Dependencia del estado termodinámico en los fenómenos de transportes de esferas duras e interacciones de Leonnard-Jones

L. Marchioni, M. A. Di Muro y M. Hoyuelos

Fenómenos de transportes

Difusion (D)

Transporte de masa

Conductividad termica (λ)

Transporte de energía

Viscosidad (η)

Transporte de momentum

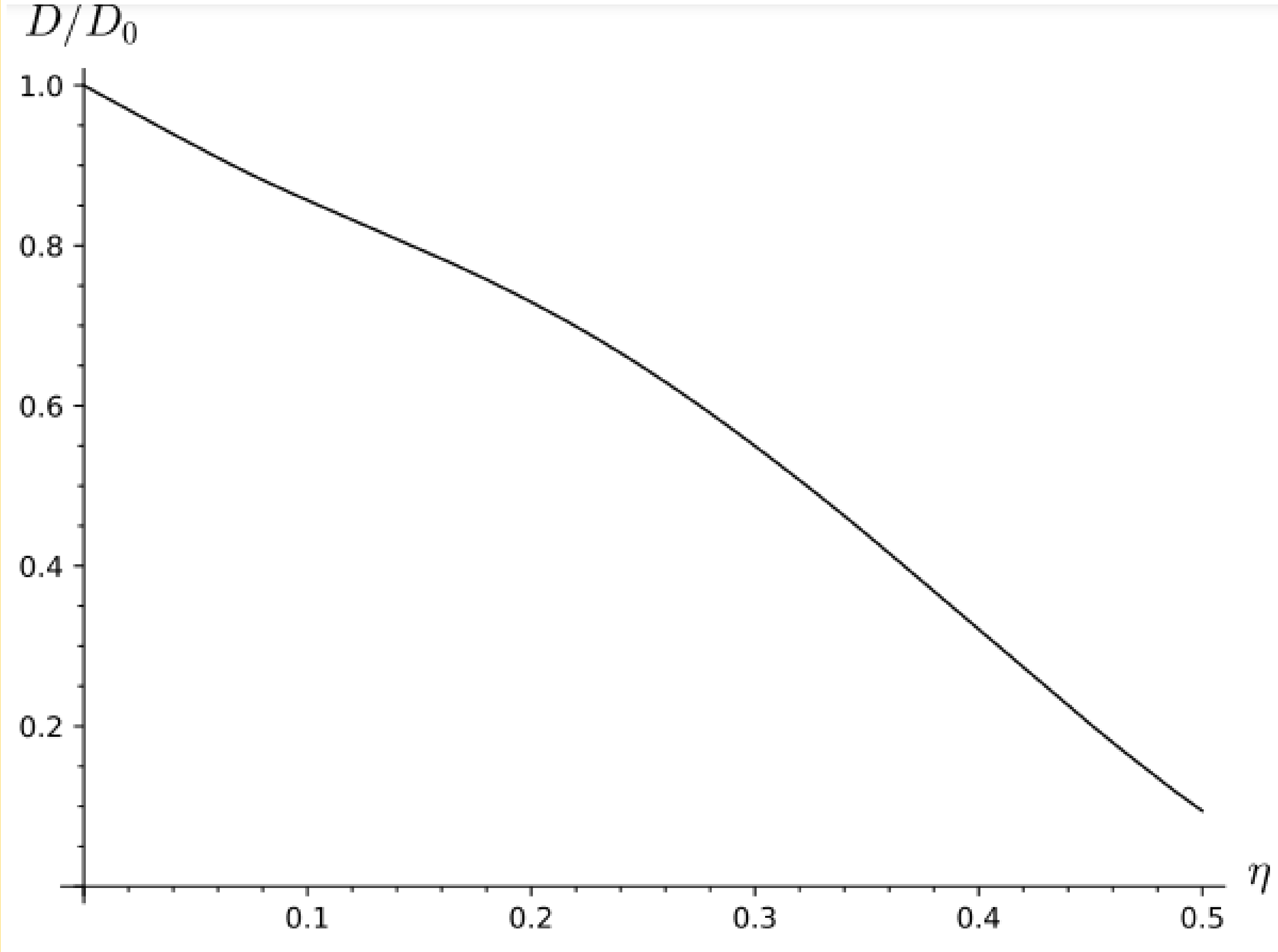
Motivación

Modelo Dymond-Hildebrand-Batschinski (volumen libre)

Modelos a partir del exceso de entropía por particula (Rosenfeld)

D : coeficiente de difusión

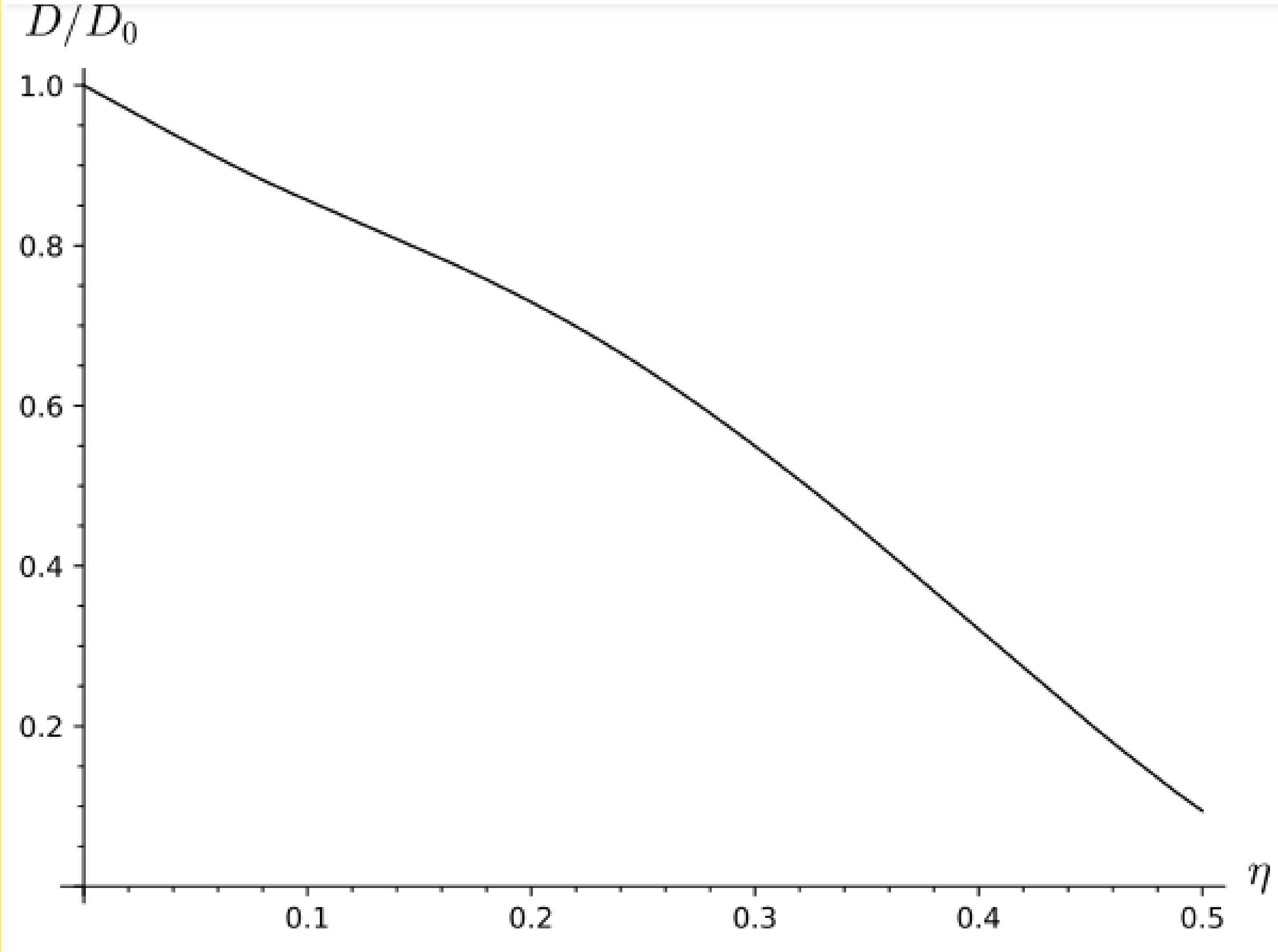
D_0 : coeficiente de difusión a bajas densidades



