

## VALORES DE CONTACTO DE LAS FUNCIONES DE CORRELACIÓN EN UN FLUIDO POLIDISPERSO DE ESFERAS DURAS

Mariano López de Haro<sup>1</sup>, Andrés Santos<sup>2</sup>, Santos B. Yuste<sup>2</sup>

(1) Centro de Investigación en Energía, UNAM, Temixco, Morelos 62580, México

(2) Departamento de Física, Universidad de Extremadura, 06071 Badajoz.

En este trabajo consideramos los valores de contacto  $g(\sigma, \sigma')$  de la función de distribución radial de un fluido de esferas duras aditivas con una distribución de tamaños arbitraria [1]. En primer lugar, introducimos una hipótesis de “universalidad” según la cual, para una fracción de empaquetamiento  $\eta$  dada,

$$g(\sigma, \sigma') = G(z(\sigma, \sigma')),$$

donde  $G$  es una función cuya forma es independiente del número de componentes y de la composición de la mezcla y

$$z(\sigma, \sigma') = \frac{2\sigma\sigma' \langle \sigma^2 \rangle}{\sigma + \sigma' \langle \sigma^3 \rangle}$$

es un parámetro adimensional, siendo  $\langle \sigma^n \rangle$  el momento  $n$ -ésimo de la distribución de tamaños. Como siguiente paso, proponemos una aproximación cúbica para la función  $G(z)$ , es decir,

$$G(z) = G_0 + G_1 z + G_2 z^2 + G_3 z^3.$$

Aplicando condiciones de consistencia en el límite monodisperso, en el límite en que una de las especies tiene tamaño nulo, así como entre dos rutas alternativas para calcular la presión del sistema en presencia de una pared dura, se obtienen explícitamente los coeficientes  $G_i$  en función de  $\eta$  y del valor de contacto de la función de distribución radial en el caso monodisperso.

Como aplicación de nuestra propuesta, comparamos los valores de contacto de la función de correlación pared-partícula con datos recientes de simulación para distintos sistemas polidispersos [2].

[1] A. Santos, S. B. Yuste, and M. López de Haro, *J. Chem. Phys.* **123**, 234512 (2005).

[2] M. Buzzacchi, I. Pagonabarraga, and N. B. Wilding, *J. Chem. Phys.* **121**, 11362 (2004).