

Descripción en la teoría del funcional de la densidad de la estructura intrínseca de la interfase líquido-vapor

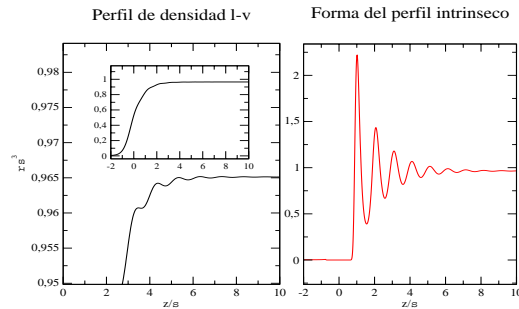
R. Checa¹, E. Chacon² and P. Tarazona¹

(1) Dep. de Física Teórica de la Materia Condensada. UAM. Madrid

(2) Instituto de Ciencias de los Materiales. CSIC. Madrid

email: ramiro.checa@uam.es

En los últimos años se han reabierto cuestiones relativas a la naturaleza de la interfase líquido-vapor motivado, en parte, por experimentos de reflectividad de rayos X sobre superficies líquidas. Tradicionalmente la descripción de la interfase se realiza mediante un perfil de densidad que varía suavemente entre las densidades de las fases uniformes en coexistencia. La teoría de ondas de capilaridad incorpora las fluctuaciones superficiales mediante una superficie intrínseca y propone la existencia de un perfil de densidad intrínseco, independiente estadísticamente de aquella. Sin embargo muchos perfiles intrínsecos son posibles para un perfil de densidad dado y las características del primero han sido objeto de intenso debate. En este punto ha sido determinante la presencia nítida de una estructuración en capas en los perfiles de densidad de sustancias con una temperatura de solidificación baja, donde tanto los experimentos como los cálculos MonteCarlo son compatibles con un perfil intrínseco fuertemente estructurado. El presente trabajo arranca en este punto e intenta interpretar correctamente los perfiles de densidad dentro de la DFT así como proponer una forma plausible para los perfiles intrínsecos.



[1] R. Checa, E. Chacón, P. Tarazona. Phys. Rev. **E70**, 061601 (2004).

[2] E. Chacón and P. Tarazona. Phys. Rev. Lett. **91**, 166103 (2003).