Propiedades dinámicas de los líquidos

Desde un punto de vista microscópico, la dinámica de un líquido se entiende como el cambio en la propiedades de transporte de materia y energía. Entre las propiedades de transporte encontramos cantidades como el desplazamiento cuatrático medio, la viscosidad o la longitu de localización. Para propósitos de la escuela no entraremos en muchos detalles por le momento, sin embargo, hablaremos de una cantidad que es de suma importancia para la Self Consistent Generalized Langevin Equation Theory (SCGLE)[1].

Función de dispersión intermedia

De la misma forma que se define al factor de estructura estático en términos de la correlación entre las fluctuaciones en la densidad local de partículas, la función de dispersión intermedia (ISF)se define como

$$F(k,\tau;t) = \langle \delta n(k,t) \delta n(-k,t+\tau) \rangle$$

donde τ se conoce como tiempo de correlación y para un estado estacionario no hay una dependencia explícita en el tiempo, decimos que es invariante ante traslaciones temporales. Por lo que únicamente lo anotaremos como $F(k,\tau)$.

En el límite de $\tau \to 0$ la ISF coincide con el factor de estructura estático $S(k)$, es decir, $F(k,\tau=0) = S(k)$. En consecuencia, cualquier formulación dinámica de la ISF podrá utilizar al factor de estructura como condición inicial.

Una forma muy sencilla de modelar la evolución de las fluctuaciones en la densidad $\delta n(k,t)$ es a partir de la ley de difusión de Fick la cual se escribe como

$$\frac{\partial \delta n(r,\tau)}{\partial \tau} = -D_c \nabla^2 \delta n(r,\tau)$$

donde D_c es el coeficiente de difusión colectivo. La transformada de Fourier nos lleva a

$$\frac{\partial \delta n(k,\tau)}{\partial \tau} = -D_c k^2 \delta n(k,\tau)$$

al multiplicar esta ecuación por $\delta n(k,\tau=0)$ y tomando el promedio sobre el ensable $<\ldots>$ obtenemos finalmente

$$\frac{\partial F(k,\tau)}{\partial \tau} = -D_c k^2 F(k,\tau)$$

Para la condición inicial previamente discutida obtenemos y haciendo $D_c = D_0/S(k)$

$$F(k,\tau) = S(k)\exp\left(-\frac{D_0 k^2 t}{S(k)}\right)$$

Nótese que para esta solución se han ignorado las interacciones entre partículas. Por lo que su rango de validez es limitado. Sin embargo, esta función nos permitirá entender la evolución dinámica de esta cantidad.

Evolución dinámica de la ISF

Evaluemos esta función en el código. Una vez más, preparamos la condición inicial escribiendo simplemente

```
include("src\\SCGLE_API.jl")
φ = 0.4
k = collect(0.0:0.01:10*π)
S = StructureFactor_HS.(φ, k)
```

Podemos evaluar el comportamiento de la función a un tiempo dado τ haciendo

```
τ = 1.0
F = ISF(S, k, τ)
Fs = sISF(k, τ)
```

Y finalmente, salvamos

```
save_data("ISF_tau_"*num2text(τ)*".dat", [k Fs F]")
```

donde "num2text" es una función que hemos creado para transformar una cantidad con punto decimal a un *string* con una "p" en vez de un "."[2].

Dentro del repositorio hemos creado en archivo ".plt" que nos permite graficar la ISF para $\tau = [10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 10^{0}, 10^{1}, 10^{2}]$. Dentro de gnuplot escribimos simplemente

```
gnuplot> load "ISF.plt"
```

❗ Ejercicio

Inspecina el archivo y si es necesario modifícalo para obtener la figura.

