

Potenciales de depleción extremadamente atractivos en mezclas de esferas blandas

Y. Martínez-Ratón^{1*}, G. Cinacchi², E. Velasco³, G. Navascués³, L. Mederos⁴, A. Tani²

¹*GISC, Departamento de Matemáticas, Universidad Carlos III, 28911 Leganés (Madrid)*

²*Dipartimento di Chimica, Università di Pisa, I-56126 Pisa, Italia*

³*Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid*

⁴*Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC, E-28049 Madrid*

En esta contribución consideramos mezclas de partículas coloidales esféricas en un solvente de esferas más pequeñas, y calculamos la interacción de depleción entre dos esferas coloidales mediada por el fluido de esferas pequeñas. Se han utilizado simulaciones por ordenador de dinámica molecular y diferentes teorías, cuya validez se ha contrastado con las simulaciones¹.

El modelo de interacción considerado es un potencial tipo WCA repulsivo, cuyos parámetros variamos a voluntad con objeto de controlar el grado de *dureza* de las interacciones. Hemos utilizado teorías basadas en desarrollos del virial, a segundo y tercer orden en la densidad de las esferas pequeñas, prestando especial atención al límite en el que la interacción es de tipo esfera dura, y a las consecuencias de tener interacciones cada vez más blandas. Asimismo, hemos estudiado el efecto de la densidad del solvente y de la temperatura.

En las simulaciones las esferas coloidales se fijan a una cierta distancia r (como si tuviesen masa infinita); éstas actúan sobre las esferas pequeñas a través de un potencial externo. La fuerza de depleción se calcula a partir del momento transferido a las esferas coloidales vía un potencial de fuerza media. Integrando esta fuerza se obtiene directamente el potencial de depleción. Otras técnicas de calcular esta fuerza indirecta conducen a los mismos resultados. Los sistemas estudiados contienen ~ 4000 esferas pequeñas a altas densidades (densidades de líquido), lo que permite estudiar el comportamiento oscilatorio del potencial de depleción a distancias largas.

Nuestros resultados indican que, sorprendentemente, a medida que las interacciones *directas* entre las partículas se hacen más blandas, las interacciones de depleción (*indirectas*) entre las partículas coloidales se vuelven significativamente más atractivas que en el caso de esferas duras (Fig. 1). Este efecto podría dar lugar a comportamientos de fase, en el fluido coloidal denso, muy diferentes de los usuales, así como a propiedades dinámicas singulares. Como complemento a estos resultados, hemos utilizado un esquema perturbativo con objeto de predecir el diagrama de fases que se sigue de estas interacciones, utilizando relaciones de tamaño entre las partículas coloidales y las partículas de solvente de 5:1. El diagrama incluye la transición fluido-sólido usual pero, en el caso de esferas blandas, la transición fluido-fluido, que no existe en mezclas de esferas duras, es metaestable, aunque se encuentra muy próxima a ser estable con respecto a la coexistencia directa fluido-sólido. Estos resultados pueden implicar que, para partículas coloidales suficientemente blandas, la transición fluido-fluido pueda llegar a ser estable.

Actualmente los estudios se centran en considerar potenciales más blandos, relaciones de tamaño entre las esferas más extremas, y en el análisis de formas geométricas anisótropas para las partículas coloidales. Se mostrarán algunos resultados preliminares de estos estudios.

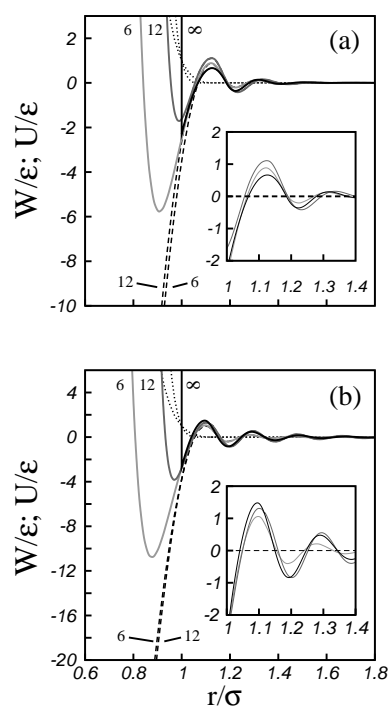


Figura 1. Líneas discontinuas: potenciales de depleción obtenidos en las simulaciones para potenciales WCA con potencias inversas 12 – 6 (indicada con un 6) y 24 – 12 (indicada con un 12). Líneas punteadas: potenciales directos para los anteriores potenciales. Líneas continuas: potenciales efectivos totales para los casos anteriores y para esferas duras, con líneas en gris de distinta densidad (claro, medio y oscuro para 12 – 6, 24 – 12 y esfera dura, respectivamente). (a) es para densidad (en unidades del σ del WCA) de $\rho^* = 0.680$; (b) es para $\rho^* = 0.750$.

* yuri@math.uc3m.es

¹ G. Cinacchi, Yuri Martínez-Ratón, Luis Mederos, Guillermo Navascués, Alessandro Tani y Enrique Velasco, *J. Chem. Phys.* **127**, 214501 (2007).