

Experimento N°1

Felipe Halabi

Departamento de física, Universidad Nacional Andrés Bello, Santiago, Chile

Física Computacional de la Materia

26 de Abril 2024

Resumen

El objetivo de este experimento es estudiar la interacción de los átomos para una celda del gas noble Xenon, en el cual se analizara el comportamiento de la temperatura, energía cinética, energía potencial, distribución de átomos y el número de coordinación a través de simulaciones computacionales en el software Las Palmeras Molecular Dynamics (LPMD).

Introducción

El Xenón (Xe) es un elemento químico perteneciente al grupo de los gases nobles, con número atómico 54. Es un gas incoloro, inodoro, y no reactivo en condiciones normales, conocido por su estabilidad química y su baja reactividad debido a su configuración electrónica completa. A diferencia de otros gases nobles más ligeros como el helio, el xenón puede formar algunos compuestos en condiciones extremas debido a su mayor número de electrones y su capacidad para expandir su capa de valencia.

El Xenón cristaliza en estructuras cúbicas centradas en las caras (FCC) a bajas temperaturas, lo que significa que en estado sólido sus átomos están dispuestos en una red en la que cada átomo tiene 12 vecinos más cercanos, en una disposición de alta simetría y densidad empaçada.

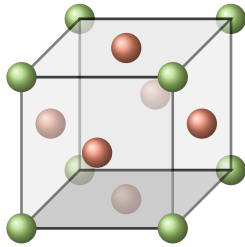


Figura 1: Estructura FCC

Para la construcción de la estructura cristalina del Xenón (Xe), también es necesario considerar 3 aristas y 3 ángulos que permiten formar su modelo estructural. En el caso del xenón en estado sólido, cristaliza en una estructura cúbica centrada en las caras (FCC), que se caracteriza por tener átomos en cada vértice del cubo y en el centro de cada una de sus caras.

Las aristas a , b , y c corresponden a los lados del cubo que forman la red cúbica de alta simetría. En esta estructura, todos los ángulos α , β y γ son de 90° , ya que la disposición cúbica implica ángulos rectos entre los ejes del cubo.

El radio atómico del xenón sólido en la red FCC es de aproximadamente 4.34 \AA , lo que proporciona la distancia entre los centros de los átomos adyacentes. Esta disposición geométrica de alta densidad empaqueta los átomos de manera eficiente en tres dimensiones.

Una de las propiedades distintivas del xenón es su relativamente alto punto de ebullición comparado con otros gases

nobles más ligeros. El xenón hierve a una temperatura de 165.03 K (-108.12°C).

Al ser un elemento en el cual se encuentra en temperaturas bajo el umbral de los 0°C , para lograr llegar al estado de solidificación es necesario que este gas se encuentre a una temperatura de 4 K , esta solidificación no se encuentra en situaciones comunes por lo que esta fase sería rara de formularse al no ser una estructura cristalina. Al existir una cantidad de átomos que interactúan entre ellos, es esencial hablar del potencial propuesto por Lennard Jones en 1924[3]. Este potencial describe la energía potencial del estado ligado de una molécula diatómica para una configuración electrónica dada, esta interacción viene dada mediante la siguiente ecuación:

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

Donde $U(r)$ es la energía potencial intermolecular en función de la distancia de separación entre un par de moléculas, ϵ es la profundidad del pozo potencial en Joule y σ es el valor finito de la distancia en Ångströms A en el cual el potencial entre partículas se vuelve cero. Gracias a un artículo publicado el año 2013 por Seung-Kyo Oh, es posible obtener los parámetros del potencial de Lennard-Jones para los gases nobles mediante la siguiente tabla.

Group	$\sigma/\text{\AA}$	$(\epsilon/k_B)/K$	τ/K
Helium	2.628	5.465	-0.836
Neon	2.775	36.831	-2.468
Argon	3.401	116.81	5.642
Kripton	3.601	164.56	11.41
Xenon	4.055	218.18	13.09

Tabla 1: Parametros Lennar-Jones

Para continuar, es necesario hablar del efector de "Termalización", en un tiempo t el ensamble adquiere una temperatura promedio estable y constante.

Procedimiento

Este experimento se realizó a través de una simulación utilizando el software LPMD, que corresponde a un código libre de dinámica molecular creado por S. Davis, C. Loyola, F.

