

Estudio de la Dinámica de Partículas Coloidales en un Potencial de Lennard-Jones mediante Simulaciones por Integración de Verlet*

Escobar Matzir, Ricardo José Manuel, 202002342^{1, **}

¹Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de San Carlos de Guatemala, Zona 12, Guatemala.

En este trabajo estudiamos la evolución en las trayectorias de sistemas coloidales debidos a la presencia de un potencial de Lennard-Jones. Para lograr esto se realizaron simulaciones mediante la integración de las ecuaciones de movimiento empleando el método numérico de Verlet implementado en Python. Más precisamente analizamos el comportamiento debido a cuatro condiciones iniciales distintas las cuales incluyen posiciones de las partículas ordenadas y desordenadas así como también con velocidades iniciales cero y velocidades aleatorias. Con esto conseguimos visualizar que los sistemas siempre alcanzan una estabilidad en sus distancias relativas. Código [aquí](#).

I. INTRODUCCIÓN

En términos simples, estudiamos las partículas coloidales que consisten en una fase sólida suspendida en un medio líquido y son altamente afectadas por las fuerzas de corto y largo alcance que rigen su estabilidad. En este trabajo estudiamos la evolución de este sistema de partículas coloidales bajo la influencia de un potencial de Lennard-Jones que es comúnmente usado para describir interacciones entre moléculas y átomos. Empleamos el método de Verlet para realizar la integración de las ecuaciones de movimiento de forma numérica. Analizamos cómo varían las trayectorias de las partículas y de qué manera alcanzan el equilibrio de acuerdo a las condiciones iniciales.

El objetivo es aportar una visión clara del proceso de transición hacia el equilibrio de las partículas coloidales y entender cómo el potencial de Lennard-Jones tiene influencia sobre las partículas para que estas actúen de manera atractiva o repulsiva dependiente de las distancias relativas entre ellas.

II. MARCO TEÓRICO

A. Partículas coloidales

En física y química, un coloide o sistema coloidal, es un sistema conformado por dos fases, normalmente una fluida y otra dispersa en forma de partículas generalmente sólidas muy finas [1] del diámetro comprendido entre 1 nanómetro y 1 micrómetro.

La estabilidad de un sistema coloidal se define por las partículas que permanecen suspendidas en solución y depende de las fuerzas de interacción entre las partículas. Estos incluyen interacciones electrostáticas y fuerzas de van der Waals[1].

B. Método de Verlet

El método de Verlet es un método ampliamente utilizado en simulaciones de sistemas dinámicos. Se trata de un método numérico que integra las ecuaciones de movimiento de Newton para determinar la evolución de las trayectorias de las partículas.

Se basa principalmente en la expansión en series de Taylor de la función de posición. La segunda ley de Newton está dada por

$$F = ma = m \frac{d^2x}{dt^2}$$

entonces la deducción del método de Verlet para aproximar la trayectoria es la siguiente.

Primero calculamos la expansión hacia adelante ($t + \Delta t$) de $x(t)$. Esto da

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 + \frac{1}{6}\frac{d^3x}{dt^3}\Delta t^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

luego calculamos la expansión hacia atrás ($t - \Delta t$)

$$x(t - \Delta t) = x(t) - v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 - \frac{1}{6}\frac{d^3x}{dt^3}\Delta t^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

sumando estos dos resultados y simplificando, obtenemos el método de Verlet

$$x(t + \Delta t) = 2x(t) - x(t - \Delta t) + a(t)\Delta t^2$$

que para nuestros fines puede ser escrita como

$$x(t + \Delta t) = 2x(t) - x(t - \Delta t) + \frac{F}{m}\Delta t^2 \quad (1)$$

y el error es de orden $\mathcal{O}(\Delta t^4)$, lo que indica que es una aproximación bastante buena.

C. Potencial de Lennard-Jones

El potencial de Lennard-Jones es uno de los modelos más utilizados en física y química para describir la dinámica e interacción entre pares de moléculas y átomos. Fue propuesto en

* Física de la materia condensada

** e-mail: ricardoemf03@gmail.com

1924 por el matemático y físico teórico inglés John Lennard-Jones (1894-1954) [2]. Este par de moléculas o átomos están sujetos a una fuerza de gran separación y de pequeña separación. Resultado una interacción repulsiva a pequeñas distancias y atractiva a grandes distancias. Este potencial tiene la forma

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2)$$

donde ϵ es la profundidad del potencial, σ es la distancia (finita) en la que el potencial entre partículas es un mínimo y r es la separación o distancia entre partículas.