Proponemos

$$D = \varphi\, D_0$$

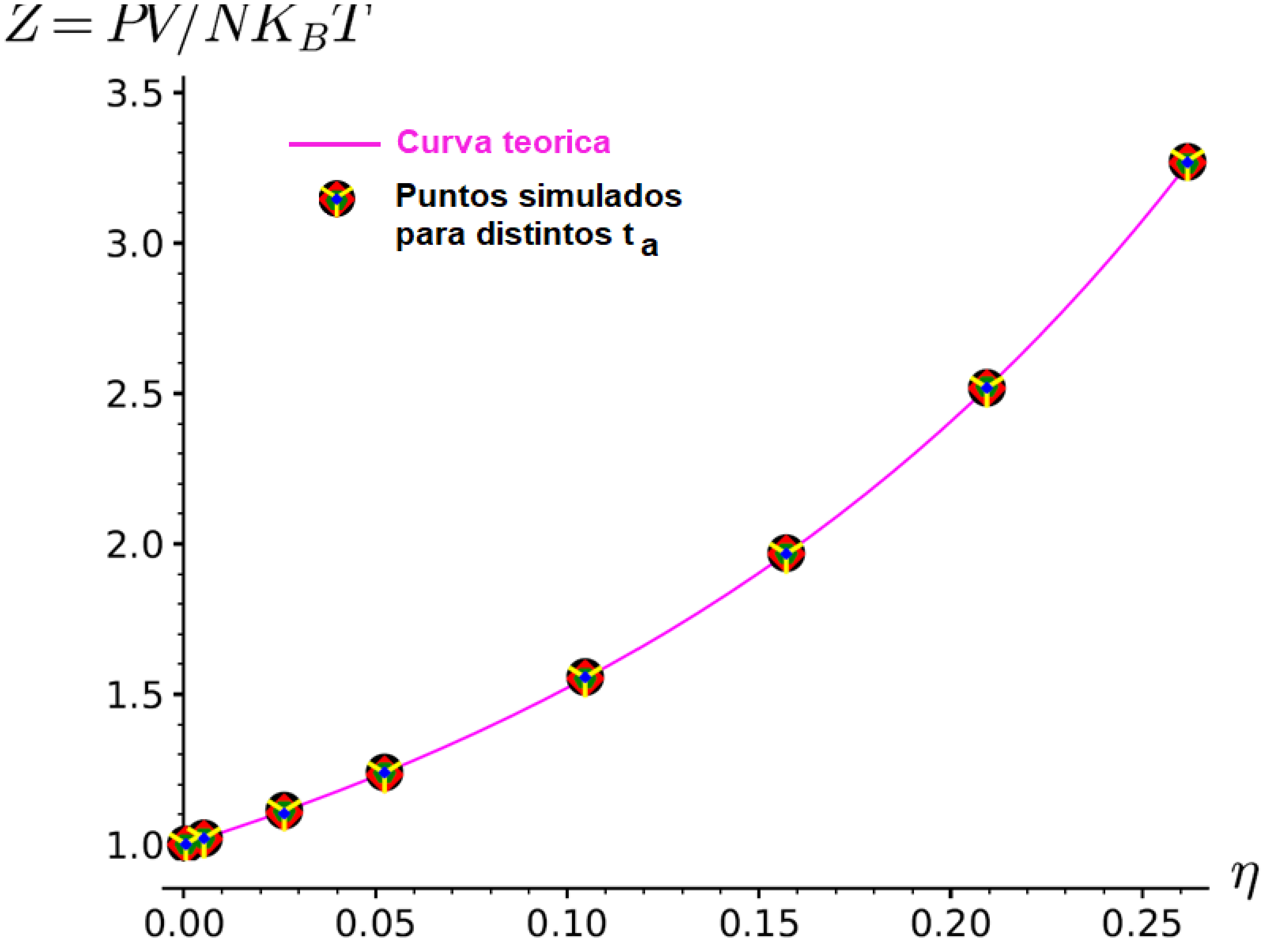
φ Función termodinámica



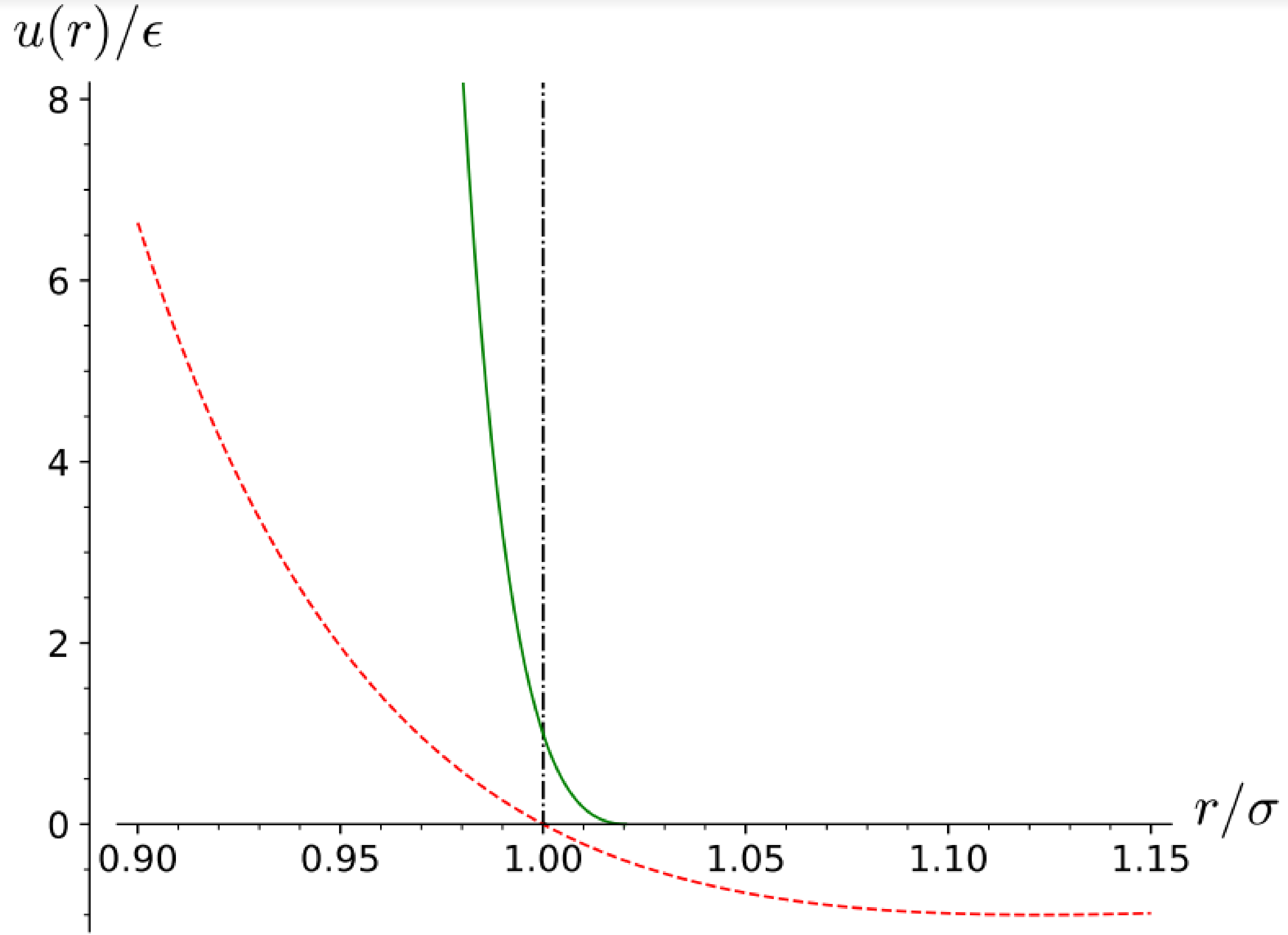
Funciones de estados

$$Z = \frac{1 + \eta + \eta^2 - \eta^3}{(1-\eta)^3}$$

$$t_a = \frac{1}{\gamma}$$



Aclaraciones



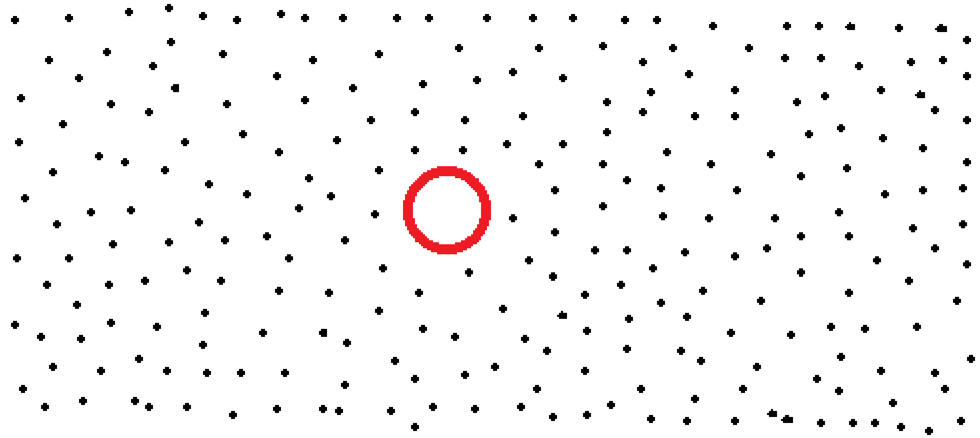
Aclaraciones

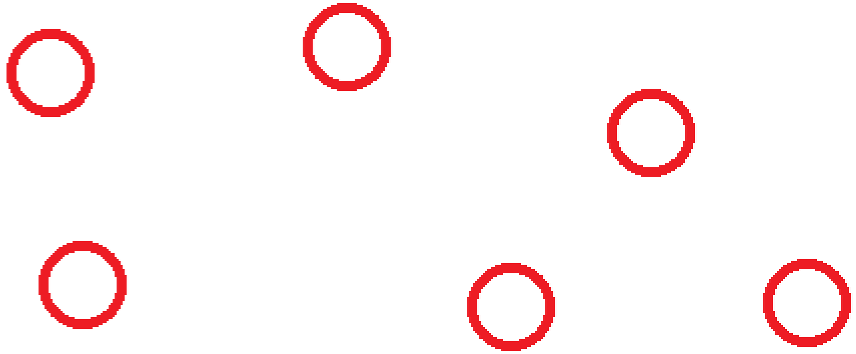
$$\rho^* = \rho\sigma^3$$

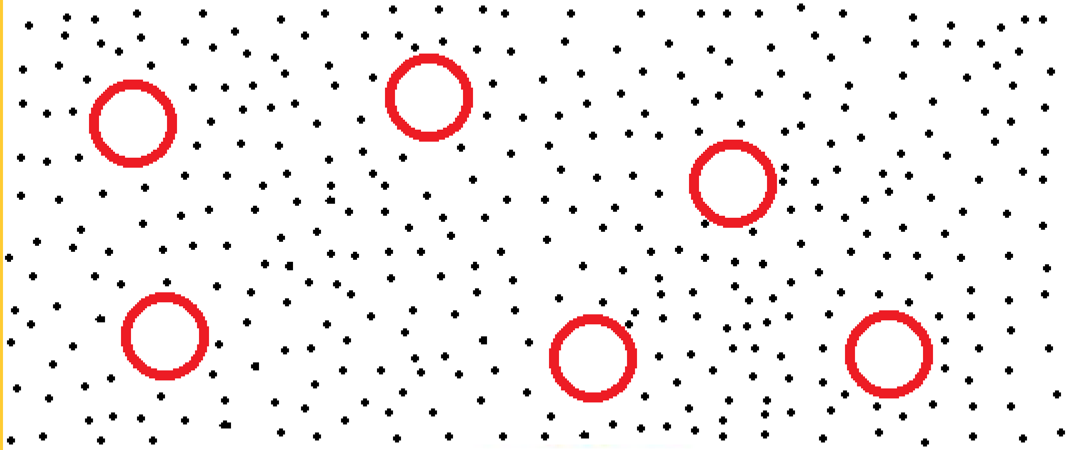
$$t^* = t\,\frac{1}{\sigma}\sqrt{\frac{\epsilon}{m}}$$

