

## ESTRUCTURA MICROSCÓPICA DE FLUIDOS DE ESFERAS DURAS EN NANOPOROS: EFECTOS DE COLECTIVIDAD Y DE *CROSSOVER* DIMENSIONAL

J. A. White<sup>1</sup>, F.L. Román<sup>1,2</sup>, A. González<sup>1</sup> y S. Velasco<sup>1</sup>

(1) Departamento de Física Aplicada, Universidad de Salamanca  
37008 Salamanca.

(2) Departamento de Física Aplicada, Escuela Politécnica Superior de Zamora,  
Universidad de Salamanca, 49022 Zamora

En este trabajo se presentan resultados de simulación y de teoría de funcionales de la densidad para el perfil de densidad inhomogénea de un fluido de esferas duras confinado en un poro de dimensiones comparables al tamaño de las partículas. Para sistemas con muy pocas partículas se obtienen notables diferencias entre los resultados de diferentes colectividades de la Mecánica Estadística. Las diferencias entre colectividades son especialmente apreciables en situaciones casi-cerodimensionales o casi-unidimensionales que aparecen en geometrías esféricas o cilíndricas para alto empaquetamiento. Se observa que una correcta descripción de estas situaciones requiere el uso de teorías de funcionales de la densidad basadas en las medidas fundamentales de la esfera construidas de manera que dan lugar a un correcto *crossover* dimensional.

[1] P. Tarazona, Phys. Rev. Lett. **84**, 694 (2000).

[2] J. A. White, A. González, F. L. Román y S. Velasco, Phys. Rev. Lett. **84**, 1220 (2000).

[3] F.L. Román, A. González, J.A. White y S. Velasco, J. Chem. Phys. **118** 7930 (2003).

[4] A. González, J. A. White, F. L. Román y S. Velasco, J. Chem. Phys. **120**, 10634 (2004).

[5] [3] F.L. Román, J.A. White, A. González y S. Velasco, J. Chem. Phys. **124** 154708 (2006).