y el resultado es el siguiente

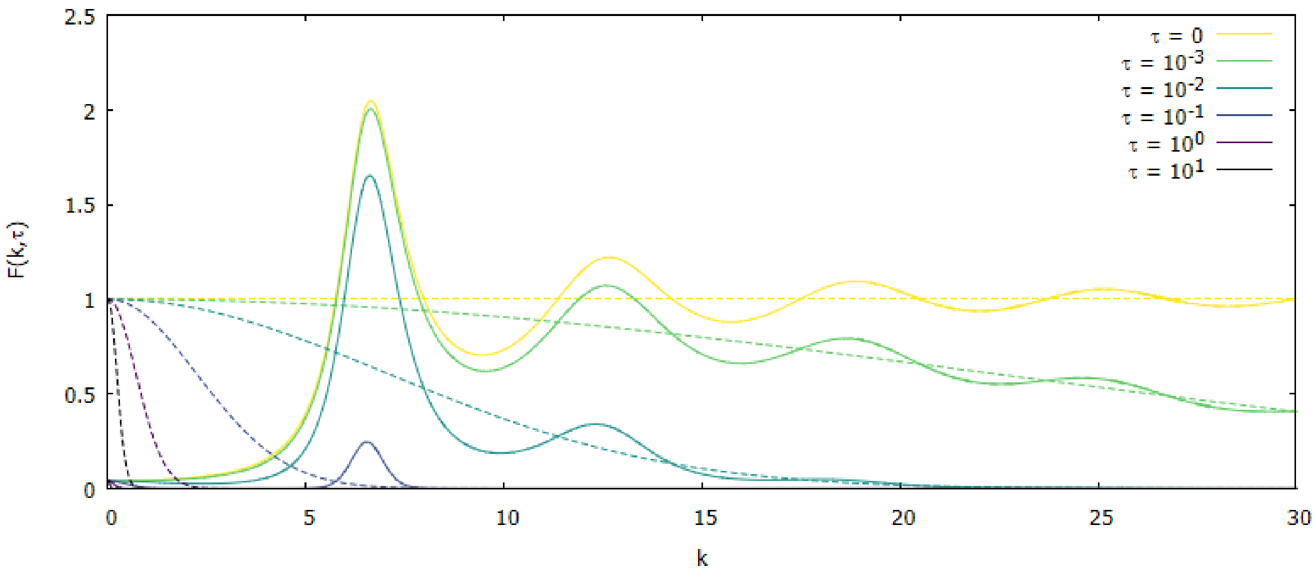

Fig1: Función de dispersión intermedia para diferentes valores en τ.

❗ Ejercicio

¿Qué pasa si modificas el valor de D_0 dentro del código?

Otra forma de conocer el valor de la función de dispersión intermedia es manteniendo el valor del vector de onda constante $k =$ cte y graficar su evolución en el tiempo de correlación τ. Para esto escribimos

```
D₀ = 1.0
τ = [exp(i*log(2)) for i in collect(-10:10)]
Fs = exp.(-D₀*k*k*τ)
```

y salvamos.

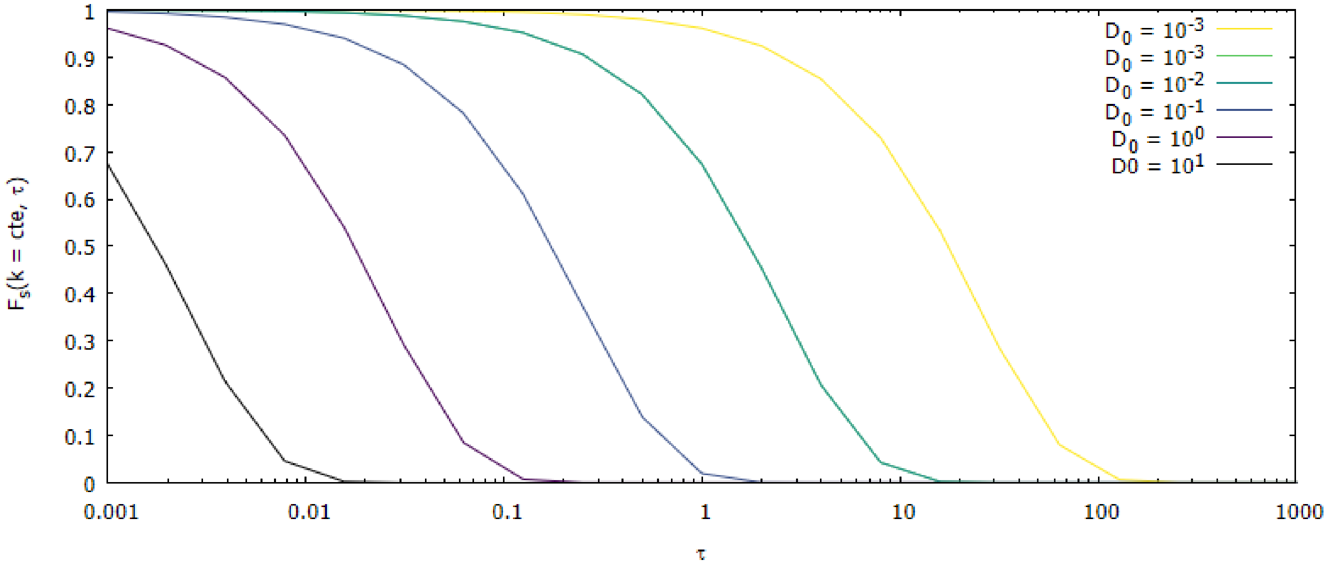

Fig2: Corte a $k =$ cte para la auto-ISF como función del tiempo de correlación.

Reto 1

Reproducir lar figura 2 para diferentes valores en D_0.

Anotaciones

---

1. Laura Yeomans-Reyna and Magdaleno Medina-Noyola Phys. Rev. E 62, 3382 – Published 1 September 2000 ↩
2. Esto lo hacemos porque algunos sistemas de análisis de datos tienen problemas cuando los archivos o carpetas tienen el caracter "." en su nombre. ↩