Ondas capilares: Qué son y situación actual.

Jose Hernández Muñoz

31 de mayo de 2016

Contexto

Contexto

Master Física de la Materica Condensada y Sistemas Biológicos.(UAM)

Contexto

Master Física de la Materica Condensada y Sistemas Biológicos.(UAM)

Contexto

Master Física de la Materica Condensada y Sistemas Biológicos.(UAM)

Pedro Tarazona (UAM).

Contexto

Master Física de la Materica Condensada y Sistemas Biológicos.(UAM)

Pedro Tarazona (UAM).

Enrique Chacón (ICMM-CSIC).

Ondas Capilares

Ondas Capilares

Fluctuaciones de la interfase líquido-vapor debidas a la Temperatura.

Ondas Capilares

Fluctuaciones de la interfase líquido-vapor debidas a la Temperatura.

Ondas Capilares

Fluctuaciones de la interfase líquido-vapor debidas a la Temperatura.

La razón de llamar ondas a estas fluctuaciones es debido a que trabajamos en el espacio de Fourier.

Función de Correlación y de Estructura

Función de Correlación y de Estructura

Llamaré función de correlación a:

$$G(z_1, z_2, \vec{q}) =< \rho_q(z_1)\rho_{-q}(z_2) > \tag{1}$$

Función de Correlación y de Estructura

Llamaré función de correlación a:

$$G(z_1, z_2, \vec{q}) =< \rho_q(z_1)\rho_{-q}(z_2) > \quad (1)$$

La función estructura se define como:

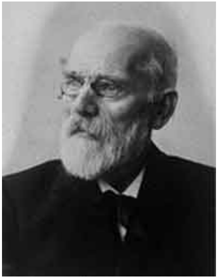
$$S_{vol}(z_1, \vec{q}) = \int dz_2 G(z_1, z_2, \vec{q}) \quad (2)$$

¿Como estudiar las ondas capilares?

¿Como estudiar las ondas capilares?

Vías principales:

- CWT, Madlestam.
- Actual DFT, Van der Waals.



Capillary Wave Theory (CWT)

La interfase líquido vapor como una superficie matemática fluctuante.

Capillary Wave Theory (CWT)

La interfase líquido vapor como una superficie matemática fluctuante.
Cuyo Hamiltoniano es:

$$\mathcal{H}_{CW}[\xi] = \sigma_0 A_0 + \frac{A_0}{2} \sum_q q^2 \sigma(q) |\xi_q|^2. \qquad (3)$$

Capillary Wave Theory (CWT)

La interfase líquido vapor como una superficie matemática fluctuante.
Cuyo Hamiltoniano es:

$$\mathcal{H}_{CW}[\xi] = \sigma_0 A_0 + \frac{A_0}{2} \sum_q q^2 \sigma(q) |\xi_q|^2. \tag{3}$$

Por el teorema de equipartición tenemos que:

$$< |\xi_q|^2 >= \frac{k_B T}{\sigma(q) q^2 A_0} \tag{4}$$

Divergencia de CWT: a que es debida?

$$< |\xi_q|^2 >= \frac{k_B T}{\sigma(q) q^2 A_0} \quad (5)$$

Las razones de la existencia de esta divergencia son:

- Nuestro modelo no tiene en cuenta la gravedad.

Divergencia de CWT: a que es debida?

$$< |\xi_q|^2 >= \frac{k_B T}{\sigma(q) q^2 A_0} \tag{5}$$

Las razones de la existencia de esta divergencia son:

- Nuestro modelo no tiene en cuenta la gravedad.
- Nuestro modelo presupone un sistema infinito.

DFT

DFT,rama de *statistical mechanics*, en funcionales de densidades. Tales que:

- Son extremales, cuando las funciones de distribución están evaluadas en el equilibrio.

DFT

DFT,rama de *statistical mechanics*, en funcionales de densidades. Tales que:

- Son extremales, cuando las funciones de distribución están evaluadas en el equilibrio.
- Su valor extremal coincide con el valor de equilibrio del potencial termodinámico en cuestión.

