propiedades de autodifusión en cada una de las direcciones, X y Y.

12.1. Parámetros de simulación

En la tabla 8 se muestran los datos de simulación elegidos.

Parámetros de la simulación	
Número de partículas (N)	216
Configuraciones totales (NSTEP)	100000
Configuración de equilibrio (NENER)	80000
Frecuencia de muestreo (NFREC)	2
Frecuencia de muestreo (NFREC2)	2
Tamaño del ensemble (NN2)	10000
Fracción en volumen (PHI)	0.01
Tamaño de paso (DT)	0.1
Intensidad del potencial de partículas (A)	500
Parámetro de apantallamiento (ZK)	0.149
Intensidad del potencial de pared-partícula (A1)	1000
Intensidad del potencial de pared-partícula (A2)	1000
Valor del ancho (HSTAR)	120

Tabla 8

12.2. Configuración inicial y final

En la figura 46 se muestra la configuración inicial y la configuración final.

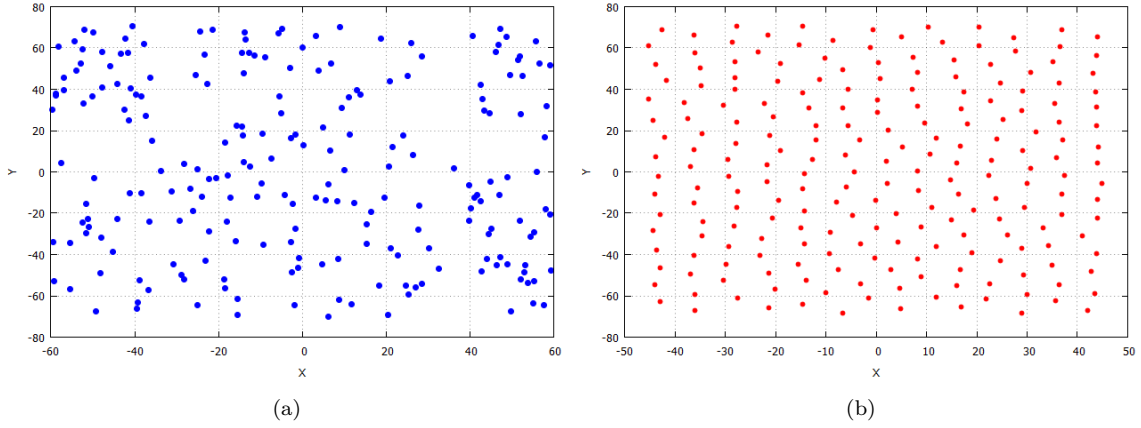


Figura 46: En la **figura (a)** se muestra la configuración inicial aleatoria. En la **figura (b)** se muestra la configuración final.

Observaciones: La configuración final se arregla de una forma muy interesante; se alcanzan a distinguir trece columnas de partículas que se concentran alrededor de HCUT. Además, la forma en que lo hacen es relativamente simétrica.

12.3. Termalización

En la figura 47 se muestra la curva de termalización.

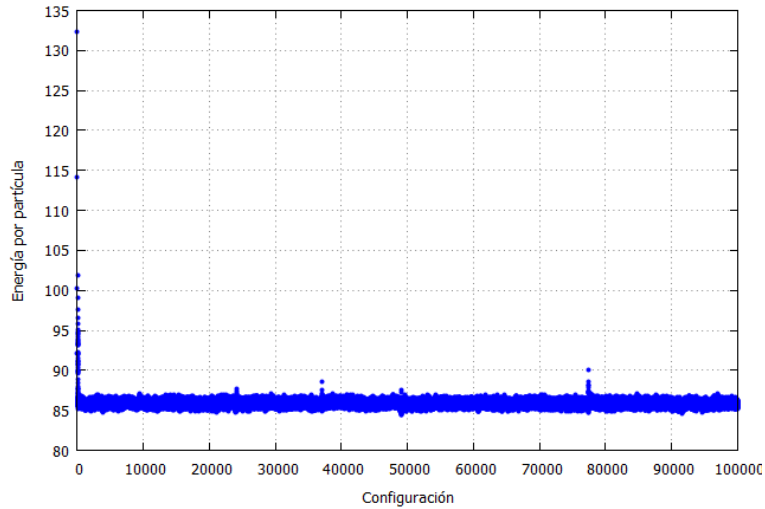


Figura 47: Curva de termalización. Se almacenaron configuraciones a partir de la configuración 80000.

