

# La leyenda de la bella y la bestia: De cómo de un modelo completamente repulsivo surge otro completamente atractivo

Luis Lafuente\* y José A. Cuesta†

Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC),  
Departamento de Matemáticas, Universidad Carlos III de Madrid,  
Avda. de la Universidad, 30, 28911 – Leganés, Madrid.

Un elemento común que encontramos en las teorías clásicas del funcional de la densidad<sup>1</sup> (WDA, teoría del líquido efectivo, . . .) es que necesitan, a priori, información sobre el estado uniforme del fluido (en general, la energía libre y las correlaciones), ya que en esencia lo que hacen es transformar funciones de la densidad en funcionales. Debido a que el sistema mejor conocido es el de esferas duras, todas estas teorías se han centrado, en sus orígenes, en obtener un funcional de la densidad para dicho sistema. De hecho, la predicción de la cristalización de este fluido se ha utilizado para validar dichas teorías. La extensión a sistemas más realistas (incluyendo una parte atractiva en la interacción), en general, se ha realizado a través de métodos perturbativos, utilizando el modelo de esferas duras como sistema de referencia. La falta de expresiones analíticas para estos sistemas ha sido una de las causas por las que su descripción no se ha podido incorporar de manera natural en las teorías originales.

En oposición a estas teorías semifenomenológicas, encontramos la teoría de Rosenfeld de medidas fundamentales,<sup>2</sup> formulada originalmente para el fluido de esferas duras y basada en las características básicas que definen la geometría de las partículas del sistema. Una de las novedades que introdujo esta teoría fue que era capaz de predecir, en lugar de utilizar en su construcción, las propiedades del fluido uniforme. En concreto, unificó la aproximación de la partícula escalada y la aproximación de Percus-Yevick. Su carácter geométrico le aporta un ingrediente esencial que la hace particularmente adecuada para el estudio de sistemas en situaciones de alto confinamiento: la reducción dimensional. Esta propiedad consiste en que el funcional  $d$ -dimensional se reduce al  $(d - 1)$ -dimensional cuando el perfil de densidad tiene su soporte en un subconjunto de dimensión  $d - 1$ . Esta característica es exclusiva de los funcionales de medidas fundamentales, y es tan esencial que se ha propuesto como una alternativa para construirlos.<sup>3-5</sup> A pesar de que se ha extendido (con distintos grados de satisfacción) a sistemas con simetría no esférica, sistemas no aditivos y sistemas con repulsión blanda, no se ha conseguido formular de manera natural para sistemas con parte atractiva en el potencial de interacción.

En la última década se ha alcanzado un nivel de comprensión elevado de los sistemas con interacción dura. Uno de los resultados más importantes ha sido el descubrimiento de que una mezcla de cuerpos duros puede separarse en dos fases por un efecto puramente entrópico. El mecanismo que in-

duce dicha transición se denomina *depleción*. Este fenómeno consiste en una atracción efectiva entre las partículas de mayor tamaño que implica el aumento del volumen libre disponible para las partículas pequeñas, debido al solapamiento de los volúmenes que las grandes excluyen a éstas. Frenkel y Louis<sup>6</sup> demostraron cómo una mezcla determinada de partículas duras podía transformarse en un modelo de Ising ferromagnético, de forma que la coexistencia líquido-vapor se traduce en la separación del sistema en dos fases, una rica en un tipo de partículas y otra rica en el otro. (Este modelo ya había sido utilizado por Widom<sup>7</sup> en otro contexto).

En este trabajo, presentamos cómo gracias a la teoría del funcional de la densidad es posible transformar el modelo discreto de cubos duros paralelos (tridimensional), completamente repulsivo, en un modelo de Ising ferromagnético (bidimensional), completamente atractivo. De esta manera, el conocimiento de un funcional de la densidad para el sistema de cubos implica el conocimiento de un funcional para el modelo de Ising, que constituye uno de los modelos más sencillos con interacción atractiva. El hecho de disponer de un funcional de medidas fundamentales para el sistema discreto de los cubos,<sup>5</sup> junto con que la reducción dimensional constituye un ingrediente fundamental en la transformación de un sistema en el otro, nos permite hallar un funcional de medidas fundamentales para el modelo de Ising. Entre las propiedades de este nuevo funcional caben destacar: (i) reduce al funcional exacto unidimensional, y (ii) en el límite uniforme recupera la aproximación de Bethe-Peierls. La generalización a dimensiones arbitrarias es directa.

Este resultado constituye un primer paso en la construcción de una teoría de primeros principios capaz de incorporar sistemas con interacción atractiva de manera natural.

---

\* llafuent@math.uc3m.es

† cuesta@math.ucm3m.es

<sup>1</sup> R. Evans, in *Fundamental of Inhomogeneous Fluids*, ed. D. Henderson, Marcel Dekker (New York), Cap. 3 (1992).

<sup>2</sup> Y. Rosenfeld, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 980 (1989).

<sup>3</sup> P. Tarazona y Y. Rosenfeld, *Phys. Rev. E* **55**, R4873 (1997).

<sup>4</sup> J. A. Cuesta y Y. Martínez-Ratón, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3681 (1997).

<sup>5</sup> L. Lafuente y J. A. Cuesta, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 12079 (2002).

<sup>6</sup> D. Frenkel y A. A. Louis, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3363 (1992)

<sup>7</sup> B. Widom, *J. Chem. Phys.* **46**, 3324 (1967).