

Transformación isócara de agua confinada

Martín Pérez-Rodríguez^{a,c}, Antoine Barthes^a, Manuel M. Piñeiro^c, María

Martín Conde^b, David Gregoire^a, Christelle Miqueu^a

^aUniversite de Pau et Pays de l'Adour, E2S, UPPA, CNRS, LFCR, Anglet, France

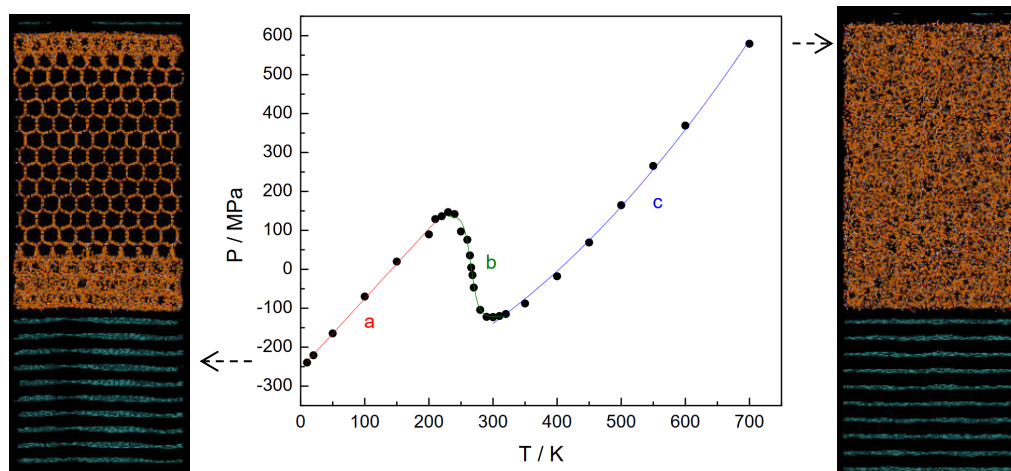
^bUniversidad Politécnica de Madrid, ETSII, IQI, 28006, Madrid, Spain

^cUniversidade de Vigo, Departamento de Física Aplicada, 36310, Spain

E-mail: martinperez@uvigo.gal

Palabras clave: confinamiento, cristalización, dinámica molecular.

Utilizando dinámica molecular clásica, es sencillo estimar las curvas isocóricas en el diagrama P-T de un sistema termodinámico, variando la temperatura y estabilizando la presión en cada punto. Aplicando esta estrategia a un sistema compuesto por agua [1] confinada en un nanoporo de grafeno [2,3], se puede obtener información valiosa sobre el sistema y su comportamiento termodinámico a lo largo de la curva. Particularmente, se observa que existe una región en que el proceso sigue fielmente la curva de equilibrio sólido-líquido (región b de la figura) y, a partir de los valores en los límites de dicha región, es posible estimar la presión de cristalización debida a las condiciones de confinamiento. Por otra parte, el comportamiento del tensor de presiones permite analizar algunas de las limitaciones específicas que encontramos en el diseño de modelos de simulación para sistemas confinados.



Agradecimientos. Centro de Supercomputación de Galicia (www.cesga.es)[3]; MPR agradece el contrato "María Zambrano" de la U. de Vigo, financiado por MIU/33.50.460A.752 y NextGenerationEU/PRTR, y el proyecto Ref. CNS2022-135881 financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033. MPR, AB, DG, y CM agradecen el proyecto E2S UPPA hub Newpores (ANR-12-IDEX-0002).

Referencias

- [1] Modelo TIP4P/Ice; M. M. Conde, M. Rovere, P. Gallo, *J. Chem. Phys.* **147** (24), 244506 (2017).
- [2] Modelo OPLS-AA; W. L. Jorgensen, D. S. Maxwell, J. Tirado-Rives, *J. Am. Chem. Soc.* **118** (45) 11225–11236 (1996).
- [3] M. Pérez-Rodríguez, A. Barthes, et al., *Biot-Bazant Conference*, Northwestern Univ., USA (2021)
- [4] Cálculos realizados con GROMACS; D. Van Der Spoel, E. Lindahl, et al., *J. Comput. Chem.* **26** (16)304 1701–1718 (2005)