

Estructura de fluidos confinados en microcanales

A. González*, F.L. Román, J.A. White y S. Velasco

Departamento de Física Aplicada

Universidad de Salamanca

37008 Salamanca

En este trabajo se analiza la estructura que adopta un fluido de esferas duras cuando es confinado en un canal infinitamente largo de sección cuadrada y de anchura comparable al tamaño de las partículas (v. figura). Para obtener la estructura del fluido se emplean dos herramientas habituales, simulaciones Montecarlo y teorías de funcionales de la densidad (DFT).

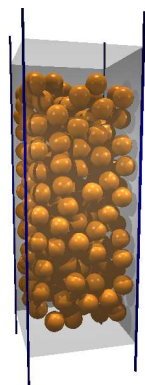


Figura 1. Esquema del problema.

Para densidades del fluido elevadas la probabilidad de encontrar una partícula a lo largo de una arista del canal

es muy alta. Eso hace que en esa región se pueda considerar como casi unidimensional (1D). Por ello, este problema representa un buen test para medir las cualidades de las DFT empleadas en el caso de reducción dimensional (*dimensional crossover*).

En concreto se van a emplear dos DFT: la teoría de medidas fundamental original (OFMT) de Rosenfeld¹ y la más compleja teoría de medidas fundamental de cavidades (CFMT) de Tarazona². En la primera, el exceso de energía libre del fluido de esferas duras se calcula a partir de una serie de promedios escalares y vectoriales de la densidad del fluido $\rho(\mathbf{r})$. Las funciones de peso empleadas en dichos promedios representan la geometría de una esfera, de ahí el nombre con que se conoce a esa teoría. Esta teoría es una de las más precisas, si bien es conocido que presenta problemas en situaciones de reducción dimensional a 0D y 1D.

Por su parte, la CFMT consigue resolver esos problemas al precio de elevar la complejidad del tratamiento al incluir promedios tensoriales.

* ags@usal.es

¹ Y. Rosenfeld, Phys. Rev. Lett. **63**, 980 (1989).

² P. Tarazona, Phys. Rev. Lett. **84**, 694 (2000), P. Tarazona, Physica A **306**, 243 (2002).