$$D^* = D\,\frac{1}{\sigma}\sqrt{\frac{m}{\epsilon}}$$

Modelo







$$D_L^* = T^* \, t_a^*$$

$$D_B^* = \frac{\sqrt{\pi \, T^*}}{16 \, \eta}$$

Efectos del ruido a bajas densidades

Ley de Fick

$$j = D\left(-\frac{\partial n}{\partial x}\right)$$

$$I = V/R$$

$$R \sim \frac{1}{D}$$

Efectos del ruido a bajas densidades

$$\frac{1}{D_0^*} = \frac{1}{D_L^*} + \frac{1}{D_B^*}$$

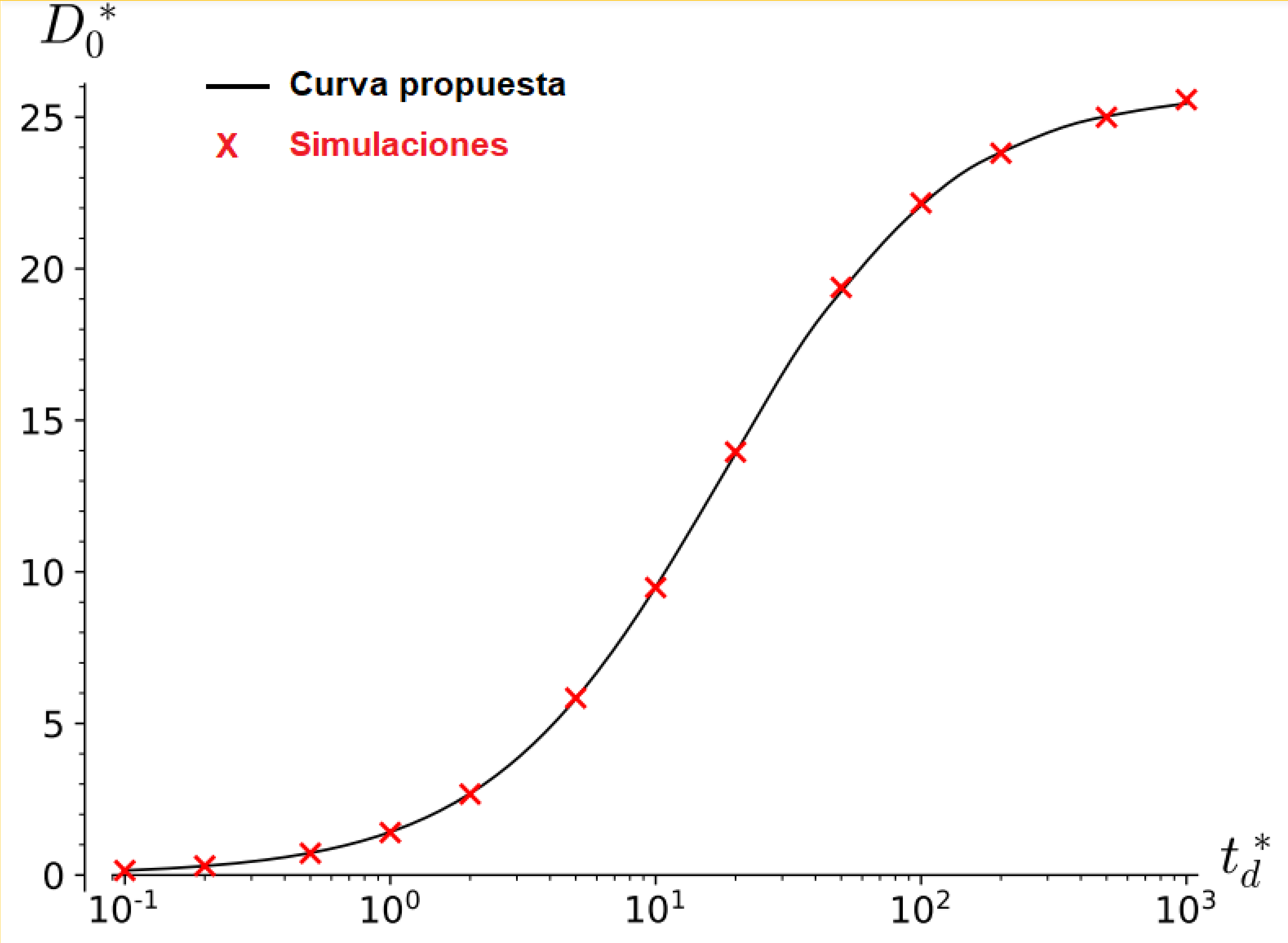
$t_a^* \to 0 \quad \to \quad D_0^* = D_L^*$

$t_a^* \to \infty \quad \to \quad D_0^* = D_B^*$

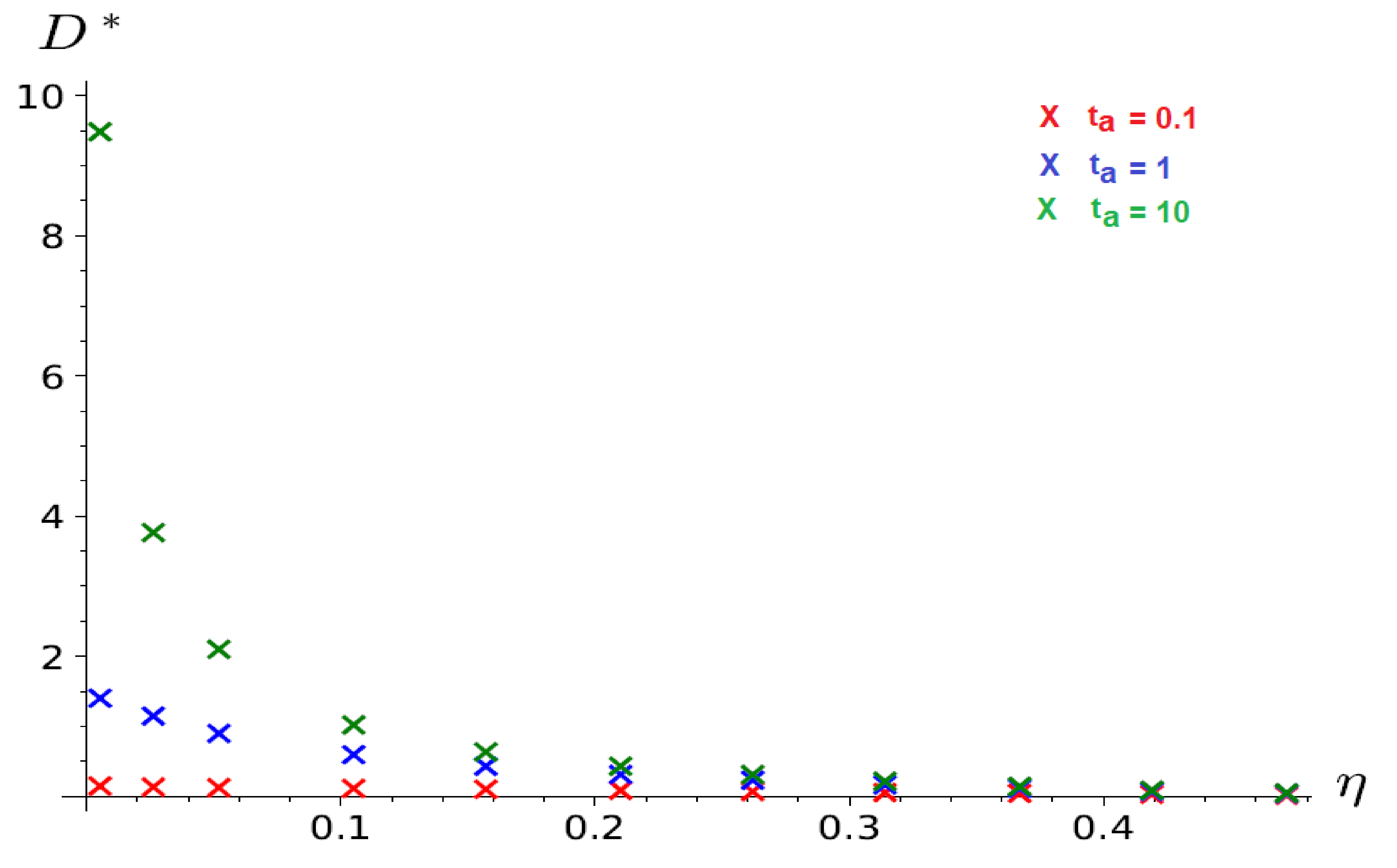
Efectos del ruido a bajas densidades

$$D_0^* = \frac{D_L^*\, D_B^*}{D_L^* + D_B^*}$$

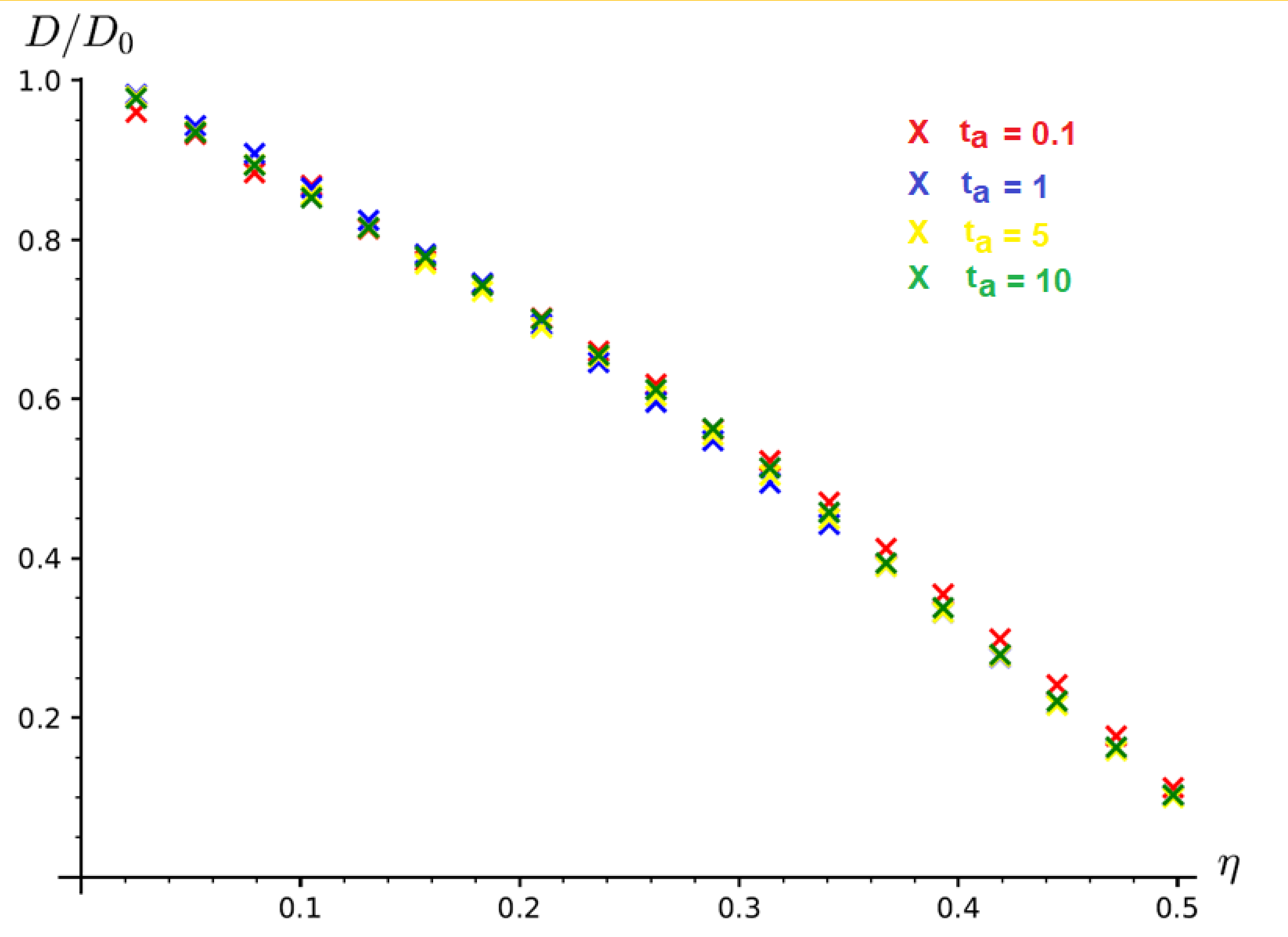
$$D_0^* = \frac{\pi^{1/2}\, T^*\, t_a^*}{16\,\eta\, T^{*\,1/2}\, t_a^* + \pi^{1/2}}$$



