

Estructura de un fluido de partículas rectangulares en un canal estrecho bidimensional

M. González-Pinto¹, Y. Martínez-Ratón², S. Varga³, P. Gurin³ y E. Velasco^{1,4,5}

¹Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid

²Departamento de Matemáticas y Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC),
Universidad Carlos III de Madrid, E-28911 Leganés

³Institute of Physics and Mechatronics, University of Pannonia, PO Box 158, Veszprém, H-8201 Hungría

⁴IFIMAC, Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid

⁵Instituto de Ciencia de Materiales Nicolás Cabrera, Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid

En este trabajo [1, 2] estudiamos teóricamente la estructura de fluidos de partículas bidimensionales dentro de un canal estrecho de anchura H . La forma de las partículas es rectangular, con longitud L y anchura D , y variamos el cociente entre las dos dimensiones partículas, lo que queda recogido en el parámetro L/D . El otro parámetro relevante es H/L . En general nos hemos centrado en casos con L/D y H/L pequeños, en los que aparecen fuertes efectos estructurales asociados a la conmensuración. En ciertos regímenes estos sistemas son cuasiunidimensionales, y el modelo del gas de esferas duras en una dimensión es un modelo de referencia. Sin embargo, cuando la apertura del canal permite el apilamiento de más de una partícula en la dirección transversal aparecen interesantes efectos. En nuestro modelo congelamos parcialmente el grado de orientación rotacional de las partículas, de manera que sólo son posibles orientaciones de los rectángulos a lo largo del canal o en dirección transversal al canal; para $L/D = 1$ (cuadrados) la orientación se encuentra degenerada.

Las técnicas utilizadas para analizar estos sistemas son diversas. Por un lado, hemos formulado un técnica basada en la matriz de transferencia (TMM)[3, 4], que permite obtener resultados exactos para la termodinámica del fluido en el caso cuasidimensional y también en casos en los que hay apilamiento de hasta dos partículas. Por otro lado, hemos utilizado la técnica del funcional de la densidad en su formulación de la teoría de las medidas fundamentales (FMT), a la que nuestro modelo de orientaciones restringidas se adapta perfectamente asimilando las orientaciones posibles en términos de una mezcla de dos especies (orientaciones longitudinal y transversal). Mediante la FMT hemos obtenido resultados para la termodinámica del sistema y para la función de distribución a pares de las partículas, que da cuenta de las correlaciones y ayuda en la identificación del orden. Por último, hemos realizado simulaciones por ordenador para obtener resultados cuasixactos para las funciones de distribución. El caso $L/D = 1$ de partículas cuadradas lo hemos extendido además a orientaciones en las que la diagonal de las partículas se orienta en la dirección transversal, y además estudiamos mediante FMT un intervalo de anchuras de canal más amplio con idea de analizar las posibles transiciones de fase a estructuras columnares y cristalinas a medida que se abre el canal [1].

La única fase posible para este sistema, al menos en el régimen de anchuras de canal pequeñas, es la fase fluida (sin descartar la posibilidad de cristalización o de otro tipo de estructuración global cuando el número de capas en la dirección longitudinal del canal es mayor de dos). Sin embargo, la estructura de este fluido es interesante y, en general observamos un fuerte efecto sobre las estructuras posibles de las partículas asociado a la conmensuración de las dimensiones de las partículas con la anchura del canal. Para

rectángulos la fenomenología observada se resume en la Fig. 1.

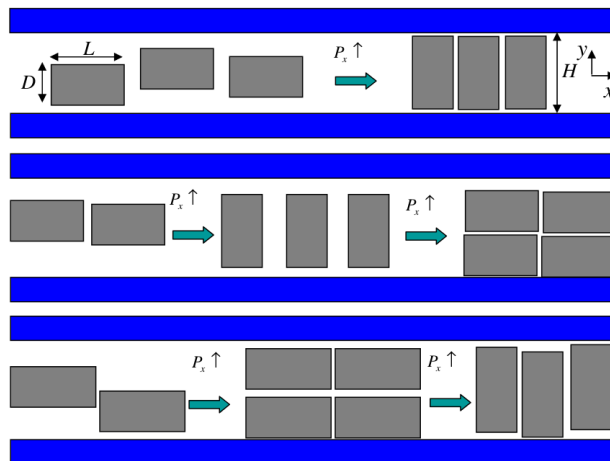


Figure 1: Tipos de fases posibles dentro de un canal estrecho. *Arriba*: Si la anchura del canal H es suficientemente pequeña, de manera que sólo quepa una partícula con orientación longitudinal, puede haber dos fases, a saber, una en la que predominan las partículas con orientación longitudinal y otra en la predominan las partículas con orientación transversal, que aparecen en este orden a medida que aumenta la densidad. El orden transversal aparece a mayor densidad, ya que es un empaquetamiento óptimo a esas densidades y proporciona el mayor empaquetamiento máximo. *Centro*: si la anchura permite el apilamiento de hasta dos partículas con orientación transversal, aparece una fase con dos filas de partículas con esa orientación a altas densidades. *Abajo*: para ciertos casos la conmensuración optimiza el orden transversal, y las dos últimas fases del caso reflejado en el panel central invierten su estabilidad.

- [1] *Phase behaviour and correlations of parallel hard squares: from highly confined to bulk systems*, M. González-Pinto, Y. Martínez-Ratón, E. Velasco, S. Varga y P. Gurin, *J. Phys. Cond. Matter* **28**, 244002 (2016).
- [2] *Ordering of hard rectangles in strong confinement*, P. Gurin, S. Varga, M. González-Pinto, Y. Martínez-Ratón y E. Velasco, *to be published*.
- [3] *Beyond the single-file fluid limit using transfer matrix method: Exact results for confined parallel hard squares*, P. Gurin y S. Varga, *J. Chem. Phys.* **142**, 224503 (2015).
- [4] *Pair correlation functions of two- and three-dimensional hard-core fluids confined into narrow pores: Exact results from transfer-matrix method*, P. Gurin y S. Varga, *J. Chem. Phys.* **139**, 244708 (2013).