



ESTRUCTURA ESTÁTICA POR MEDIO DEL MODELO PRIMITIVO RESTRINGIDO: UNA PROPUESTA SENCILLA BASADA EN LA APROXIMACIÓN ESFÉRICA MEDIA

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

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

Introducción. El objetivo de este trabajo es proporcionar un procedimiento sencillo para calcular los factores de estructura de equilibrio de una solución de iones de igual tamaño. Estas propiedades son relevantes en el análisis de la dinámica de equilibrio y no-equilibrio de sistemas de partículas con carga. Sharma y Sharma [1] propusieron un método perturbativo para calcular el factor de estructura del modelo de esfera dura más pozo cuadrado, donde el término perturbativo (a la solución de Percus-Yevick) es la aproximación esférica media, que relaciona a la función de correlación directa, c , de manera directa con el potencial de interacción a pares. Ellos mejoraron la c de Percus-Yevick recurriendo a la ecuación de Carnahan-Starling y la ecuación para la compresibilidad isotérmica. **Método.** Seguimos la propuesta de Sharma y Sharma, pero consideramos, en el término perturbativo, al potencial de Coulomb más una exponencial decreciente de la distancia que involucra dos parámetros de ajuste, calculamos los factores de estructura y la compresibilidad isotérmica vía la ecuación para la compresibilidad. Esta propiedad la igualamos con la obtenida vía la energía [2] y obtenemos la amplitud de la Yukawa, fijando en 10 al inverso del alcance de la exponencial.

Resultados. Damos expresiones analíticas simples para los factores de estructura con consistencia termodinámica de electrolitos simétricos en el tamaño y los comparamos con los reportados en la literatura [3].

Conclusiones. Las expresiones de la MSA con consistencia termodinámica para los factores de estructura de un electrolito son más sencillas y fáciles de implementar que aquellas que se obtienen de la solución de Blum-Hoye [2].

1. R.V. Sharma and K.C. Sharma, *Physica* 89A, 1977, pp. 213-218.

2. L. Blum and J. S. Hoye, "J. Phys Chem.", Vol. 81, 13, 1977, pp. 1311-1316.

3. L.E. Sánchez-Díaz, A. Vizcarra-Rendón and M. Medina-Noyola, *J. Chem Phys.* 132, 234506(2010).