Observaciones: La energía termaliza muy rápidamente.

12.4. Perfil de concentración $\rho(x)$ y función de distribución vertical $g(y^*)$

En la figura 48 se muestra el perfil de concentración y la función de distribución vertical.

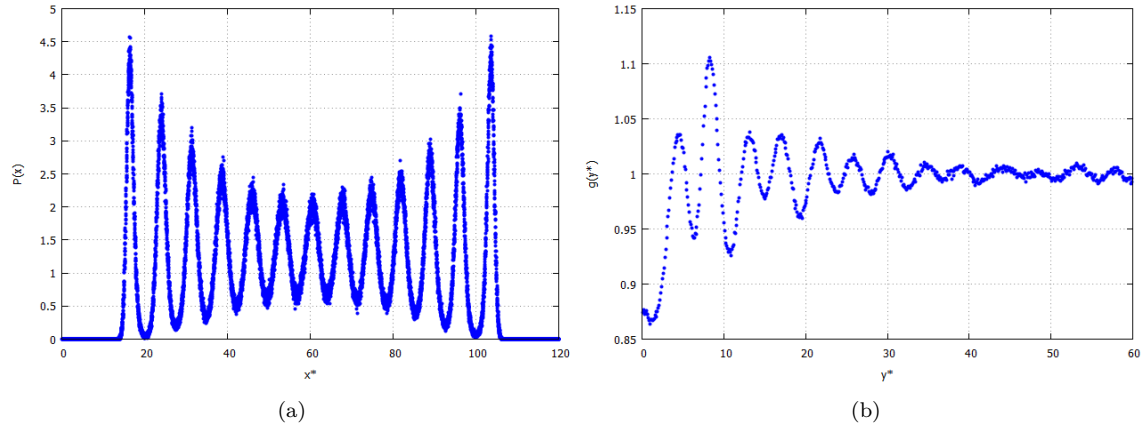


Figura 48: En la **figura (a)** se muestra el perfil de concentración $\rho(x)$. En la **figura (b)** se muestra la función de distribución vertical $g(y^*)$.

Observaciones: Las partículas se forman en trece columnas y lo hacen de forma relativamente simétrica respecto al valor HCUT. Además notemos la forma tan interesante la de $g(y^*)$, nos indica la estructura que tiene el sistema en la dirección Y.

12.5. Desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de difusión en Y

En la figura 49 se muestra el desplazamiento cuadrático y el coeficiente de difusión en la dirección Y.

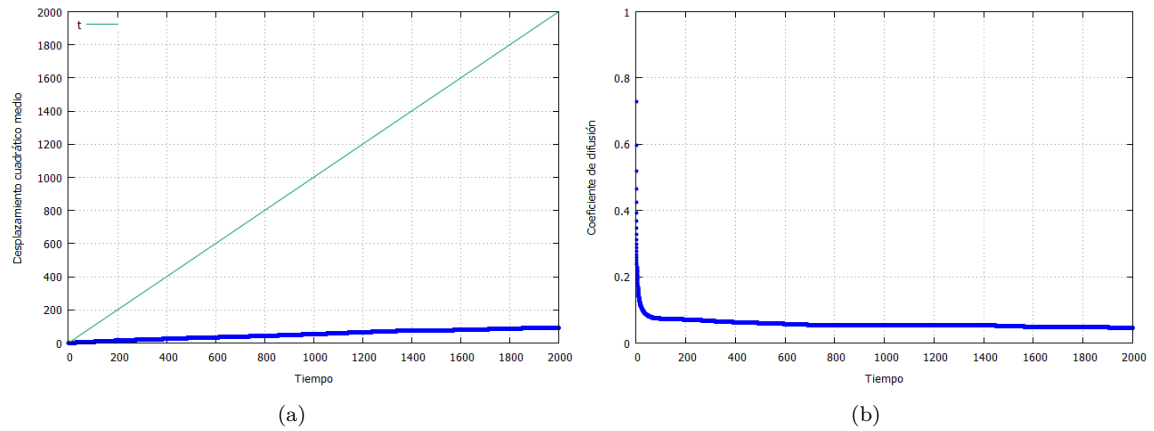


Figura 49: En la **figura (a)** se muestra el desplazamiento cuadrático medio en Y. En la **figura (b)** se muestra el coeficiente de difusión en Y.

12.6. Desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de difusión en X

En la figura 50 se muestra el desplazamiento cuadrático y el coeficiente de difusión en la dirección X.

