

## Aplicación del DDF al arrastre de partículas coloidales

F. Penna<sup>1</sup>, J. Dzubiella<sup>2</sup> y P. Tarazona<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid, Spain

<sup>2</sup> University Chemical Laboratory, Lensfield Road, Cambridge CB2 1EW, United Kingdom

El Funcional dinámico de la densidad (DDF) es una extensión del Formalismo del Funcional de la densidad (DF) a sistemas de no equilibrio<sup>1</sup>, que permite el estudio de los procesos de difusión que tienen lugar en sistemas que siguen una dinámica relajativa, mediante una única hipótesis: las correlaciones fuera del equilibrio están bien descritas por las correlaciones de un sistema equivalente que estuviese en equilibrio. Bajo esta hipótesis la ecuación DDF para la evolución temporal del perfil de densidad, es una ecuación determinista y cerrada, que incluye de forma exacta las contribuciones de gas ideal y potencial externo.

En este trabajo presentamos los resultados obtenidos mediante DDF en el estudio de los estados estacionarios de partículas coloidales, ideales y no ideales, sometidas a potenciales externos fuertemente dependientes del tiempo y los comparamos con simulaciones Brownianas dinámicas standard (BDS).

Considerando potenciales externos repulsivos, que se desplazan a velocidad constante ( $c$ ), a lo largo de una dirección fija del espacio (que tomaremos como el eje  $z$  sin pérdida de generalidad), con simetría axial y fuertemente picados en el origen. A  $t < 0$  tenemos un sistema infinito de partículas coloidales en equilibrio, distribuidas homogéneamente en el espacio, para sistemas en  $3D$  y a lo largo del eje  $z$ , para sistemas en  $1D$ . En  $t = 0$  perturbamos el sistema, modificando su estado de equilibrio, mediante la introducción de un potencial externo  $V_{ext}(\vec{r} - ct\hat{z})$ . El sistema evoluciona hasta alcanzar nuevamente un estado estacionario  $\rho(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r} - ct\hat{z})$ .

Intuitivamente, en  $1D$  el potencial externo actúa a modo de pistón<sup>2</sup>, produciendo una mayor acumulación de partículas en la parte precedente al movimiento, mientras que en  $3D$  podemos considerar al potencial externo como una nueva esfera dura, en general de tamaño diferente al de los demás coloides, cuya inclusión en el sistema genera interacciones dinámicas esfera dura-coloides, que modifican el perfil de densidad, hasta que un nuevo estado estacionario es alcanzado.

Hemos encontrado que, aunque como era de esperar, el comportamiento a rasgos generales es similar en sistemas  $1D$  y  $3D$ , en estos últimos se generan estructuras cualitativamente diferentes, debido a la aparición en  $3D$  de una nueva vía de escape para las moléculas: el *ro-*

*deo* del potencial externo, no presente en sistemas unidimensionales, en los que las moléculas que no siguen el movimiento del potencial externo están obligadas a atravesarlo.

La comparación entre sistemas ideales brownianos y poliméricos, sistemas no ideales, en los que se ha añadido una interacción a pares gaussiana ultra-suave (incluida en DDF mediante campo medio), ha permitido constatar como muy buena la aproximación DDF de las correlaciones dinámicas por estáticas y determinar la alta influencia de la parte cinética en la dinámica del sistema, lo que da lugar a un comportamiento poco convencional del perfil de densidad.

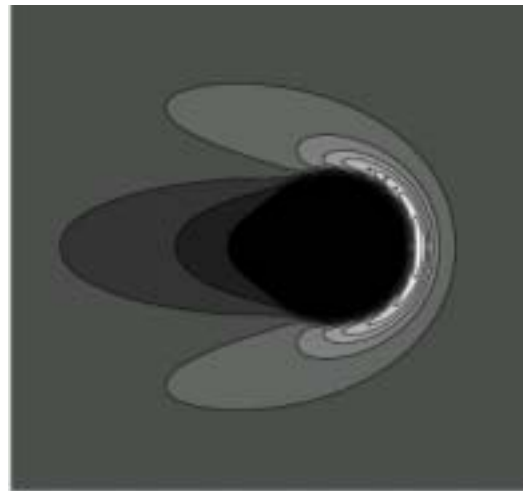


Figura 1. Perfil de densidad para un sistema ideal en  $3D$  (el negro corresponde a la densidad más baja) en coordenadas cartesianas. El potencial externo se desplaza a  $c = 5$  y viene dado por  $V_{ext} = 10e^{-r^6}$  en las unidades naturales del problema.

<sup>1</sup> U. Marini Bettolo Marconi y P. Tarazona, *J. Chem. Phys.* **110**, (1999).

<sup>2</sup> F. Penna y P. Tarazona por aparecer en *J. Chem. Phys.* julio 2003.