DFT

DFT,rama de *statistical mechanics*, en funcionales de densidades. Tales que:

- Son extremales, cuando las funciones de distribución están evaluadas en el equilibrio.
- Su valor extremal coincide con el valor de equilibrio del potencial termodinámico en cuestión.

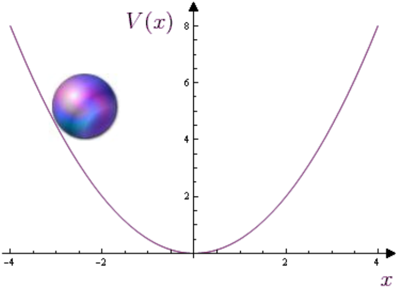
Los potenciales que solemos usar son Ω y $\mathcal{F}$.

Alejandonos del equilibrio

En equilibrio nada fluctua, son las fluctuaciones lo que te saca del equilibrio.

Alejandonos del equilibrio

En equilibrio nada fluctua, son las fluctuaciones lo que te saca del equilibrio.



Por tanto nos interesa $\frac{\delta^2\Omega}{\delta\rho(\vec{r_1})\delta\rho(\vec{r_2})}\Big|_{eq}$.

Relación $\frac{\delta^2\Omega}{\delta\rho(\vec{r_1})\delta\rho(\vec{r_2})}|_{eq}$ con $G(\vec{r_1}, \vec{r_2})$

Usamos la *función de correlación directa*, $C(z_1, z_2, \vec{q})$, que viene definida como:

$$C(z_1, z_2, \vec{q}) = \int d\vec{R_{12}} \frac{\delta^2\Omega}{\delta\rho(\vec{r_1})\delta\rho(\vec{r_2})}|_{eq} e^{i\vec{q}\vec{R_{12}}} \qquad (6)$$

Relación $\frac{\delta^2\Omega}{\delta\rho(\vec{r_1})\delta\rho(\vec{r_2})}|_{eq}$ con $G(\vec{r_1}, \vec{r_2})$

Usamos la *función de correlación directa*, $C(z_1, z_2, \vec{q})$, que viene definida como:

$$C(z_1, z_2, \vec{q}) = \int d\vec{R_{12}} \frac{\delta^2\Omega}{\delta\rho(\vec{r_1})\delta\rho(\vec{r_2})}|_{eq} e^{i\vec{q}\vec{R_{12}}} \tag{6}$$

Su relación viene dada por la ecuación de Orstein Zernicke.

$$\int dz_2 C(z_1, z_2, \vec{q}) G(z_2, z_3, \vec{q}) = \delta(z_1 - z_3) \tag{7}$$

¿Como definir un funcional?

¿Como definir un funcional?

Todo funcional realista uno se basa en:

- Su termodinámica en el bulk.

¿Como definir un funcional?

Todo funcional realista uno se basa en:

- Su termodinámica en el bulk.
- Su no localidad. (FMT,WDA,LDA,...)

¿Como definir un funcional?

Todo funcional realista uno se basa en:

- Su termodinámica en el bulk.
- Su no localidad. (FMT,WDA,LDA,...)

Un ejemplo es:

$$\Omega[\rho(\vec{r})] = \int d\vec{r}\rho(\vec{r})\left[ln(\rho(\vec{r})) - 1 + \Delta\varphi_{HS}(\bar{\rho}(\vec{r})\right] +$$

$$+\frac{1}{2}\int d\vec{r}d\vec{r'}\rho(\vec{r})\rho(\vec{r'})\mathcal{U}(|\vec{r}-\vec{r'}|) - \int d\vec{r}\mu\rho(\vec{r}),$$

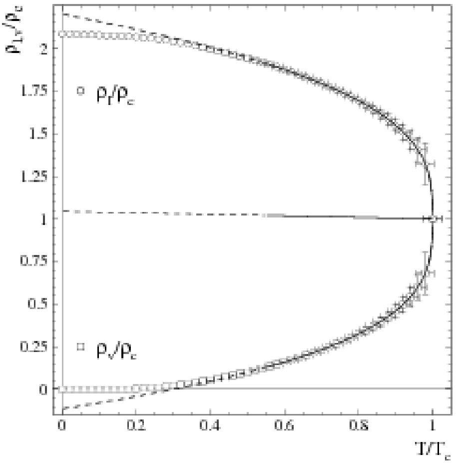
¿Es consistente tu funcional?