De los cursos básicos de física sabemos que de un potencial se deriva una fuerza. Dicha fuerza será

$$\vec{F}(r) = -\frac{dV(r)}{dr} \frac{\vec{r}}{r} \quad (3)$$

Este potencial posee un mínimo, es decir, un punto de equilibrio el cual puede ser obtenido sabiendo que se encuentra donde la fuerza se anula. Es decir,

$$\left. \frac{dV(r)}{dr} \right|_{r=r_{eq}} = 0$$

La solución de esta ecuación es

$$r_{eq} = 2^{1/6} \sigma \quad (4)$$

Si todas las partículas se encuentran separadas, en promedio, a esta distancia podremos describir a un sistema en equilibrio. Esto será fundamental a la hora de realizar las simulaciones.

D. Configuraciones iniciales y sistemas a analizar

Las simulaciones se basarán en analizar 4 casos principales. En todos ellos elegimos arbitrariamente $\epsilon = 1$ y $\sigma = 1.5$.

1. Colocamos a todas las partículas en las esquinas de un cuadrado de lado L como se muestra den la figura 1. Las velocidades iniciales de las partículas son cero. Dado que ya hemos establecido un valor para σ , entonces, en base a la ecuación (4) determinamos que $r_{eq} \approx 1.68$. Debido a la simetría en las posiciones de las partículas, podemos hacer la aproximación $r \approx L$. Es entonces que aquí analizamos 3 subcasos, cuando $L < r_{eq}$, $L > r_{eq}$ y por último cuando $L \approx r_{eq}$.
2. En esta segunda situación, seguimos colocando a las partículas en las esquina de un cuadrado de lado L , pero esta vez sus velocidades serán aleatorias siguiendo la distribución de Maxwell-Boltzmann. Las velocidades dependerán de la temperatura.
3. Para el tercer caso usamos velocidades iniciales cero y posiciones iniciales aleatorias.
4. En el último caso empleamos tanto las velocidades como las posiciones aleatorios.

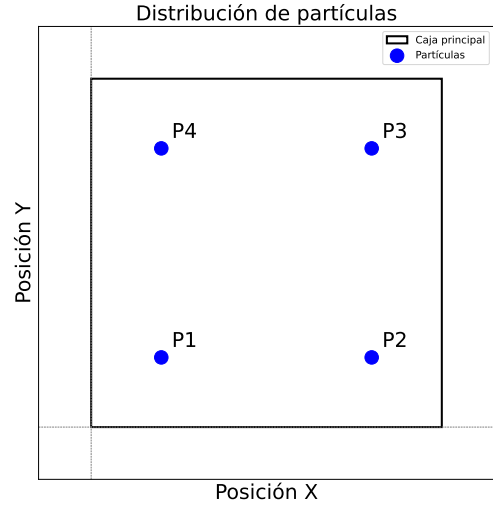


Figura 1: Configuración de partículas en las esquinas de un cuadrado de lado L en una caja de lado $L+k$, con $k = 1$. En la frontera las partículas rebotan.

para la integración utilizamos un $\Delta t = 0.001$ e iteraciones que van desde 1000 pasos hasta 20000 pasos, dependiendo de las condiciones iniciales empleadas.

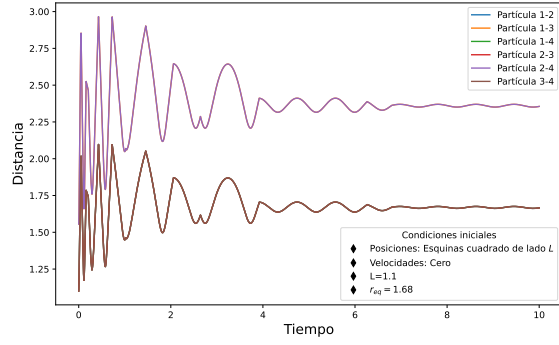
III. RESULTADOS

Los resultados los dividimos en los cuatro casos discutidos en el marco teórico.

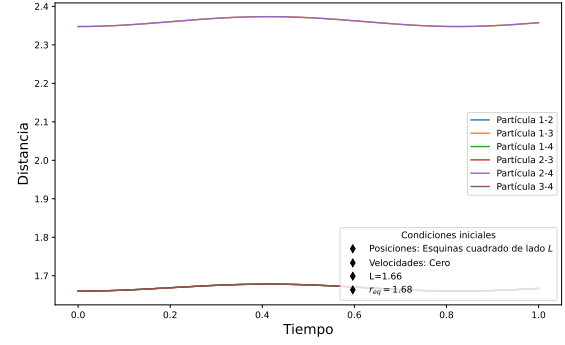
A. Caso 1

Para este primer caso, de velocidades cero y posiciones en las esquinas de un cuadrado, obtenemos tres resultados relevantes.

