

Influencia de los parámetros de Lennard-Jones en la dependencia de la temperatura en la difusión de gases reales a través de nanocanales de β -hidroquinona.

Brais Rodríguez García, Martín Pérez Rodríguez, Manuel M. Piñeiro

CINBIO, Universidade de Vigo, Departamento de Física Aplicada, 36310, Vigo

E-mail: brairodriguezgarcia@alumnos.uvigo.es, mmpineiro@uvigo.gal,
martinperez@uvigo.es

Palabras clave: hidroquinona, difusión, gases reales, nanocanales.

Los clatratos son estructuras sólidas y cristalinas de naturaleza no estequiométrica cuya característica distintiva es la de poder albergar en su interior pequeñas partículas denominadas "huéspedes".

En este trabajo se ha estudiado el cambio en la energía consecuente con el tránsito de un grupo de huéspedes descritos a partir de potenciales de Lennard-Jones de forma realista en un sistema cristalino de β -hidroquinona (β -HQ). Mediante la aplicación de la técnica de Umbrella Sampling, se ha llevado a cabo la representación del paisaje energético general que la partícula experimenta a lo largo de su recorrido a través de los nanocanales presentes en la estructura. A partir de esta, ha sido posible la elaboración de un ajuste predictivo que relaciona las características individuales de cada huésped con una diferencia de energía correspondiente a la variación de la misma durante su tránsito.

Los resultados obtenidos en este estudio pueden ayudar a la comprensión de aquellos procesos de difusión en los que exista la presencia de barreras de energía potencial separando zonas concretas del espacio fásico, así como aportar una interesante perspectiva a partir del amplio campo que estos compuestos ofrecen desde el punto de vista aplicativo.

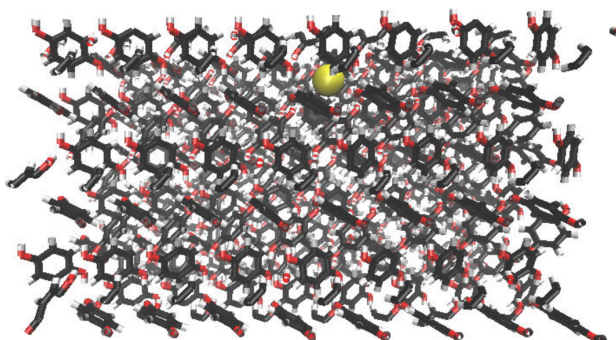


Figura 1: vista lateral del sistema β -HQ con Ar como huésped, representado por la esfera amarilla. Los átomos de C, O y H se muestran como segmentos negros, rojos y blancos respectivamente, mientras que las líneas rojas discontinuas corresponden a puentes de hidrógeno.

Referencias

- [1] Rodríguez-García B, Piñeiro MM, Pérez-Rodríguez M. Diffusion and dynamics of noble gases in hydroquinone clathrate channels. *J Chem Phys.* 2023;158(4):044503. doi:10.1063/5.0137734
- [2] Rodríguez García B, Piñeiro MM, Pérez-Rodríguez M. Influence of Lennard–Jones Parameters in the Temperature Dependence of Real Gases Diffusion through Nanochannels. *Nanomaterials.* 2023; 13(9):1534. <https://doi.org/10.3390/nano13091534>