

## Determinación de propiedades derivadas segundas de alcanos de cadena larga mediante Monte Carlo NPT

M. M. Piñeiro,<sup>\*</sup> G. S. de Ferron<sup>†</sup>, J. M. Míguez, D. Bessièrès<sup>†</sup>, F. Plantier<sup>†</sup>, J. L. Legido  
*Departamento de Física Aplicada*  
*Universidade de Vigo*  
*36310 Vigo*

En un trabajo reciente, Lagache et al<sup>1</sup> demostraron la idoneidad de la combinación de la simulación molecular (Monte Carlo en el conjunto NPT) con la teoría estadística de fluctuaciones para calcular las propiedades derivadas segundas de la energía de Gibbs para moléculas lineales (cadenas). Este método demostró ser eficaz en el cálculo del coeficiente de expansión térmica, compresibilidad isoterma, capacidad calorífica residual isóbara e isócara, velocidad del sonido y coeficiente de Joule Thompson. En el trabajo original se aplicó la técnica a alcanos de cadena corta, y se extendió luego a una mezcla compleja simulando un condensado de gas natural. (Lagache et al.<sup>2</sup>). En este trabajo se ha aplicado la misma metodología para calcular el conjunto de propiedades citadas para alcanos lineales de cadena larga, del decano al eicosano. Los alcanos fueron modelizados usando el potencial de átomos unidos propuesto por Martin y Siepmann<sup>3</sup>, conocido como modelo TraPPE. Los resul-

tados permiten hacer un análisis del efecto de la longitud de la cadena en la estimación de estas propiedades derivadas.

Agradecimientos: Los autores agradecen al CESGA (Santiago de Compostela, España), por permitir el uso de sus servidores de cálculo.

---

\* mmpineiro@uvigo.es

† Laboratoire des Fluides Complexes, Groupe Haute Pression, Université de Pau et des Pays de l'Adour, B.P. 1155, 64013 Pau Cedex, France

<sup>1</sup> Lagache, M.; Ungerer, P.; Boutin, A.; Fuchs, A. H., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 3 4333-49 2001.

<sup>2</sup> Lagache M. H., Ungerer, P.; Boutin A., *Fluid Phase Equilibria*, 220 (2): 211-23 2004.

<sup>3</sup> Martin, M. G.; Siepmann, J. I., *J. Phys. Chem. B*, 102, 2569-77, 1998.