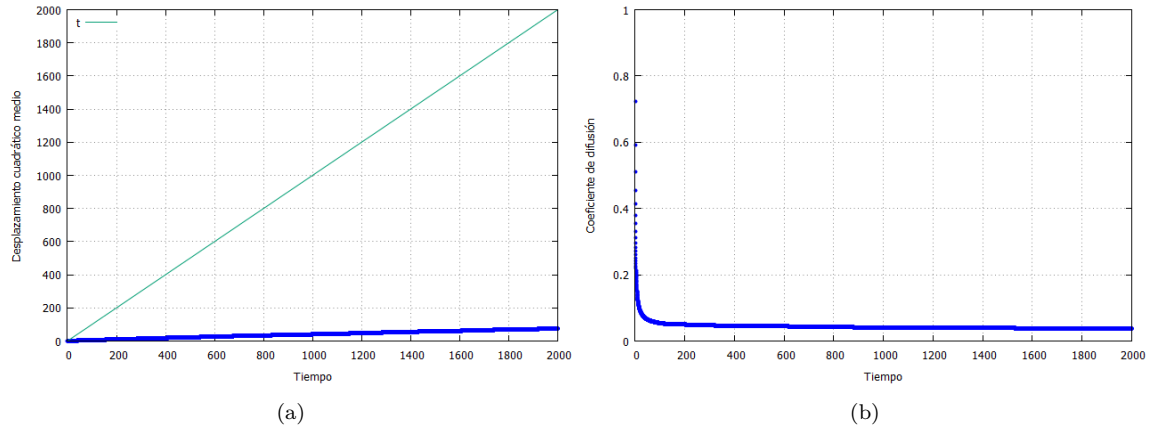


Figura 50: En la **figura (a)** se muestra el desplazamiento cuadrático medio en X. En la **figura (b)** se muestra el coeficiente de difusión en X.

Observaciones: ¡Qué interesante! tanto el desplazamiento cuadrático medio como el coeficiente de difusión están muy próximos a estar completamente horizontales.

13. Un caso interesante

Se explora el sistema para otro conjunto de valores de los parámetros. Se incluye la configuración inicial y final, la curva de termalización, el perfil de concentración $\rho(x)$, la función de distribución vertical $g(y^*)$ y las propiedades de autodifusión en cada una de las direcciones, X y Y.

13.1. Parámetros de simulación

En la tabla 9 se muestran los datos de simulación elegidos.

Parámetros de la simulación	
Número de partículas (N)	216
Configuraciones totales (NSTEP)	100000
Configuración de equilibrio (NENER)	80000
Frecuencia de muestreo (NFREC)	2
Frecuencia de muestreo (NFREC2)	2
Tamaño del ensemble (NN2)	10000
Fracción en volumen (PHI)	0.01
Tamaño de paso (DT)	0.0001
Intensidad del potencial de partículas (A)	500
Parámetro de apantallamiento (ZK)	0.149
Intensidad del potencial de pared-partícula (A1)	500
Intensidad del potencial de pared-partícula (A2)	500
Valor del ancho (HSTAR)	200

Tabla 9

13.2. Configuración inicial y final

En la figura 51 se muestra la configuración inicial y la configuración final.

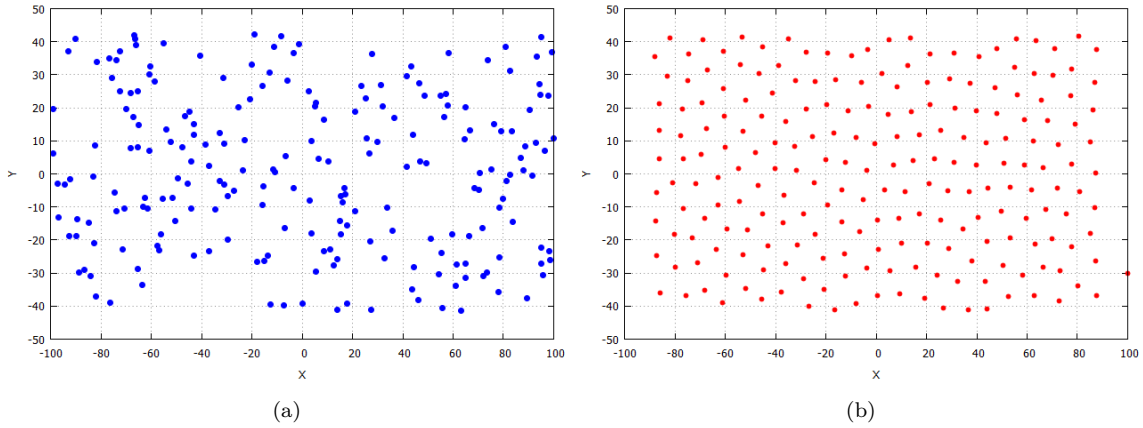


Figura 51: En la **figura (a)** se muestra la configuración inicial aleatoria. En la **figura (b)** se muestra la configuración final.