¿Es consistente tu funcional?

Para ello tienes que calcular las curvas de coexistencia y de estabilidad.

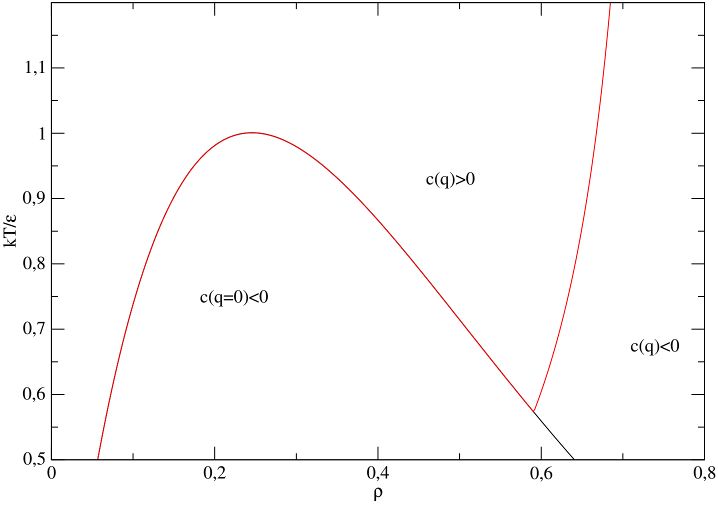
¿Es consistente tu funcional?

Para ello tienes que calcular las curvas de coexistencia y de estabilidad.



¿Es consistente tu funcional?

Para ello tienes que calcular las curvas de coexistencia y de estabilidad.



Link CWT-DFT

Link CWT-DFT

Para realizar el link usaremos *generic one-site IS definitions*.

Link CWT-DFT

Para realizar el link usaremos *generic one-site IS definitions*.
Y por tanto:

$$\sigma_{DF}(q) = \frac{K_b T(\int dz W_0'(z)\rho_{eq}(z))^2}{q^2 \int \int dz_1 dz_2 G(z_1, z_2, q) W_q(z_1) W_q(z_2)}, \quad (8)$$

Donde W es la ventana que usamos para definir IS.

Problemas

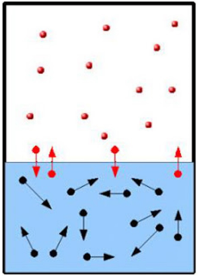
Si se hace directamente el link falla estrepitosamente.

Problemas

Si se hace directamente el link falla estrepitosamente.
¿Por que sucede esto?

Problemas

Si se hace directamente el link falla estrepitosamente.
¿Por que sucede esto?



Nuestra $G(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ es del sistema Bulk-interfase-Bulk, no solo de ondas capilares.

¿Entonces que hacemos?

¿Entonces que hacemos?

Hay que quitar las contribuciones a $G(\vec{r_1}, \vec{r_2})$ que no son debidas a CW.

¿Entonces que hacemos?

Hay que quitar las contribuciones a $G(\vec{r_1}, \vec{r_2})$ que no son debidas a CW.

¿Como hacer esto?

¿Entonces que hacemos?

Hay que quitar las contribuciones a $G(\vec{r_1}, \vec{r_2})$ que no son debidas a CW.

¿Como hacer esto?

Hay varías propuestas, solo hablaré de dos, Tarazona-Chacón y Parry.

Tarazona-Chacón filtro

Tarazona-Chacón filtro

Las CW conectan las fluctuaciones de una fase con la otra.

Tarazona-Chacón filtro

Las CW conectan las fluctuaciones de una fase con la otra.

