
Seminario ICTS: Dinámica Molecular en los Fosfatos de Zirconio

- Modificado (03.11.2010)

Ponente: Amaia Saracibar - Università degli Studi di Perugia, Italy

Día y hora: Jueves 4 de Noviembre a las 12:00h.

Lugar: Sala de presentaciones del edificio de la Fundación CESGA, Avda. de Vigo s/n, 15705, Santiago de Compostela.

La investigación estructural de los fosfatos de zirconio así como el cálculo de su conductividad protónica es de gran interés debido a su aplicación tecnológica en el diseño de las membranas utilizadas en las pilas de combustible. Estos compuestos han sido ampliamente estudiados desde el punto de vista experimental. Se han determinado así dos estructuras cristalinas con una transición de fase entre ellas a 450K y también se ha medido la conductividad protónica de ambas estructuras.

Desde el punto de vista teórico, el objetivo es simular haciendo uso de la dinámica molecular tanto la transición de fase como la conductividad protónica. El primer paso de la simulación consiste en implementar el campo de fuerzas de las estructuras de los compuestos en el programa de dinámica molecular (DL_POLY) utilizado. Esta implementación resulta difícil debido al elevado número de átomos de la celda unidad de la red cristalina de los compuestos. Además, en la simulación de una transición de fase sólido-sólido, ha de considerarse una parte representativa del cristal por lo que han de incluirse un elevado número de celdas. Solventar estas dificultades en la implementación del campo de fuerzas ha sido el objetivo del presente trabajo. Se ha puesto a punto un procedimiento semiautomático para generar de forma sencilla campos de fuerzas en el ámbito de la dinámica molecular. Dicho procedimiento ha consistido en combinar una serie de scripts programados en AWK con el programa MOLGEOM de modo que se genere el fichero de entrada que describe el campo de fuerzas de forma automática. Utilizando el procedimiento desarrollado se ha implementado el campo de fuerzas no sólo en una única celda unidad, sino también en celdas más grandes dando un paso inicial para la simulación de las transiciones de fase y del cálculo de sus conductividades protónicas con los modelos teóricos existentes.