Observaciones: La configuración final se arregla de una forma muy interesante; como un cristal.

13.3. Termalización

En la figura 52 se muestra la curva de termalización.

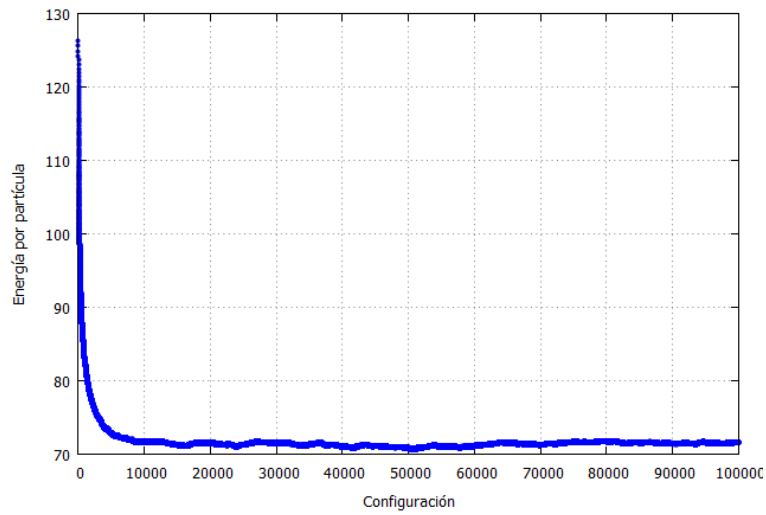


Figura 52: Curva de termalización. Se almacenaron configuraciones a partir de la configuración 80000.

Observaciones: La energía termaliza muy rápidamente.

13.4. Perfil de concentración $\rho(x)$ y función de distribución vertical $g(y^*)$

En la figura 53 se muestra el perfil de concentración y la función de distribución vertical.

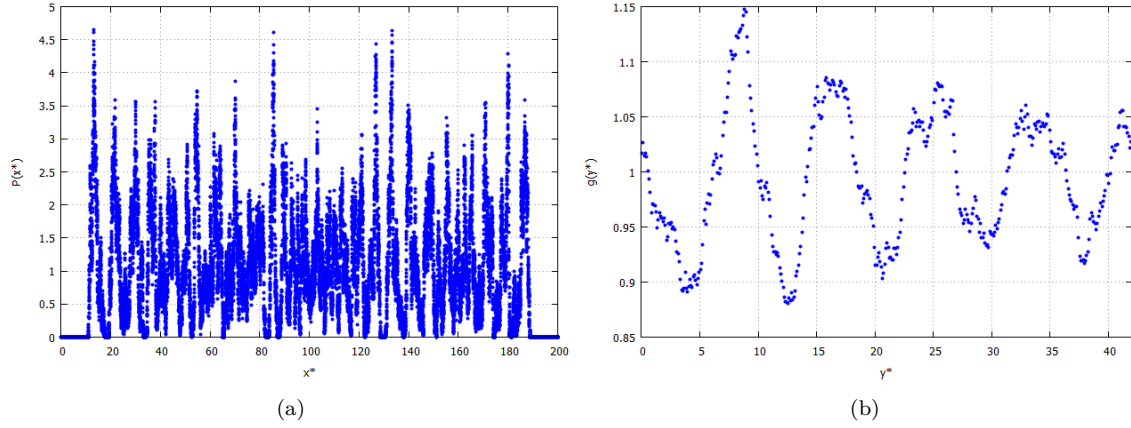


Figura 53: En la **figura (a)** se muestra el perfil de concentración $\rho(x)$. En la **figura (b)** se muestra la función de distribución vertical $g(y^*)$.

Observaciones: Decidí incluir este sistema en el informe porque el resultado es muy interesante, sin embargo, no me fue posible reproducirlo de nuevo.