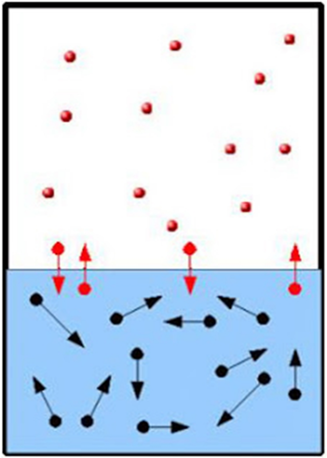
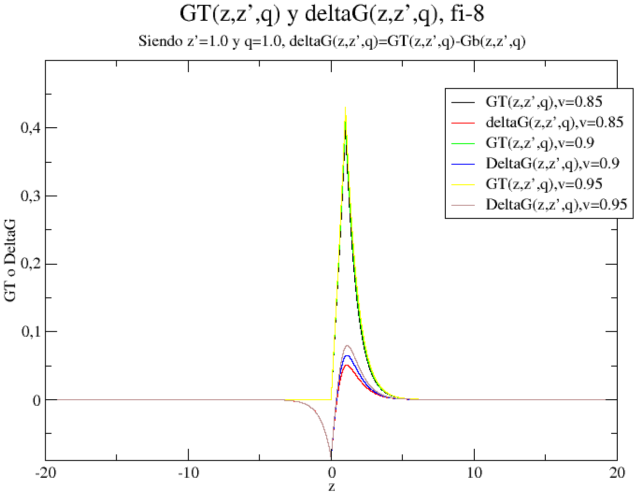


Figura : Congelamos la interfase.

Tarazona-Chacón filter

Las CW conectan las fluctuaciones de una fase con la otra.



Parry filter

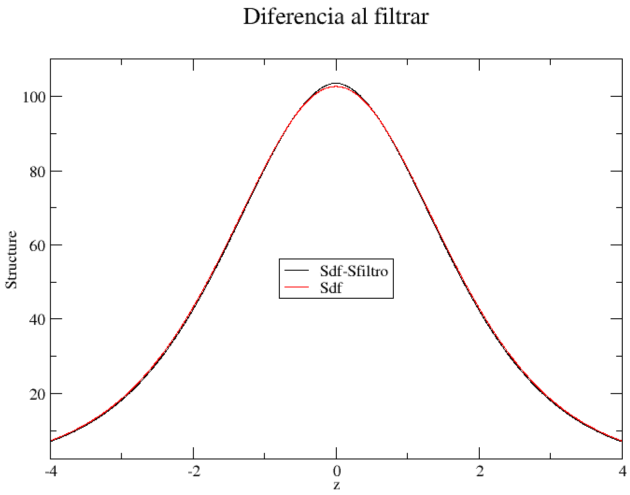
- En un funcional simétrico el exceso es debido a las contribuciones de bulk.

Parry filter

- En un funcional simétrico el exceso es debido a las contribuciones de bulk.
- Mientrás que en casos asimétricos se define una función suave que va de el valor de una fase de bulk a otra.

¿Cuanto filtran?

¿Cuanto filtran?



To take home

To take home

- Las ondas capilares son fluctuaciones debidas a estar el sistema a una cierta Temperatura.

To take home

- Las ondas capilares son fluctuaciones debidas a estar el sistema a una cierta Temperatura.
- La función de correlación esta relacionada con fluctuaciones de densidad.

To take home

- Las ondas capilares son fluctuaciones debidas a estar el sistema a una cierta Temperatura.
- La función de correlación esta relacionada con fluctuaciones de densidad.
- DFT nos da la función de correlación de todo nuestro sistema.

To take home

- Las ondas capilares son fluctuaciones debidas a estar el sistema a una cierta Temperatura.
- La función de correlación esta relacionada con fluctuaciones de densidad.
- DFT nos da la función de correlación de todo nuestro sistema.
- Actualmente solo hay dos filtros válidos:

  T-C Las ondas capilares conectan las fluctuaciones de distintas fases.

To take home

- Las ondas capilares son fluctuaciones debidas a estar el sistema a una cierta Temperatura.
- La función de correlación esta relacionada con fluctuaciones de densidad.
- DFT nos da la función de correlación de todo nuestro sistema.
- Actualmente solo hay dos filtros válidos:
  - T-C Las ondas capilares conectan las fluctuaciones de distintas fases.
  - Parry El exceso de correlación es debida a tener en cuenta las correlaciones en el bulk.