Difusión vs concentración



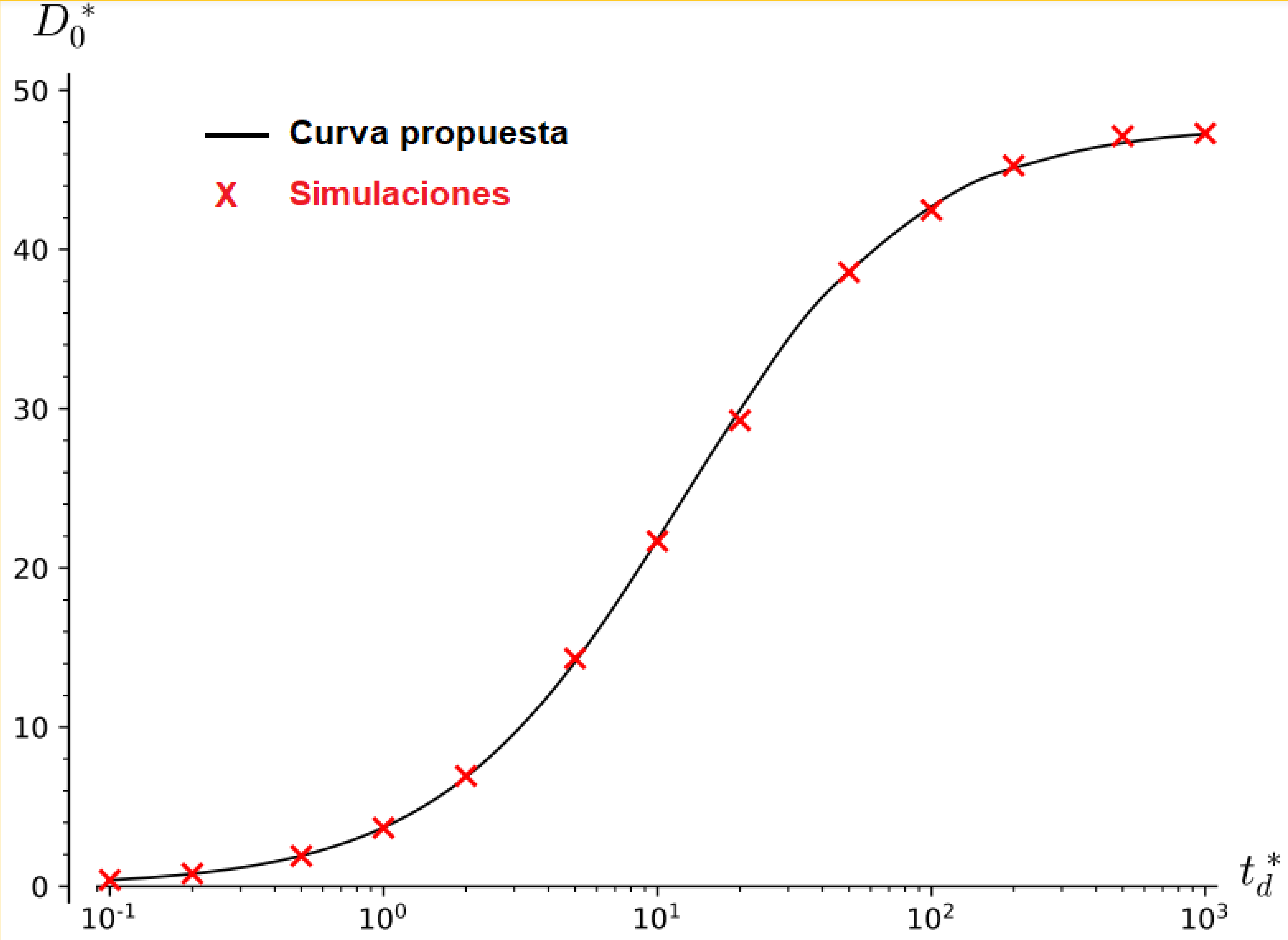
Coeficiente de autodifusión reducido



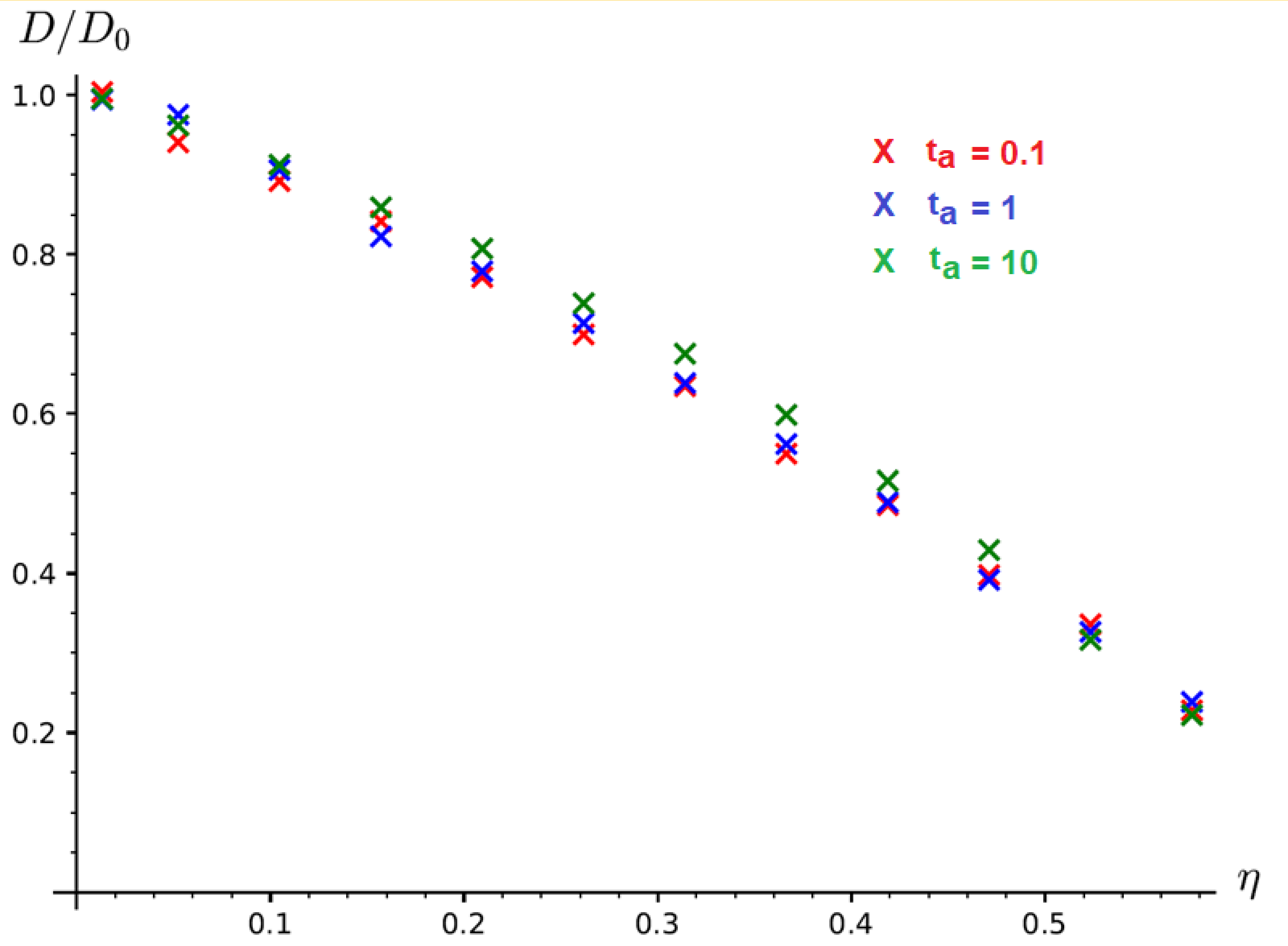
Potencial de Lennard-Jones

$$D^*_{LJ} = \frac{\sqrt{\pi\, T^*}}{16\, \eta\; \Omega_{11}(T^*)}$$

$$\frac{1}{D^*_0} = \frac{1}{D^*_L} + \frac{1}{D^*_{LJ}}$$



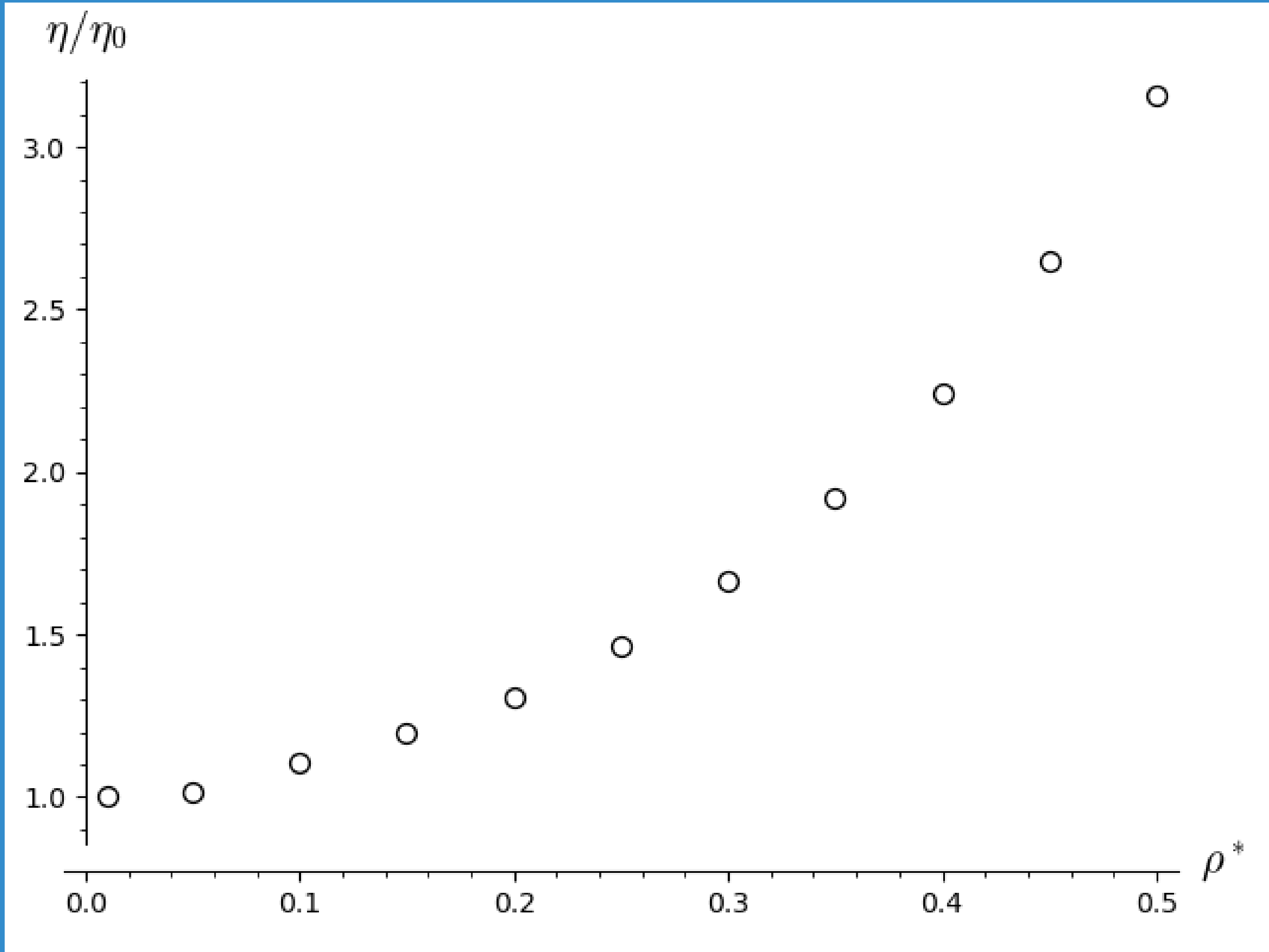
Potencial de Lennard-Jones



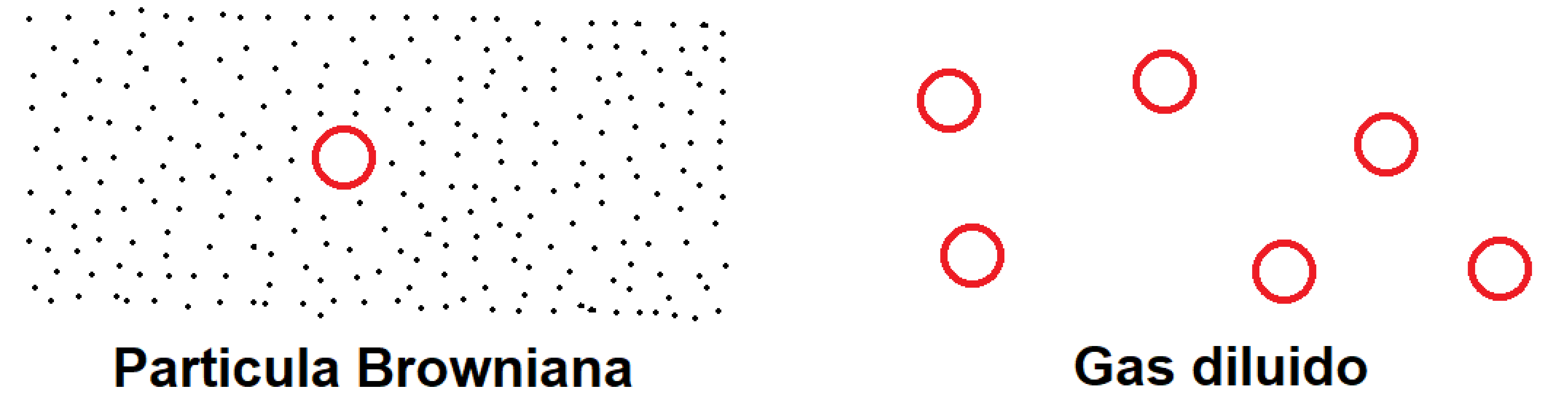
Proponemos

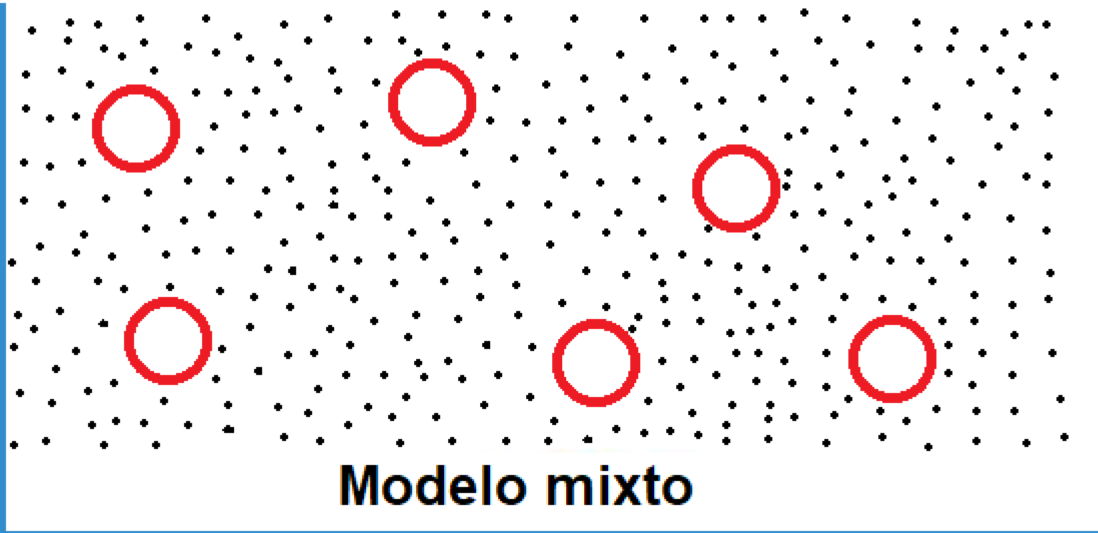
$$\eta = \Psi \, \eta_0$$

