

## ESTRUCTURA ORIENTACIONAL INTRINSECA DE LA SUPERFICIE DEL AGUA

E. Chacón<sup>1</sup>, P. Tarazona<sup>2</sup> y J. Alejandro<sup>3</sup>

(1) Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid. CSIC. Cantoblanco. E-28049 Madrid. Spain

(2) Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada. Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid. Spain

(3) Departamento de Química. Universidad Autónoma Metropolitana Ittappalapa,. Apdo. Postal 55-534, 09340 México D.F. México

El estudio de la estructura superficial de la interfase líquido-vapor del agua ha sido el objetivo de muchos estudios, experimentales y computacionales, durante los últimos años. Sin embargo, en todos estos estudios las ondas capilares, fluctuaciones de origen térmico presente en todas las superficies de los fluidos, hacen que los perfiles de los parámetros de orden orientacionales se difuminen y que no podamos alcanzar una visión a escala molecular del orden orientacional de la superficie.

La Teoría de Ondas Capilares es el formalismo más común para tratar las fluctuaciones térmicas superficiales. Dicha teoría supone que existe un perfil intrínseco que describe la estructura superficial inherente del líquido, esto es, sin el efecto difuminador de las ondas capilares. Los perfiles medios que usualmente se obtienen en las simulaciones numéricas serían la convolución de estos perfiles intrínsecos con una gaussiana que incorporaría el efecto de las ondas capilares superficiales.

El problema era que no existía ninguna receta microscópica para evaluar los perfiles intrínsecos. Recientemente nuestro grupo ha desarrollado un método [1,2] que aplicado sobre las configuraciones de las simulaciones numéricas nos permite obtener diferentes perfiles intrínsecos orientacionales. Con este procedimiento hemos analizado el orden orientacional superficial del agua a escala molecular, con resultados sorprendentes. Hemos encontrado que solamente las moléculas de la capa más externa poseen una orientación preferente. La mayoría de estas moléculas tienen el dipolo perpendicular al eje normal a la superficie y el plano molecular paralelo a la misma. Sin embargo, también existe una débil orientación dipolar fuertemente acoplada a la topología de las fluctuaciones térmicas de la superficie. En los sitios donde la superficie tiene curvatura negativa el dipolo del agua es paralelo al eje normal a la superficie y apunta hacia el lado vapor, mientras que en los sitios con curvatura positiva apunta hacia el lado líquido.

[1] E. Chacón y P. Tarazona. Phys. Rev. Lett. **91**, 166103 (2003).

[2] P. Tarazona y E. Chacón. Phys. Rev. B **70**, 235407 (2004).