14. Resumen de perfiles de concentración

En la siguiente imagen se muestran los perfiles de concentración que se expusieron en este informe y algunos más.

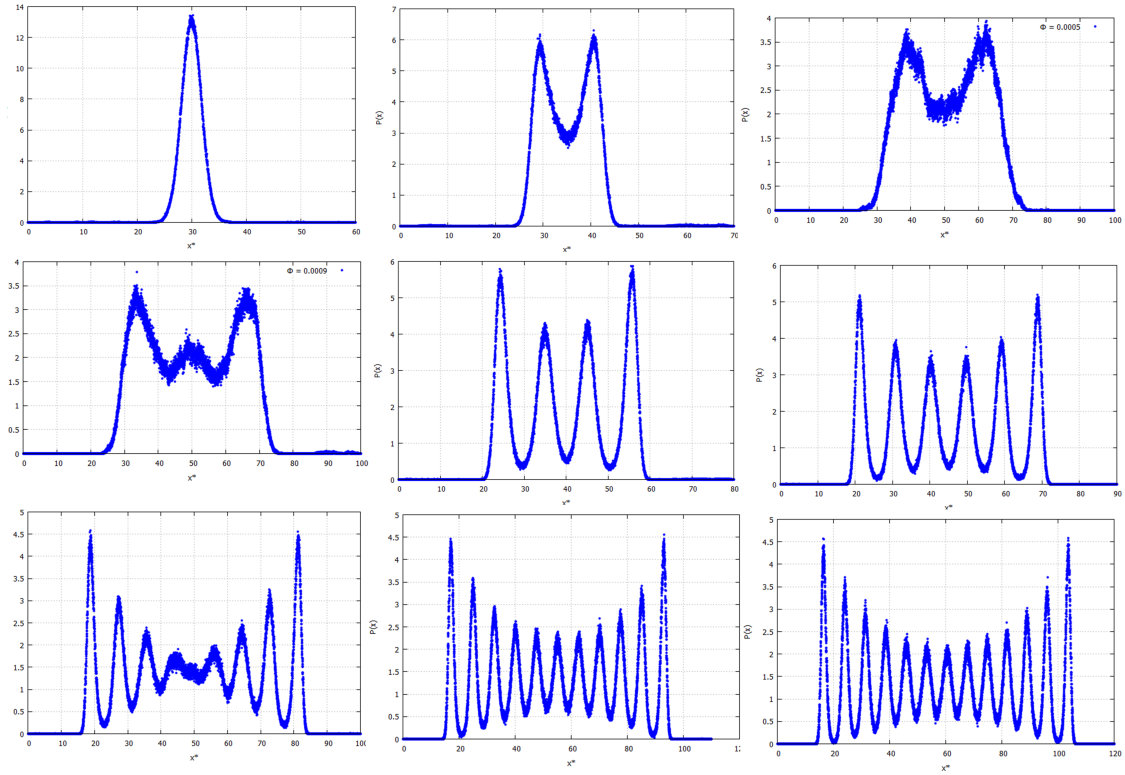


Figura 54: Resumen de perfiles de concentración.

15. Comentarios y observaciones finales

Lo primero que debo mencionar, de manera obligada, es que en todos los resultados que aquí se presentan, en las configuraciones de equilibrio no ocurrieron traslapes, en algunas sí hubo pero antes de la primera configuración de equilibrio.

En cuanto al contenido del informe, opté por buscar regularidades en los sistemas confinados, con la intención de explorar y, quizá en el futuro le sirvan como referencia (por eso de que habíamos estado calibrando sin referencias). Mencionar, además, que no son las únicas simulaciones que hice. En la carpeta [09] **Otras** se incluyen otras tantas simulaciones.

¿Qué es lo que sigue? como lo comenté en clase, lo siguiente será estudiar sistemas confinados en tres dimensiones con paredes paralelas al eje X y Y (¿y Z?). Además, emplearé el código de dinámica browniana para el potencial FRAC del proyecto de Monte Carlo y comparar con los resultados de tal proyecto.

16. Referencias

[1] *Introduction to colloidal dispersions in external fields*, H. Löwen, Eur. Phys. J., Special Topics 222, 2727-2737 (2013).

[2] *Structure of a colloidal suspension confined in a planar slit*, P. González-Mozuelos et al, J. Chem. Phys. 95, 8337 (1991).

[3] Sitio de Laura: <http://paginas.fisica.uson.mx/laura.yeomans/dex2191/>