Funcional de medidas fundamentales para mezclas de cilindros duros paralelos

J. A. Capitán*, Y. Martínez-Ratón† y J. A. Cuesta‡
Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC)
Departamento de Matemáticas, Universidad Carlos III de Madrid
Avda. de la Universidad, 30. 28911 Leganés Madrid

La Teoría de Medidas Fundamentales (FMT) puede considerarse de las más sofisticadas dentro de las aproximaciones en el marco de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), que da sus mejores resultados en el estudio de fluidos inhomogéneos en situaciones de alto confinamiento, y por tanto describe correctamente las fases estructuradas. Tarazona y Rosenfeld[1] mostraron que el buen comportamiento del funcional en situaciones de confinamiento (la correcta "reducción dimensional") junto con los funcionales cero-dimensional y uni-dimensional exactos son los ingredientes necesarios para determinar los funcionales de medidas fundamentales (FMF) para los modelos de discos (HD) y esferas duras (HS). No obstante, aunque las fases confinadas son descritas con muy buen grado de aproximación, los funcionales recuperan el resultado de la Teoría de Partícula Escalada (SPT) para la presión de la fase uniforme. Desafortunadamente, tanto las versiones para HD y HS como otras múltiples extensiones de la teoría a partículas anisótropas, son bastante rígidas en el sentido de que cualquier intento por mejorar el resultado para el fluido uniforme hace que se pierdan las propiedades de correcta reducción dimensional del funcional.

Los primeros ejemplos de FMF's para partículas anisótropas fueron el funcional para cubos y paralelepípedos paralelos[2]. En dichos trabajos se probó que el FMF se puede determinar completamente aplicando un operador diferencial sobre el funcional cero-dimensional. También se demostró que si se considera un modelo en dimensión d cuyo FMF es conocido, para obtener el FMF para partículas paralelas en la dirección ortogonal al espacio d-dimensional basta con aplicar dicho opera-dor diferencial al FMF. Siguiendo esa idea, en esta contribución presentamos el funcional para cilindros duros paralelos, en el caso general de una mezcla de diferentes radios R_i y diferentes longitudes L_i.

En primer lugar, hemos extendido el FMF obtenido por Tarazona y Rosenfeld[1] para el sistema unicomponente de discos al caso de la mezcla, usando un método alternativo al formalismo de cavidades. El funcional resultante satisface la reducción dimensional al caso $1D$ y $0D$, por lo que este método de construcción es equivalente al dado por Tarazona y Rosenfeld[1], ya que este último está completamente basado en la reducción dimensional. En un segundo paso, partiendo del FMF para la mezcla de discos y usando el operador diferencial introducido por Cuesta y Martínez-Ratón[2], se obtiene de forma inmediata el FMF para la mezcla de cilindros paralelos con interacción de cuerpo duro (PHCL), que por construcción garantiza la correcta reducción dimensional de $3D$ a $2D$.

Con el fin de comprobar el poder predictivo del FMF, hemos minimizado el funcional para determinar el diagrama de fases del modelo PHCL parametrizando el perfil de densidad mediante simetrías esméctica (Sm), columnar (C) y cristalina (K). Comparamos nuestros resultados con el diagrama de fases obtenido por simulación Monte Carlo[3], resultando un acuerdo bastante bueno entre teoría y simulación, sobre todo en las predicciones de las transiciones entre las fases no uniformes (véase la FIG.1). Aunque la descripción de la FMT de la fase uniforme no es buena, los órdenes de las transiciones obtenidos son los mismos que en simulación y, principalmente, el acuerdo entre los datos para las fases no uniformes (sobre todo, la sólida) es destacable.

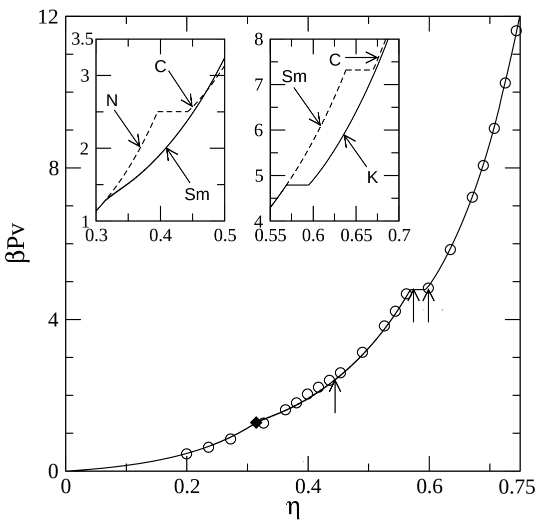

Figura 1. Ecuación de estado para todas las fases estables: nemática (hasta la bifurcación indicada con el rombo), esméctica (entre el rombo y la transición Sm-K), y la fase cristalina. Los círculos abiertos son los puntos de simulación dados por Veerman y Frenkel[3]. Las flechas indican las transiciones N-Sm y Sm-K obtenidas mediante simulaciones. En los insets aparece la ecuación de estado para la fase columnar, que resulta ser metaestable.

* jcapitan@math.uc3m.es
† yuri@math.uc3m.es
‡ cuesta@math.uc3m.es

[1] P. Tarazona and Y. Rosenfeld, Phys. Rev. E. **55**, R4873 (1997).
[2] J. A. Cuesta and Y. Martínez-Ratón, Phys. Rev. Lett **78**, 3681 (1997).
[3] J. A. C. Veerman and D. Frenkel, Phys. Rev. A. **43**, 4334 (1991).