



Modelo SPC/E del agua



Minerva González Melchor, Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas” BUAP

El modelo SPC/E fue desarrollado en 1987 por Berendsen y colaboradores [1]. La molécula es rígida, no polarizable y tiene tres sitios. La geometría está definida por un ángulo tetraédrico de 109.47° y una distancia de enlace O-H de 1\AA . Hay una carga negativa en el átomo de oxígeno y cargas positivas sobre los hidrógenos. Además de interacciones de Coulomb, las moléculas tienen un sitio LJ situado en los oxígenos. El potencial entre dos moléculas A y B es

$$u_{AB} = 4 \epsilon_{OO} \left[\left(\frac{\sigma_{OO}}{r_{OO}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{OO}}{r_{OO}} \right)^6 \right] + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{q_i q_j}{r_{ij}}, \quad (1)$$

donde r_{ij} es la distancia entre los sitios i y j , q_i es la carga eléctrica del sitio i , ϵ_0 es la permitividad del vacío, ϵ_{OO} es el parámetro LJ de energía y σ_{OO} es el parámetro LJ de longitud para el par oxígeno-oxígeno. La geometría y parámetros SPC/E se resumen en la figura y la tabla 1.

parameter	value
σ	3.166 \AA
ϵ	0.650 kJmol^{-1}
r_{OH}	1.0 \AA
\angle_{HOH}	109.47°

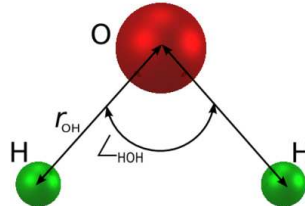


Figura 1: Geometría de la molécula SPC/E del agua, figura tomado de sklogwiki [2].

Tabla 1: **Parámetros del modelo SPC/E**, $\mu = q_H [2 r_{OH} \cos(\theta/2)]$.

	$r_{OH}(\text{\AA})$	$\theta(^{\circ})$	$q_H(e)$	$q_O(e)$	$\mu(D)$	$\sigma(\text{\AA})$	$\epsilon/k_B(K)$
SPC/E	1.0	109.47	+0.4238	-0.8476	2.351	3.166	78.2

Bibliografía

[1] H.J.C. Berendsen, J.R. Grigera, T.P. Straatsma, *J. Phys. Chem.* **91**, 6269 (1987).

[2] http://www.sklogwiki.org/SklogWiki/index.php/SPC/E_model_of_water