

LA TEORÍA DE MEDIDAS FUNDAMENTALES REVISADA: EL MODELO DE HEXÁGONOS DUROS.

José A. Capitán¹, José A. Cuesta¹

(1) Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC), Departamento de Matemáticas, Universidad Carlos III de Madrid, Avenida de la Universidad 30, 28911 Leganés, Madrid
<http://www.gisc.es>

La Teoría de Medidas Fundamentales (FMT) ha demostrado ser una adecuada herramienta para el estudio de fluidos inhomogéneos en el marco de la teoría del funcional de la densidad. El funcional de energía libre se construye recuperando de manera exacta el límite cero-dimensional [1], esto es, exigiendo que reproduzca la energía libre exacta cuando el sistema queda confinado en “*cavidades*” que pueden albergar como mucho una partícula. Para el fluido monocomponente de esferas duras la FMT proporciona buenos resultados, pero en el sistema multicomponente [2] la aproximación empeora, y el efecto es más acusado cuanto mayor es la asimetría entre los radios de las partículas. Esto es debido a que no se considera un conjunto completo de cavidades, pues existen configuraciones de partículas que no recuperan el límite cero-dimensional. La presencia de estos “*casos perdidos*” es importante a la hora de dar una descripción completa del sistema bajo la aproximación de medidas fundamentales.

En este trabajo, siguiendo técnicas similares a las ya utilizadas en la FMT para modelos de red [3], hemos obtenido, para el sistema *continuo* de hexágonos duros paralelos, un funcional de medidas fundamentales que carece de “*casos perdidos*” por construcción. El funcional consta de tres términos, estando los dos primeros expresados en función de dos cavidades que no se corresponden con la geometría molecular hexagonal, a diferencia de los funcionales usuales de medidas fundamentales. Además, el tercer término involucra un conjunto infinito de cavidades, que se obtienen como una deformación continua de las dos cavidades anteriores. Y de la forma de este funcional también se concluye que para describir el sistema de discos con un funcional sin “*casos perdidos*” harían falta infinitos términos.

Como aplicación inmediate de funcional, se estudia la transición de fase de fluido uniforme a sólido, obteniendo el diagrama de fases que predice el modelo.

[1] P. Tarazona and Y. Rosenfeld, Phys. Rev. **E55**, R4873-R4876 (1997).

[2] J. A. Cuesta et al., J. Phys: Condens. Matter **14**, 11965-11980 (2002).

[3] L. Lafuente y J. A. Cuesta, J. Phys. A: Math. Gen. **38**, 7461-7482 (2004).