

Efectos inerciales en sistemas brownianos empujados por barreras móviles

P. Tarazona* and U. Marini Bettolo Marconi

*Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada
Universidad Autónoma de Madrid
E-28049 Madrid*

La extensión del formalismo del funcional de la densidad dinámico (DDF)¹ a partículas brownianas parcialmente amortiguadas, que conserven parte de su dinámica inercial, ha sido objeto de nuestro trabajo en los últimos años^{2,3}. Presentamos aquí el estudio de las corrientes estacionarias y las distribuciones de densidad producidas por barreras de potencial que se desplazan a velocidad constante sobre un sistema de partículas brownianas. El caso de amortiguamiento completo, cuando la velocidad de las partículas está completamente termalizada, había sido estudiado⁴ dentro del formalismo DDF. Analizamos ahora los efectos de una dinámica parcialmente inercial,

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -m\gamma \frac{dx}{dt} + f_{ext}(x - Vt) + \xi(t), \quad (1)$$

con un baño que proporciona a la vez una fricción con constante fricción γ y un ruido termalizante con

$$\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = 2\gamma m k_B T \delta(t - s), \quad (2)$$

en términos de la temperatura T y la fuerza $f_{ext}(x, t) = -\frac{d}{dx}V_{ext}(x - Vt)$ ejercida por la barrera de potencial que se desplaza a velocidad V . Las propiedades se analizan a través de la función de distribución de posición y velocidad de una partícula, $p(x, v, t)$, obteniendo las distribuciones de densidad,

$$\rho(x - Ct) = \int dv p(x, v, t), \quad (3)$$

de corriente

$$j(x - Vt) = \int dv v p(x, v, t), \quad (4)$$

de temperatura local

$$k_B \tilde{T}(x - Vt) = \int dv \frac{v^2}{m} p(x, v, t), \quad (5)$$

etc. La figura muestra un ejemplo de la estructura de densidad obtenida, con un frente de partículas arrastrado por delante de la barrera y una estela inercial, que desaparece en el límite no inercial DDF.

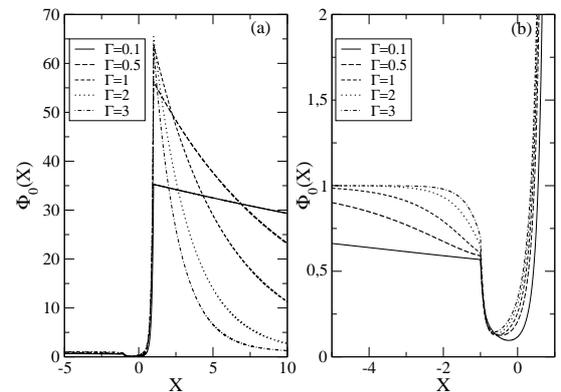


Figura 1. Estructura de la densidad en el frente y en la estela de una barrera parabólica, de altura $5k_B T$, desplazándose a una velocidad $V = 0.2$ y varios valores del amortiguamiento Γ , en las unidades naturales del problema.

* pedro.tarazona@uam.es

¹ U. Marini Bettolo Marconi and P. Tarazona, *J. Chem. Phys.* **110**, 8032 (1999)

² U. Marini Bettolo Marconi and P. Tarazona, *J. Chem. Phys.* **124**, 164901 (2006)

³ U. Marini Bettolo Marconi, P. Tarazona and F. Cecconi, *J. Chem. Phys.* **126**, 164904 (2007)

⁴ F. Penna and P. Tarazona, *J. Chem. Phys.* **119**, 1766 (2003).