

Potencial de vaciamiento en sistemas diluidos

Santos Bravo Yuste^{(1)*}, Andrés Santos^{(1)†} y Mariano López de Haro^{(2)‡}

⁽¹⁾Departamento de Física, Universidad de Extremadura, 06071 Badajoz

⁽²⁾Centro de Investigación en Energía, Univ. Nacional Autónoma de México (U.N.A.M.), Temixco, Morelos 62580, México

Una mezcla de esferas duras constituye un modelo clásico de fluidos. Una propiedad notable de este sistema, en particular cuando el tamaño de sus componentes es muy dispar, es la presencia de fuerzas de vaciamiento (“depletion forces”): cuando la separación entre dos esferas grandes es menor que el diámetro de las esferas pequeñas, estas últimas no pueden interponerse entre aquéllas, de modo que se produce un desequilibrio, una presión local inducida por las esferas pequeñas que tiende a acercar las dos esferas grandes. Este fenómeno ha sido abordado mediante teorías, aproximaciones y técnicas muy diversas. Aquí presentamos resultados obtenidos mediante la “Rational Function Approximation” (RFA). Esta aproximación proporciona expresiones analíticas de la estructura de los líquidos similares a las de la teoría clásica de Percus-Yevick (PY), pero con la ventaja de que generalmente conduce a una mejor descripción de los fluidos de esferas duras^{1–3}.

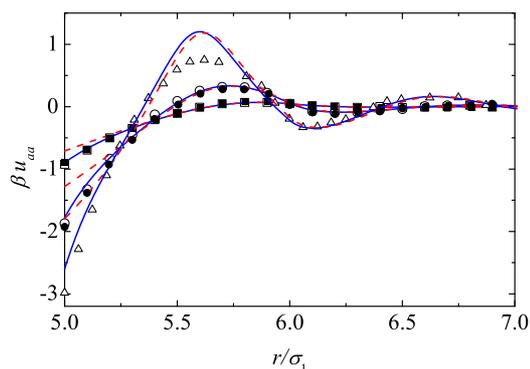


Figura 1. Potencial de vaciamiento entre dos esferas grandes iguales inmersas en un baño de esferas duras pequeñas. La razón de diámetros entre la esferas grandes y pequeñas es 5. El diámetro de la esfera pequeña σ_1 es la unidad de longitud. Se muestran resultados para tres valores distintos de la fracción η del volumen ocupado por las esferas del baño. Los símbolos son resultados de simulación ($\eta = 0.1$, círculos; $\eta = 0.2$, cuadrados; $\eta = 0.3$, triángulos), la línea continua son nuestros resultados (RFA), y la línea quebrada son los de la teoría de Percus-Yevick.

En esta comunicación presentamos resultados (i) del potencial de vaciamiento entre dos esferas grandes que se encuentran rodeadas por un fluido monocomponente de esferas duras pequeñas y, además, (ii) de la fuerza de vaciamiento entre una pared y una esfera grande que está rodeada por un fluido monocomponente de esferas duras pequeñas. Estos resultados se comparan con los predichos por la teoría de PY. En ambos casos, ni la esfera

en presencia de la pared ni la pareja de esferas interactúan con otras moléculas de la misma especie (límite de dilución infinita). Debe notarse que nuestra teoría es válida cuando el fluido solvente esta formado por una mezcla de esferas duras (aunque no disponemos de resultados de simulación para estos casos). En las figuras mostramos algunos resultados representativos. Se observa que la RFA conduce a resultados mejores que los de PY, especialmente cuando las distancias son pequeñas. Finalmente, hay que señalar que para condiciones más extremas (razón muy grande entre los diámetros de las esferas grandes y pequeñas y/o densidades del solvente grandes) tanto la RFA como la de PY conducen a resultados claramente deficientes.

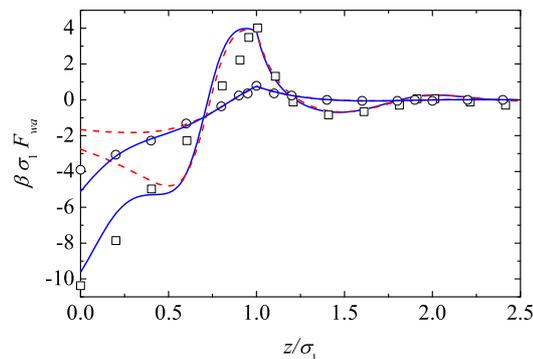


Figura 2. Fuerza de vaciamiento entre una pared y una esfera grande inmersa en un baño de esferas duras pequeñas. La razón de diámetros entre la esfera grande y las esferas pequeñas es 5. El diámetro de la esfera pequeña σ_1 es la unidad de longitud. Los símbolos son resultados de simulación ($\eta = 0.1$, círculos; $\eta = 0.2$, cuadrados), la línea continua son nuestros resultados (RFA), y la línea quebrada los de la teoría de Percus-Yevick.

* santos@unex.es

† andres@unex.es

‡ malopez@servidor.unam.mx

¹ S. B. Yuste, A. Santos, and M. López de Haro, *J. Chem. Phys.* **108**, 3683 (1998)

² M. López de Haro, S. B. Yuste, A. Santos, “Alternative Approaches to the Equilibrium Properties of Hard-Sphere Liquids,” en *Playing with Marbles: Theory and Simulation of Hard-Sphere Fluids and Related Systems*, editado por A. Mulero (Springer, Berlin, pendiente de publicación); arXiv:0704.0157 [cond-mat.stat-mech].

³ Al. Malijevský, S. B. Yuste, A. Santos, and M. López de Haro, *Phys. Rev. E* **75**, 061201 (2007).