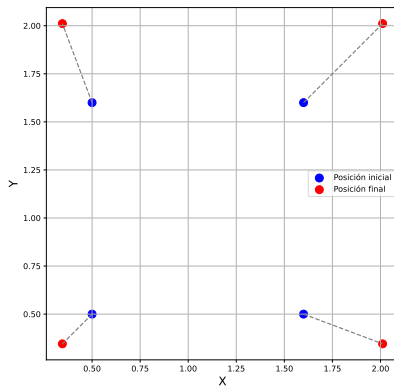
La primera situación es la que se ilustra la figura 2 en la cual consideramos a $L = 1.1 < r_{eq}$. En la figura 2a vemos como el comportamiento al inicio es caótico, sin embargo, con el paso del tiempo las distancias entre partículas se vuelven casi constantes lo cual indica que alcanzan un equilibrio. En la figura 2b justamente observamos la posición final de las partículas (en rojo) que han tendido a alejarse de su posición inicial. Esto era de esperarse puesto que la distancia entre ellas inicialmente fue, en promedio, mejor que la del equilibrio. Esto dio lugar a una repulsión entre ellas tal como lo predice el potencial de Lennard-Jones. Es importante mencionar que en las gráficas se observan únicamente dos curvas debido a la simetría del problema, las demás curvas quedan superpuestas. Las dos curvas que se muestran pertenecen a las partículas que están a distancia L (la inferior) y las partículas que están a distancia $\sqrt{2}L$ (la superior). Esto debido a que la partícula 1 y 3 (así como también la 2 y 4) se encuentran a una distancia diagonal que es mayor que el de las demás (figura 1).



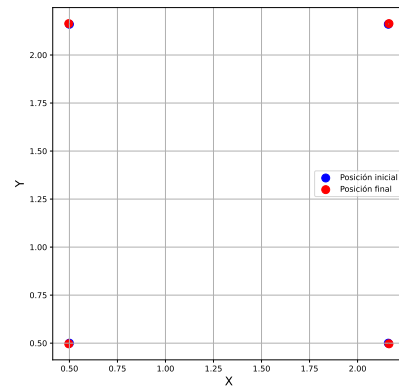
(a) Distancias relativas entre partículas a lo largo del tiempo. Dada la simetría en las condiciones iniciales existen gráficos superpuestos.



(a) Distancias relativas entre partículas a lo largo del tiempo. Dada la simetría en las condiciones iniciales existen gráficos superpuestos.



(b) Comparación entre posiciones iniciales y finales de las partículas luego de alcanzar el equilibrio. La animación se puede observar [aquí](#).



(b) Comparación entre posiciones iniciales y finales de las partículas que se mantuvieron en equilibrio. La animación se puede observar [aquí](#).

Figura 2: Resultados para partículas separados una distancia menor a la distancia de equilibrio.

En la siguiente situación, figura 3, utilizamos $L = 1.66 \approx r_{eq}$. La gráficas de 3a y 3b muestran que las partículas permanecen en equilibrio en esas posiciones. Este comportamiento también es el esperado dado que colocamos las partículas a una distancia tal que la fuerza entre ellas (ecuación 3) sea aproximadamente cero.

Por último, analizamos la situación en la que $L = 1.76 > r_{eq}$, figura 4. La gráfica 4a presenta oscilaciones en las distancias. Esto se traduce a que las partículas se están alejando y acercando unas a otras de manera sincronizada, figura 4b. Esto también a causa de la simetría en las condiciones iniciales. Además, este es un comportamiento que se anticipaba ya que al ser $L > r_{eq}$ nos encontramos en el dominio en que la fuerza de interacción entre partículas es atractiva. De este modo las partículas se acercan entre sí para luego alejarse nuevamente por su pase al dominio repulsivo y oscilan alrededor del punto de equilibrio.

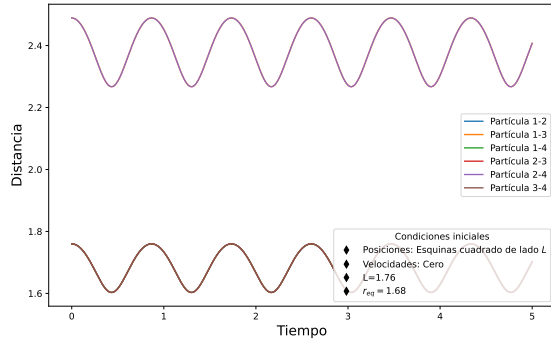
Figura 3: Resultados para partículas separados una distancia muy cercana a la distancia de equilibrio.

