

Difusión en la interfaz líquido-vapor

Daniel Duque^{*a}, Pedro Tarazona^a y Enrique Chacón^b

^a *Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada
Universidad Autónoma de Madrid*

Francisco Tomás y Valiente 6, 28049 Madrid

^b *Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid*

Consejo Superior de Investigaciones Científicas

E-28049 Madrid, Spain.

Hace poco se ha desarrollado el método de *muestreo intrínseco* con el objeto de obtener, a partir de una simulación molecular, la estructura intrínseca de una interfaz¹. Esta estructura se presupone en la teoría clásica de ondas capilares, pero los detalles particulares no importan. Sin embargo, es justamente la estructura intrínseca la que proporciona la más detallada información estructural a nivel microscópico.

Nos hemos propuesto estudiar procesos dinámicos en la superficie líquido-vapor, dado que este método proporciona una definición operacional de las moléculas que están “en” la interfaz en cada momento. Esto hace posible el seguimiento y análisis de la dinámica de las moléculas interfaciales, proporcionando, con gran precisión, información dinámica de la interfaz.

En particular, hemos estudiado la autodifusión anisotrópica en la interfaz líquido-vapor del fluido de Lennard-Jones, separando la difusión paralela de la perpendicular. Este último proceso es algo más complicado, ya que la anchura finita de la interfaz invalida el método habitual, consistente en calcular la constante de difusión a partir de la desviación cuadrática media en función del tiempo (relación de Einstein). Nuestro enfoque consiste en modelización del proceso de la deriva, ensanche y decaimiento de un pico mediante una ecuación de Smoluchowski (ver Figura).

También hemos obtenido resultados para otros parámetros espaciales y temporales que caracterizan el proceso de difusión en este sistema; así como información detallada de la permanencia y tiempo de residencia de las moléculas en la interfaz.

Estudiamos lo general de estos resultados variando la temperatura y el tamaño del sistema; en este último caso, consideramos un modelo previo para los metales alcalinos. Un resultado interesante es que la difusión perpendicular no parece depender del tamaño del sistema, lo cual confirma su genuino carácter de propiedad intrínseca interfacial.

Nuestra conclusión principal es que, incluso si pueden calcularse coeficientes de autodifusión, en muchos casos el proceso de renovación de moléculas interfaciales (medi-

ante el cual nuevas moléculas pasan a formar parte de la interfaz y otras la abandonan) puede ser tan importante como el proceso de difusión. Por ejemplo, obtenemos que el tiempo típico que una molécula emplea en recorrer un diámetro molecular es muy similar a su tiempo de residencia en la interfaz. Referimos al *preprint*² y a la página web³, donde se pueden contemplar animaciones de la simulación.

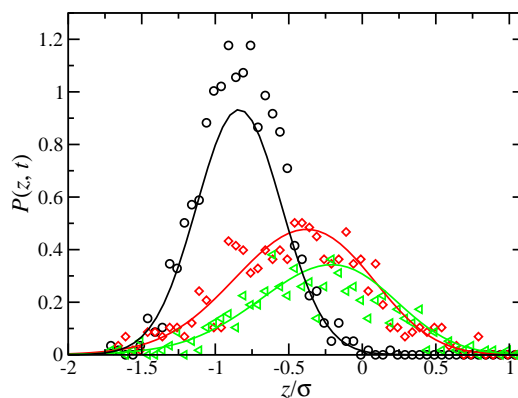


Figura 1. Difusión de un pico inicialmente en $z = -\sigma$. Símbolos: resultados de la simulación, líneas: ajuste a una ecuación de Smoluchowski. Se ve cómo se reproduce su deriva, ensanchamiento y decaimiento (este último, sólo para los tiempos más largos). Intervalos temporales, en unidades reducidas: 0.456 (negro, círculos), 2.280 (rojo, rombos) y 4.104 (verde, triángulos).

* daniel.duque@uam.es

¹ Un punto de partida sería: Enrique Chacón y Pedro Tarazona *Characterization of the intrinsic density profiles for liquid surfaces*, J. Phys.: Cond. Matter **17** (45) pp. S3493-S3498 (2005)

² Daniel Duque, Pedro Tarazona y Enrique Chacón, *Diffusion at the liquid-vapor interface*. Enviado a J. Chem. Phys. Preprint: <http://arxiv.org/abs/0712.1683>.

³ <http://www.uam.es/daniel.duque>