

## Contribuciones energéticas

Energía libre química  
(equilibrios ácido-base)



Segmentos titulables:  
red polimérica  
Segmentos titulables:  
adsorbatos  
( $F_{qca}$ )

$f()$

Grado de carga

$\begin{matrix} f_i \\ f_\tau(r) \end{matrix}$

$f_j$

Semi-gran  
potencial ( $\Omega$ )

Entropía traslacional  
Y configuracional



Especies libres ( $S_{mez}$ )  
Red polimérica ( $S_{Conf,net}$ )

$f()$

Densidades locales

$\begin{matrix} \rho_\gamma(r) \\ \rho_i(\theta_i, r) \end{matrix}$

$(\partial \Omega / \partial f_j) = 0$

Interacciones  
entre especies



Electrostáticas ( $U_{elec}$ )  
Estéricas de volumen excluido ( $U_{ste}$ )

$f()$

Presión osmótica  $\rightarrow \pi(z)$

Potencial electroestático  $\rightarrow \psi(z)$

$f_i(\pi(z), \psi(z), inputs)$

potenciales  
de interacción  
locales



$\begin{matrix} \pi(z) \\ \psi(z) \end{matrix}$



Ecuación de Poisson  
Restricción de incompresibilidad



Resolución  
numérica



método de Newton-Krylov  
código FORTRAN paralelo