En las tres situaciones las curvas están superpuestas dado que las partículas se encuentran en una configuración simétrica. Únicamente quedan dos curvas características, la de distancias grandes corresponden a las distancias entre partículas en diagonal mientras que las distancias más cortas corresponden a las distancias entre partículas adyacentes.

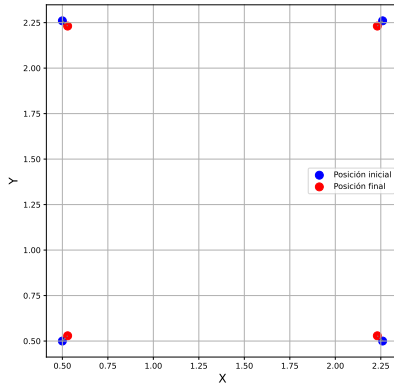
B. Caso 2

Ahora consideramos las velocidades iniciales de las partículas distintas de cero, aleatorias. Sin embargo, las posiciones siguen siendo en las esquinas de un cuadrado de lado L . Esto hace que la configuración ya no sea simétrica como los casos anteriores, debido a esto observamos en 5a que ahora las curvas ya no están siguiendo el mismo comportamiento. Cambian de forma independiente. Inician con un comportamiento caótico, sin embargo, concluyen en un equilibrio. Las distancias relativas entre partículas varían varían alrededor del mismo valor a excepción de la distancia entre la partícula 1 y

3 que posee una separación mayor que sirve para mantener el equilibrio, figura 5b.



(a) Distancias relativas entre partículas a lo largo del tiempo. Dada la simetría en las condiciones iniciales existen gráficos superpuestos.



(b) Comparación entre posiciones iniciales y finales de las partículas al cortar la simulación. La animación se puede observar [aquí](#).

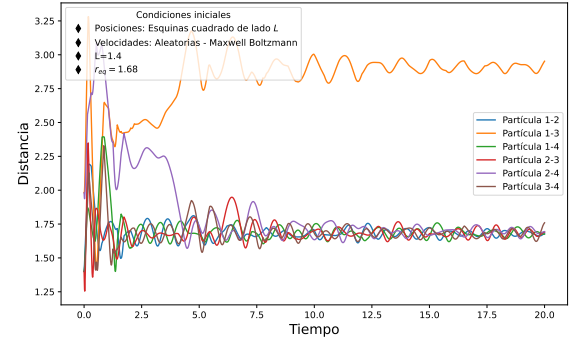
Figura 4: Resultados para partículas separados una distancia mayor a la distancia de equilibrio.

C. Caso 3

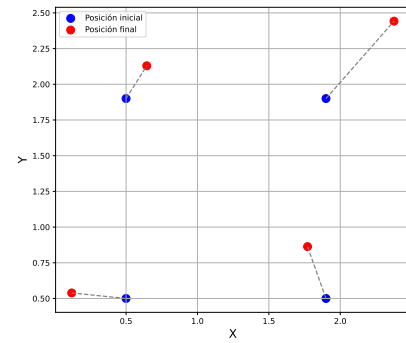
Ahora las velocidades iniciales son cero, pero las posiciones de las partículas son aleatorias. Esto introduce también un comportamiento caótico al inicio, figura 6a, que posteriormente se estabiliza a un punto de equilibrio. Las posiciones finales de equilibrio se muestran en la figura 6b.

D. Caso 4

En esta última situación poseemos tanto velocidades como posiciones aleatorias. Este caso de un tiempo mayor para alcanzar el equilibrio, el comportamiento inicial es mucho



(a) Distancias relativas entre partículas a lo largo del tiempo.



(b) Comparación entre posiciones iniciales y finales de las partículas luego de alcanzar un equilibrio.

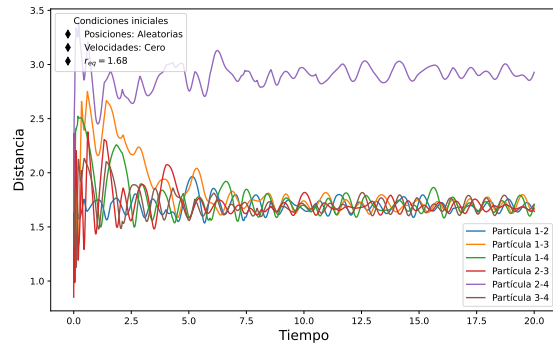
Figura 5: Resultados para partículas con velocidades iniciales aleatorias y posiciones iniciales en las esquinas de un cuadrado de lado L . La animación se puede observar [aquí](#).

más caótico, figura 7a. Sin embargo, luego de esperar el tiempo necesario, las distancias relativas entre partículas dejan de variar significativamente y se alcanza un equilibrio.

