

# Técnicas numéricas para el estudio del mecanismo de nucleación de burbujas de vapor bajo presiones negativas.

Miguel Ángel González, Juan L. Aragonés, Chantal Valeriani and José Luis F. Abascal\*

Departamento de Química-Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, Spain

La nucleación homogénea, en ausencia de interfaces preexistentes, se define como la formación de un núcleo crítico, el cual desemboca en el crecimiento de una nueva fase dentro de una fase metaestable. Es un mecanismo vinculado a una transición de primer orden, que se estudia principalmente por medio de la teoría de nucleación clásica (CNT). Esta teoría estudia en la nucleación de un líquido en un vapor sobreenfriado. Es posible utilizarla en otros sistemas como la nucleación de un sólido, la formación de una burbuja de gas... A partir de esta teoría han aparecido una serie de modificaciones y otros métodos para calcular los parámetros característicos del proceso de nucleación (tasa de nucleación, barrera de nucleación...).

El trabajo presentado se basa en la utilización del método *Mean first passage time*<sup>1,2</sup> (MFPT) para estudiar el mecanismo de nucleación de burbujas de vapor en el seno de agua líquida (cavitación). Se han llevado a cabo una serie de simulaciones de Dinámica Molecular de agua en condiciones metaestables. Las temperaturas y presiones de simulación se encuentran en el intervalo 260-370 K y desde -2000 bar hasta 3000 bar. El potencial de agua utilizado es el TIP4P/2005<sup>3</sup> que ha demostrado excelentes resultados en la predicción de propiedades del agua en condiciones extremas.<sup>4</sup> Estas simulaciones permiten analizar el paso del líquido metaestable hasta la cavitación del sistema y el crecimiento de las burbujas en el seno del mismo. El método MFPT monotoriza el primer tiempo de aparición de la burbuja más grande durante la simulación para lo que es necesario examinar la evolución de un parámetro de orden local.

En nuestro caso el parámetro de orden es el volumen de la burbuja más grande dentro del líquido metaestable y para determinar éste hemos utilizado dos vías diferentes. Por medio de los poliedros de Voronoi,<sup>5,6</sup> somos capaces de determinar el volumen de la burbuja y seguir su desarrollo de una forma precisa pero con un importante coste computacional. El otro método es la utilización de un grid más unos criterios de clasificación basados en el números de vecinos para diferenciar el líquido del vapor. Estos dos métodos convergen en valores comparables lo cual afianzan su utilización y la validez del MFPT como herramienta para estudiar el mecanismo de cavitación del

agua.

Con esta información nos hemos embarcado en el estudio del mecanismo de nucleación del agua por debajo y por encima de la línea espinodal. Se ha comprobado que, tanto las barreras de nucleación como la física del proceso es diferente a ambos lados de la espinodal (Figura 1). Estas diferencias se podrán comentar en la contribución.

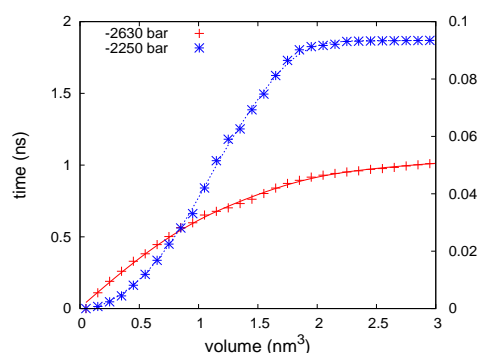


FIG. 1. MFPT en función del volumen para el model TIP4P/2005, calculado a  $T=280\text{K}$  y a dos presiones diferentes.  $p=-2630\text{bar}$  (cruces rojas), condiciones por debajo de la línea espinodal y  $p=-2250\text{bar}$  (asteriscos azules), valor de presión por encima de la espinodal.

\* abascal@quim.ucm.es

<sup>1</sup> J. Wedekind, R. Strey, and D. Reguera, J. Chem. Phys. 126, 134103 (2007).

<sup>2</sup> L. S. Bartell, and D. T. Wu, J. Chem. Phys. 125, 194503 (2006).

<sup>3</sup> J. L.F. Abascal, and C. Vega, J. Chem. Phys. 123, 234505 (2005).

<sup>4</sup> C. Vega, and J. L.F. Abascal, Phys. Chem. Chem. Phys. 13, 19663 (2011).

<sup>5</sup> J. C. Gil Montoro, and J. L.F. Abascal, J. Chem. Phys. 99, 4231 (1993).

<sup>6</sup> J. C. Gil Montoro, F. Bresme, and J. L.F. Abascal, J. Chem. Phys. 101, 10892 (1994).