



FACTOR DE ESTRUCTURA ESTÁTICA DE LÍQUIDOS DIPOLARES: APROXIMACIÓN ESFÉRICA MEDIA

Lucero Torres López¹, O. Leticia Fuchs Gómez¹, Juan Nieto Frausto¹ y HONORINA RUIZ ESTRADA¹

¹ Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. lucerolu7@gmail.com

Introducción. En este trabajo se analiza el factor de estructura estática de un fluido dipolar modelado por esferas duras con dipolo en su centro de masa. El modelo representa moléculas lineales que experimentan el fenómeno de vitrificación o cambios de fase isotropo-nemático, inducidos (ya sea) por un campo externo o por cambios en los parámetros que especifican su estado térmico, como son la densidad de número y la temperatura.

Método. El factor de estructura estática del fluido dipolar se obtiene resolviendo la ecuación de Ornstein-Zernike, usando la aproximación esférica media (MSA) que supone que afuera del cascarón duro, la función de correlación directa, c , es directamente proporcional potencial dipolo-dipolo. Wertheim [1] dio la expresión para la función c y Schilling et al. [2] obtuvieron su transformada de Fourier usando el k -frame. La solución depende de un parámetro que se obtiene numéricamente la ecuación no lineal que lo involucra.

Resultados. Consideramos la expresión explícita de R. Schilling para la función $c(k)$ y obtenemos los factores de estructura estática correspondientes, tanto para $k=0$, k pequeño y grande. Analizamos estas propiedades en el espacio de estados termodinámicos donde se ha reportado la transición vítrea de coloides dipolares [3]. Observamos que $s_{00}(k)$ y $s_{10}(k)$ corresponden a un fluido de esferas duras y $s_{11}(k)$ es máximo en $k=0$, por lo que está fuertemente influenciado por la interacción dipolo-dipolo.

Conclusiones. Las expresiones explícitas de los factores de estructura estática promedio de un fluido dipolar de la aproximación esférica media son simples de implementar en Mathematica. Los programas los puede obtener escribiendo al correo (hruizestrada@gmail.com).

1. M. S. Wertheim, J. Chem. Phys., Vol. 55, 9, 1971, pp. 4291-4298.

2. Rolf Schilling and Thomas Scheidsteger, Physical Review E, Vol. 56, 3, 1997, pp. 2932-2949.

3. L.F. Elizondo-Aguilera, P.F. Zubieta-Rico, H. Ruiz-Estrada, and O. Alarcón-Waess, Phys. Rev. E 90, 052301 (2014).

* Agradecimiento: Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Proyectos VIEP 2016.