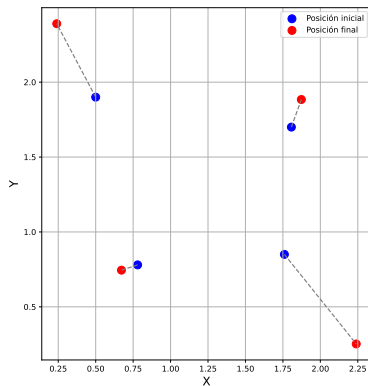
IV. CONCLUSIONES

A lo largo de este trabajo hemos analizado diferentes configuraciones de partículas coloidales sometidas a un potencial de Lennard-Jones con $\varepsilon = 1$ y $\sigma = 1.5$. Para las simulaciones empleamos el método de Verlet para integrar las ecuaciones. Dichas simulaciones nos permitieron observar el comportamiento de las partículas ante distintas condiciones iniciales incluyendo posiciones y velocidades tanto aleatorias como organizadas.

En el primer caso las partículas fueron ubicadas en las esquinas de un cuadrado y con velocidades iniciales cero, se verificó que el sistema alcanzó el equilibrio justamente cuando la distancia entre partículas se aproximó al valor de equilibrio



(a) Distancias relativas entre partículas a lo largo del tiempo.



(b) Comparación entre posiciones iniciales y finales de las partículas luego de alcanzar un equilibrio.

Figura 6: Resultados para partículas con velocidades iniciales cero y posiciones iniciales aleatorias. La animación se puede observar [aquí](#).

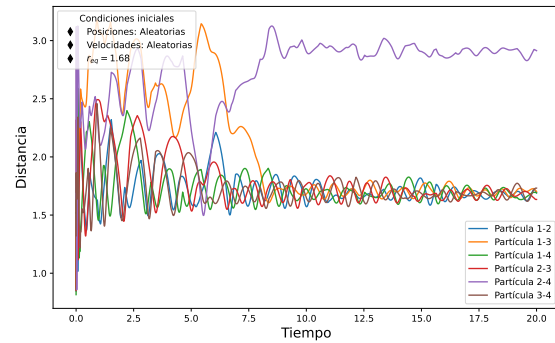
del potencial de Lennard-Jones. Este resultado es consistente con la naturaleza del potencial que nos dice que la fuerza se anula en el punto de equilibrio.

En el siguiente caso, en que las velocidades fueron aleatorias, se observó un comportamiento caótico al inicio que fue estabilizándose a un punto de equilibrio que corresponde a una distancia promedio entre partículas cercana a r_{eq} . Los mismos resultados se consiguieron con posiciones iniciales aleatorias.

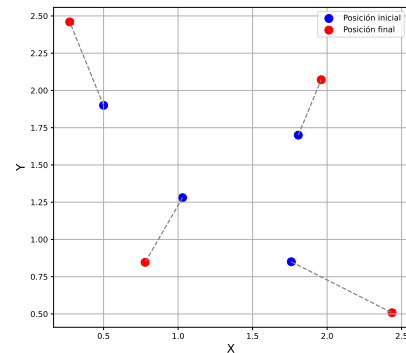
Después de un tiempo suficiente, todas las configuraciones alcanzaron un equilibrio en el cual las partículas forma una

especie de paralelogramo dado que en esta configuración todas las partículas se encuentran aproximadamente a la misma distancia a excepción de la diagonal más grande del mismo. Justamente los gráficos muestran al menos una distancia entre dos partículas mayor que las demás.

Estos resultados reflejan el comportamiento ya anticipado que se había discutido sobre el potencial de Lennard-Jones. Las partículas a distancias cercanas se comportan de manera repulsiva mientras que para distancias cercana se atraen. Como consecuencia, tienden a alcanzar un equilibrio con la combi-



(a) Distancias relativas entre partículas a lo largo del tiempo.



(b) Comparación entre posiciones iniciales y finales de las partículas luego de alcanzar un equilibrio.

Figura 7: Resultados para partículas con velocidades iniciales aleatorias y posiciones iniciales aleatorias. La animación se puede observar [aquí](#).

nación de estos dos comportamientos.

[1] Wikipedia contributors. Coloide — wikipedia, la enciclopedia libre, 2024. Accedido: 24 de noviembre de 2024.

[2] Wikipedia contributors. Potencial de lennard-jones — wikipedia, la enciclopedia libre, 2024. Accedido: 23 de noviembre de 2024.