Ψ Función termodinámica



Modelo





$$\eta_L^* = \frac{\rho^* T^* \ t_a^*}{2}$$

$$\eta_B^* = \frac{5}{16}\sqrt{\frac{T^*}{\pi}}$$

Efectos del ruido a bajas densidades

Ley de Newton

de la viscosidad

$$\tau = \eta\left(-\frac{\partial \rho v}{\partial x}\right)$$

$$I = V/R$$

$$R \sim \frac{1}{\eta}$$

Efectos del ruido a bajas densidades

$$\frac{1}{\eta_0^*} = \frac{1}{\eta_L^*} + \frac{1}{\eta_B^*}$$

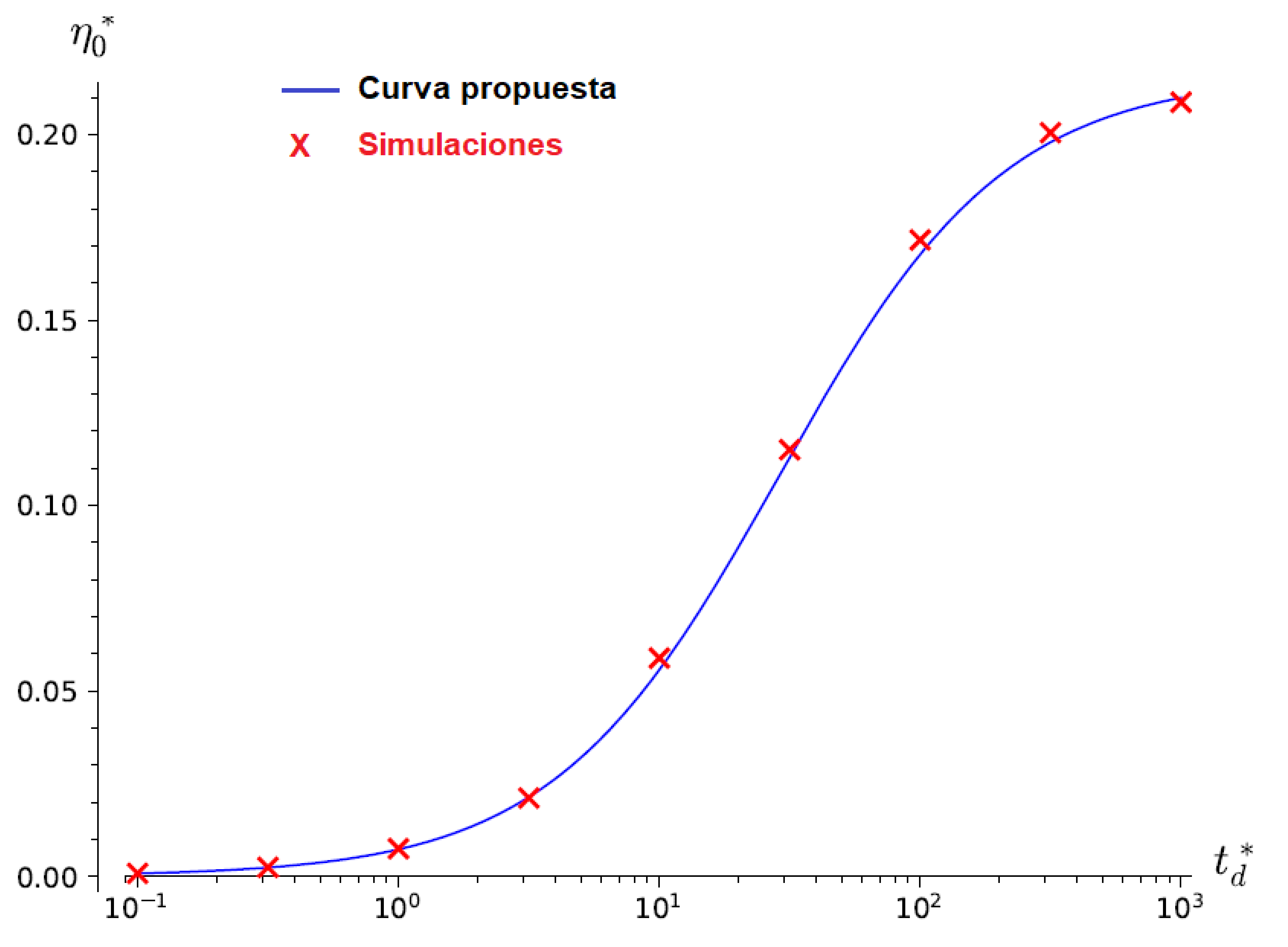
$t_a^* \to 0$ $\rightarrow$ $\eta_0^* = \eta_L^*$

