
Seminario ICTS: Dinámica Molecular nos Fosfatos de Zirconio

- Actualizado (03.11.2010)

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

Día e hora: Xoves 4 de Novembro ás 12:00h.

Lugar: Sala de presentacións do edificio da Fundación CESGA, Avda. de Vigo s/n, 15705, Santiago de Compostela.

A investigación estrutural dos fosfatos de zirconio, así como o cálculo da súa conductividade protónica, é de grande interese debido a súa aplicación tecnolóxica no deseño das membranas utilizadas nas pilas de combustible. Estes compostos foron amplamente estudados dende o punto de vista experimental. Determináronse así dúas estruturas cristalinas cunha transición de fase entre elas a 450K, e tamén se mediu a conductividade protónica de ambas estruturas.

Dende o punto de vista teórico, o obxectivo é simular facendo uso da dinámica molecular, tanto a transición de fase como a conductividade protónica. O primeiro paso da simulación consiste en implementar o campo de forzas das estruturas dos compostos no programa de dinámica molecular (DL_POLY) utilizado. Esta implementación resulta difícil debido ao elevado número de átomos da celda unidade da rede cristalina dos compostos. Ademais, na simulación dunha transición de fase sólido-sólido, tense que considerar unha parte representativa do cristal polo que hai que incluír un elevado número de celdas. Solventar estas dificultades na implementación do campo de forzas foi o obxectivo do presente traballo. Púxose a punto un procedemento semiautomático para xerar de forma sinxela campos de forzas no ámbito da dinámica molecular. Dito procedemento consistiu en combinar unha serie de scripts programados en AWK, co programa MOLGEOM, de modo que se xere o ficheiro de entrada que describe o campo de forzas de forma automática. Utilizando o procedemento desenvolvido implementouse o campo de forzas, non só nunha única celda unidade, senon tamén en celdas máis grandes dando un paso inicial para a simulación das transicións de fase e do cálculo das súas conductividades protónicas cos modelos teóricos existentes.