$t_a^* \to \infty$ $\rightarrow$ $\eta_0^* = \eta_B^*$

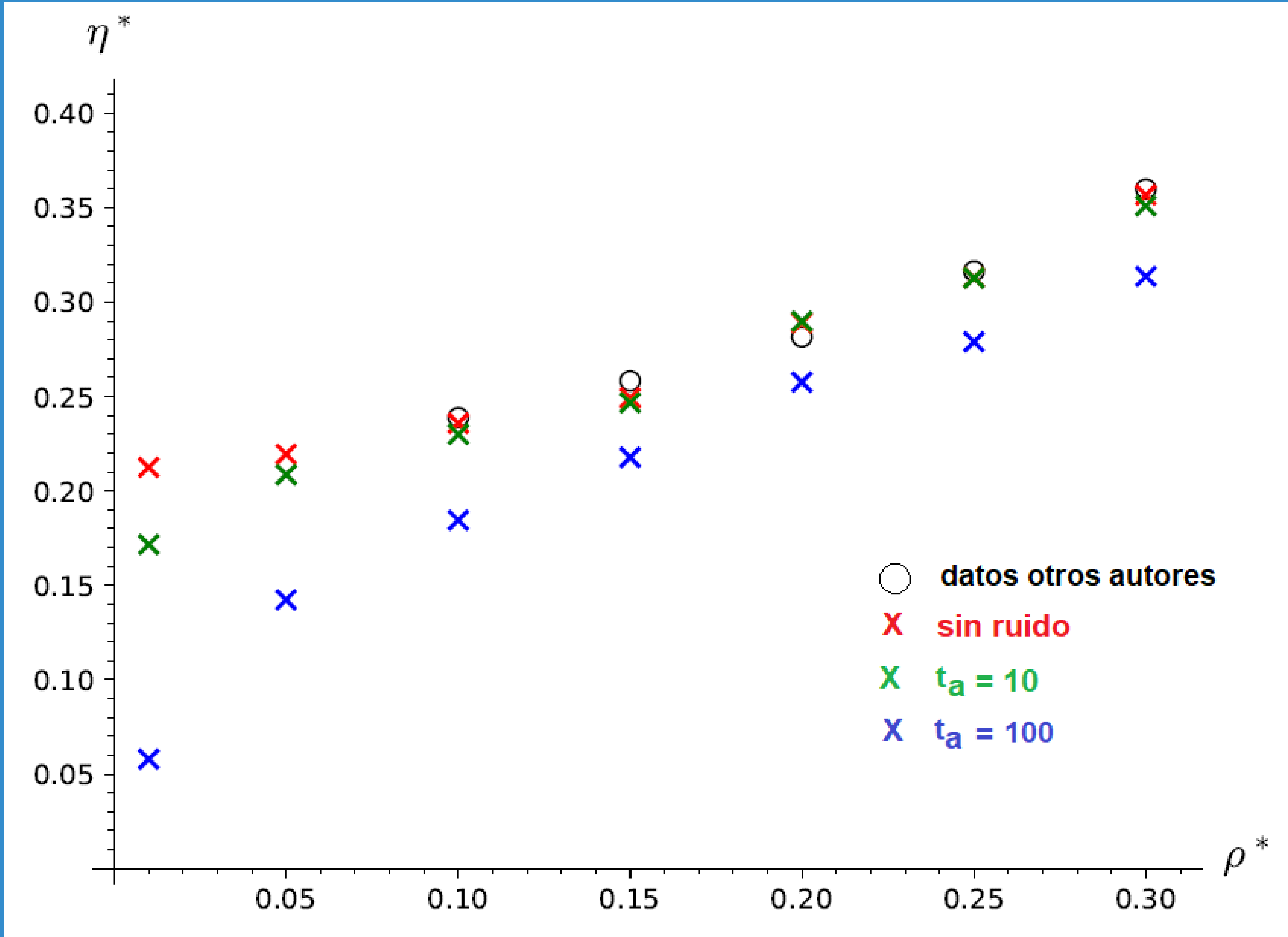
Efectos del ruido a bajas densidades

$$\eta_0^* = \frac{\eta_L^* \eta_B^*}{\eta_L^* + \eta_B^*}$$

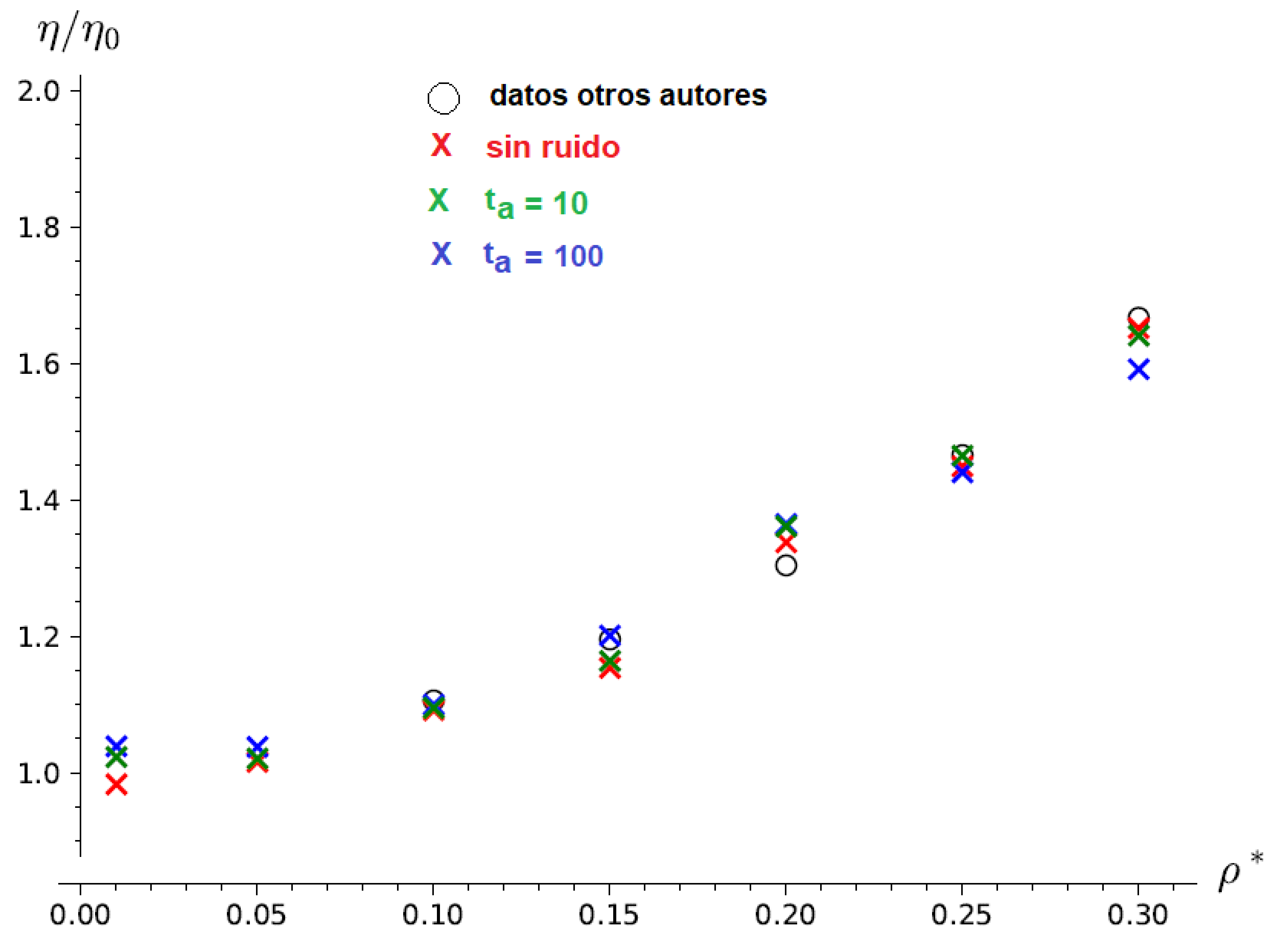
$$\eta_0^* = \frac{\rho^* T^* \, t_a^*}{16/5\rho^* \, t_a^* \sqrt{T^* \pi} + 2}$$



Viscosidad vs concentración



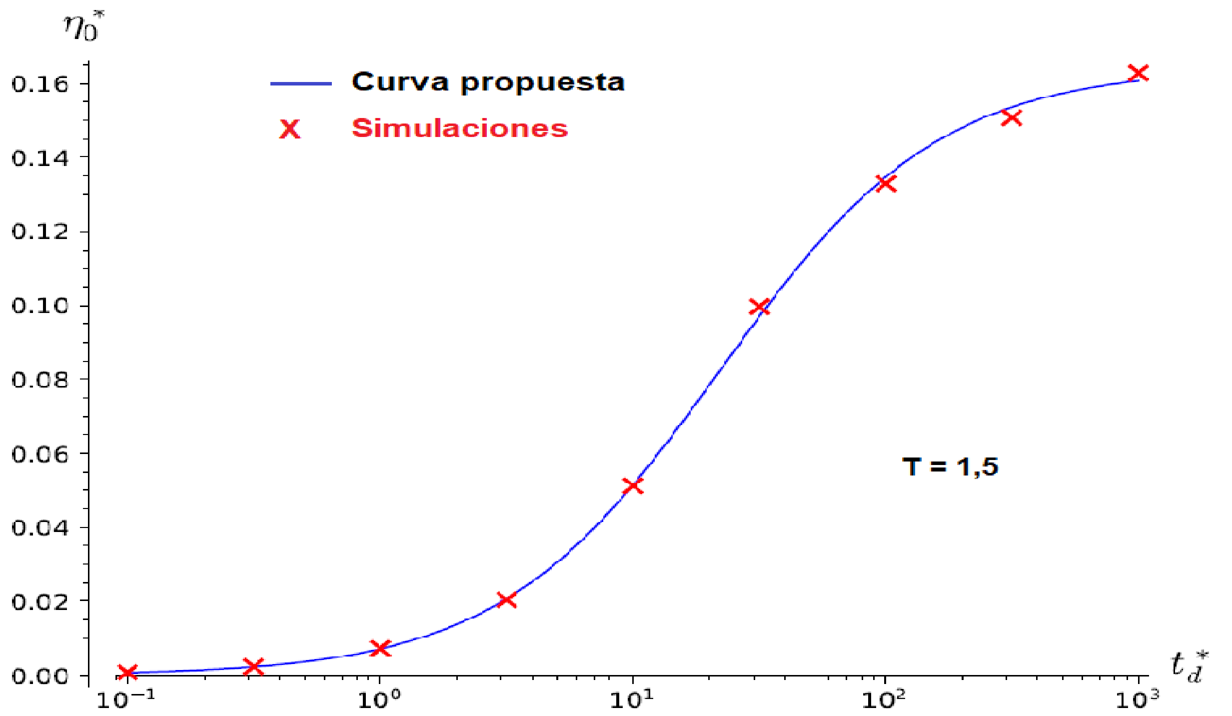
Coeficiente de viscosidad reducido

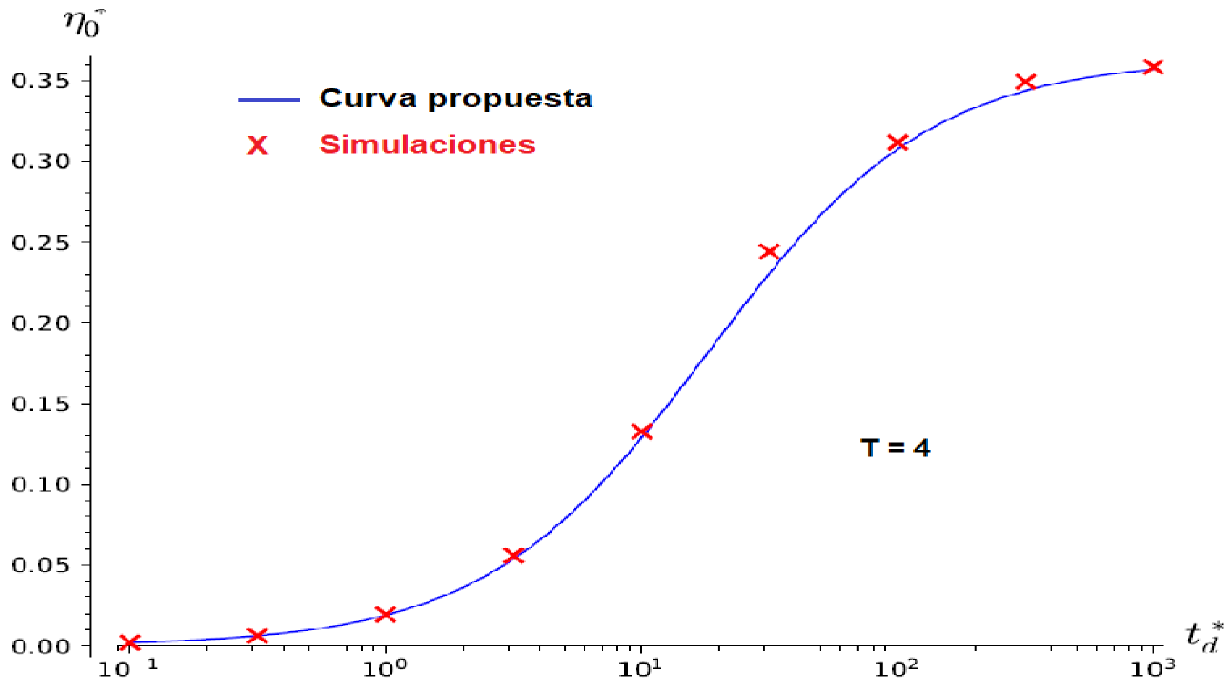


Potencial de Lennard-Jones

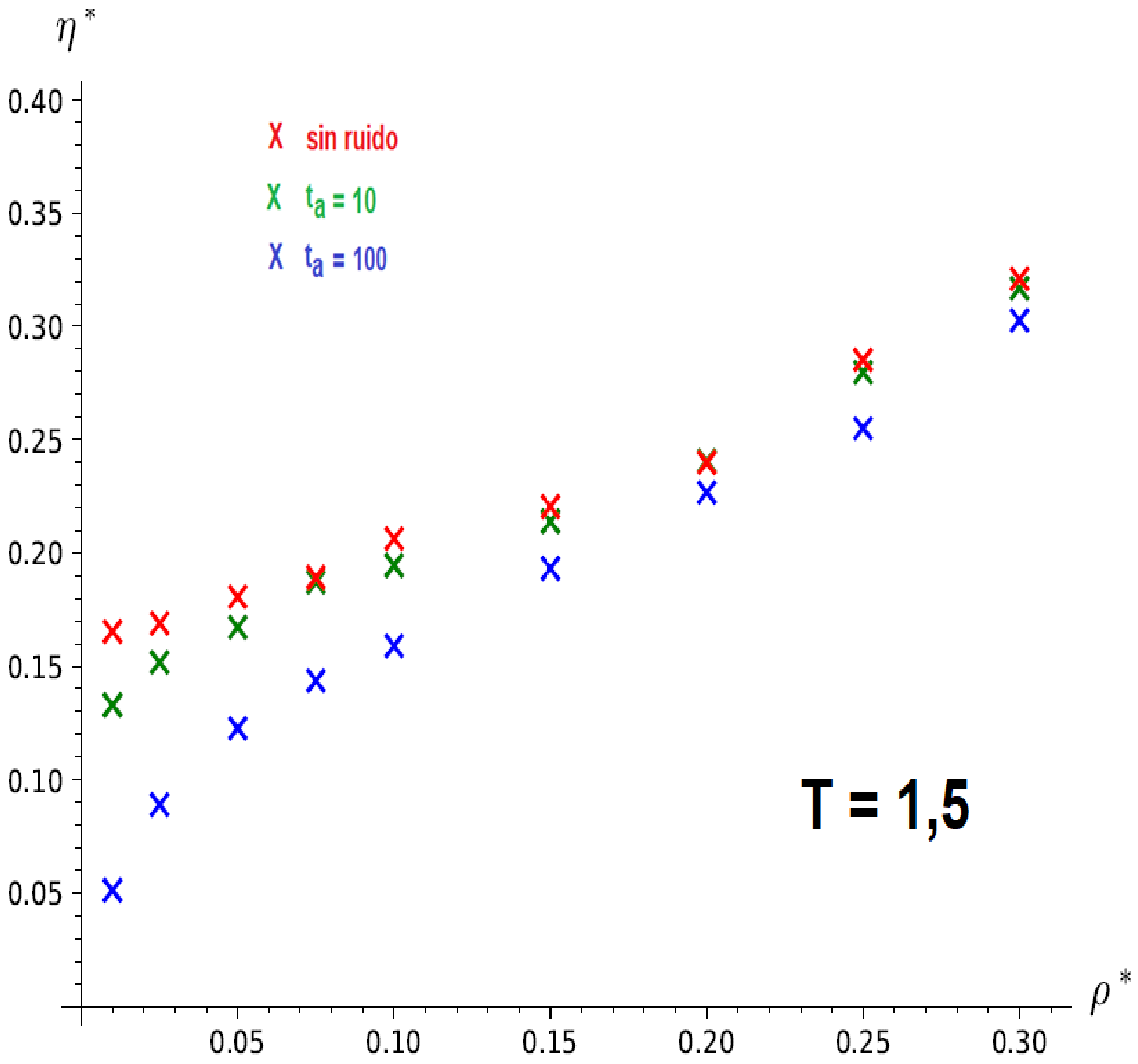
$$\eta^*_{LJ} = \frac{5}{16\Omega_{22}(T^*)}\sqrt{\frac{T^*}{\pi}}$$

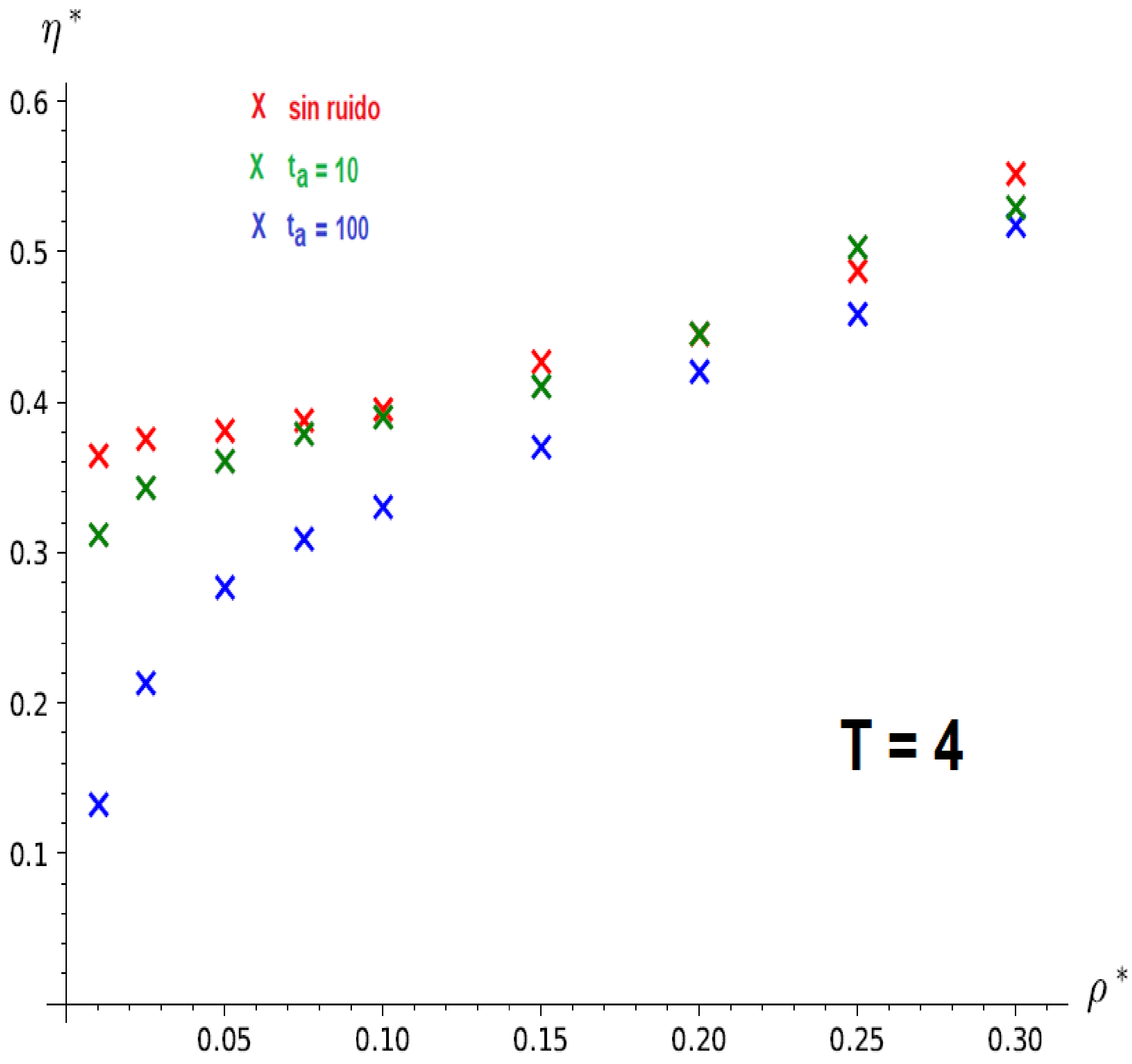
$$\frac{1}{\eta^*_0} = \frac{1}{\eta^*_L} + \frac{1}{\eta^*_{LJ}}$$



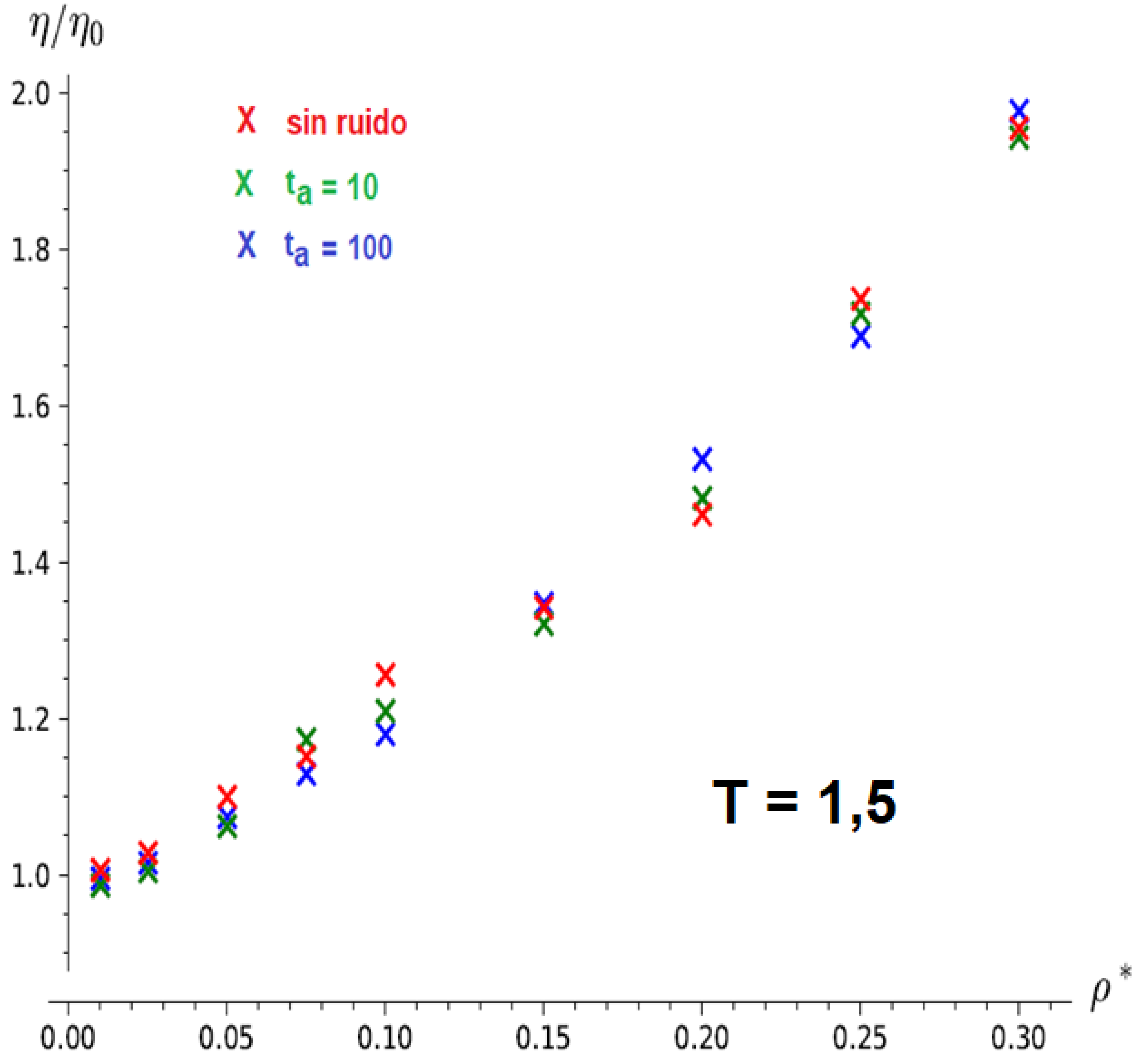


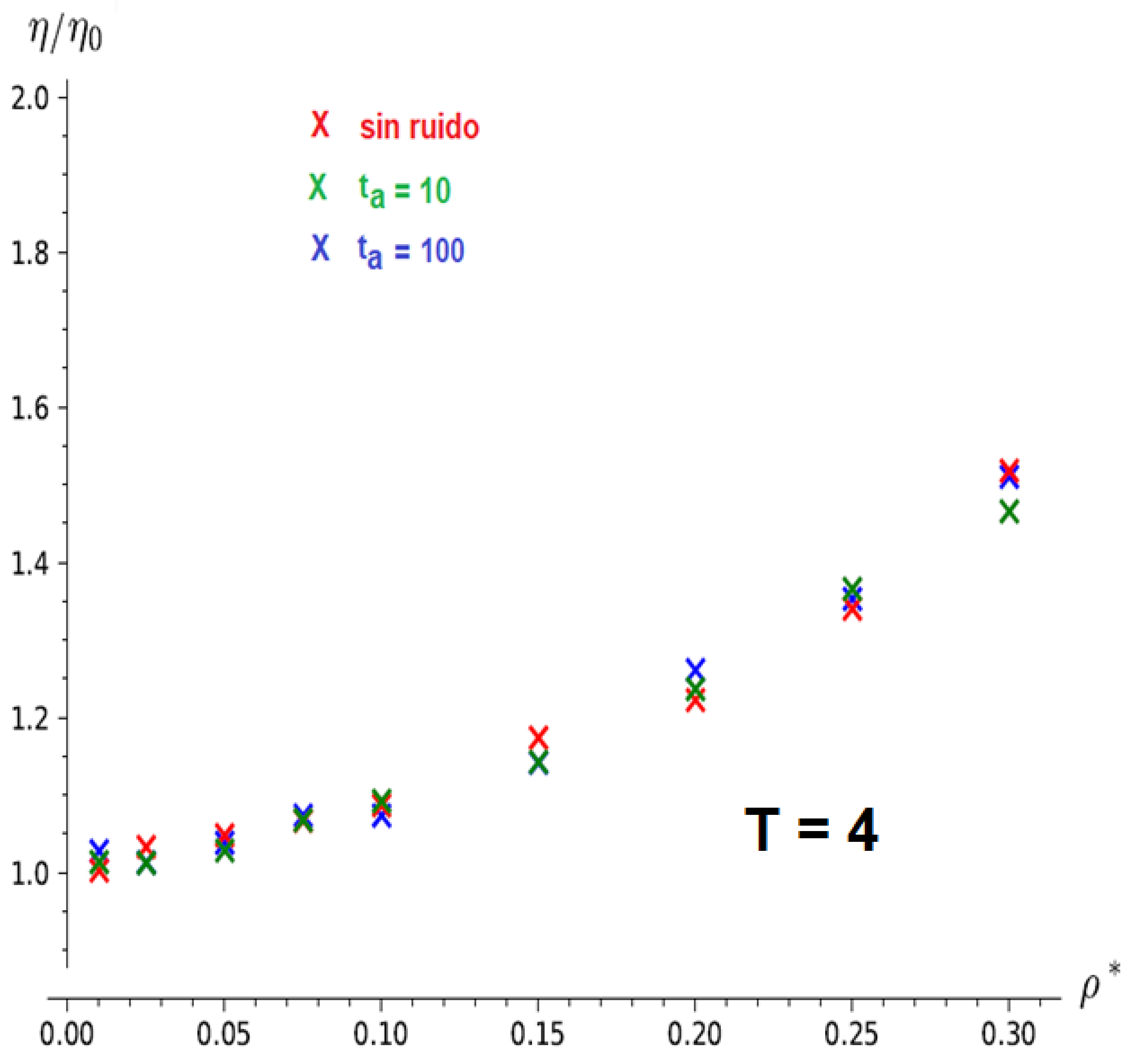
Potencial de Lennard-Jones





Potencial de Lennard-Jones





Conclusiones

La difusividad y la viscosidad a concentraciones pequeñas, se puede escribir como combinación de dos coeficientes conocidos.

Las simulaciones numéricas fueron consistentes con la hipótesis de que φ y Ψ son una función de estados.

Si bien el problema sigue abierto, saber que φ y Ψ pueden ser una función termodinamica, nos da una guía para desarrollar alguna futura teoría.

¿Preguntas?