González y J. Peralta. Mediante este software se construyo una celda cristalina cubica compacta del elemento Xenon con un parametro de red de 24.52, es decir cuatro celdas unitarias en cada eje cartesiano. Para las interacciones de los átomos se ocupo el potencial de Lennard-Jones mediante el plugins *lennardjones*. El codigo utilizado para este experimento es:

```
cell cubic 24.52
imput crystal3d type=fcc
      symbol=Xe nx=4 ny=4 nz=4
output xyz output.xyz each=10
steps 40000
start=0 end=-1 each=100
prepare temperature =4.0
use lennardjones
      sigma 4.05
      epsilon 0.0188012
      cutoff 15.3
```

Luego de realizar la simulación entrego un Xenon.dat en cual entrego información acerca de la energía cinetica, energía potencial, energía total y temperatura en función de los pasos realizados por la simulación.

Ademas, para poder analizar $g(r)$ que en la densidad de átomos en una simulación y numero de coordinación se utilizo el comando *lpmd - analyzer* cuyo codigo a ejecutar era:

```
cell cubic 24.52
use minimuimage
      cutoff 15.3
      debug none
enduse
usegdr
      rcut 10.0
      output gdr.dat
      average true
      debug none
enduse

use cordnumfunc as cnf
bins 200
atoms 2 Xe
rcut 10
output cnf.dat
average true
enduse

property gdr
property cnf
```

Cuyos archivos grd.dat entrego una distribución de densidad y cnf.dat una distribución acumulativa de sus proximos vecinos. Los cuales están a una distancia $d_1 = 4,291\text{\AA}$, $d_2 = 6,13\text{\AA}$ $d_3 = 7,5\text{\AA}$.

Analisis y Resultados

Energía

Usando el potencial de Lennard-Jones, la energía cinética interactúa con la energía potencial (que se calcula a partir de las fuerzas intermoleculares entre átomos). En cada paso de la simulación, la energía se transfiere entre cinética y potencial, de acuerdo con las interacciones y colisiones entre los átomos.

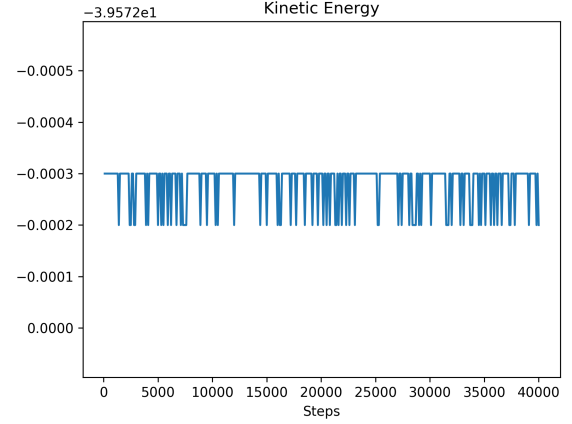


Figura 2: Energía Cinetica

El potencial de Lennard-Jones modela la interacción entre átomos de Xenón a través de una combinación de fuerzas atractivas de van der Waals a largas distancias y repulsión fuerte a distancias cortas debido a la superposición de nubes electrónicas. Este potencial tiene un mínimo de energía en una distancia de equilibrio, lo que representa la interacción más estable entre los átomos. Para el Xenón, su profundidad ϵ es relativamente alta, debido a su mayor polarizabilidad, lo que influye en sus propiedades macroscópicas como su punto de ebullición y su estabilidad en fases líquidas.

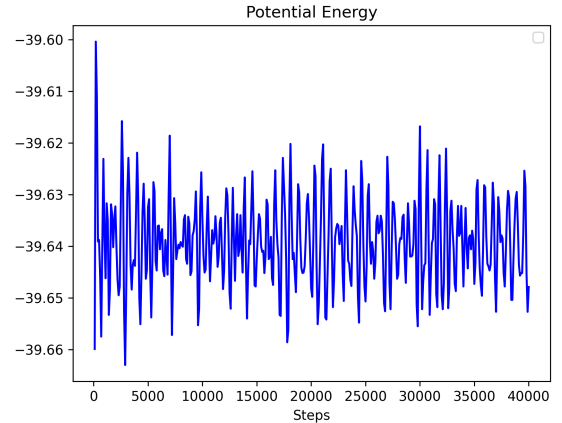


Figura 3: Energía Potencial

La energía total del Xenón refleja el estado energético

global del sistema, equilibrando el movimiento de los átomos (energía cinética) y sus interacciones intermoleculares (energía potencial). Dado que la energía total permanece constante, indica que no hay pérdidas ni ganancias de energía externa.

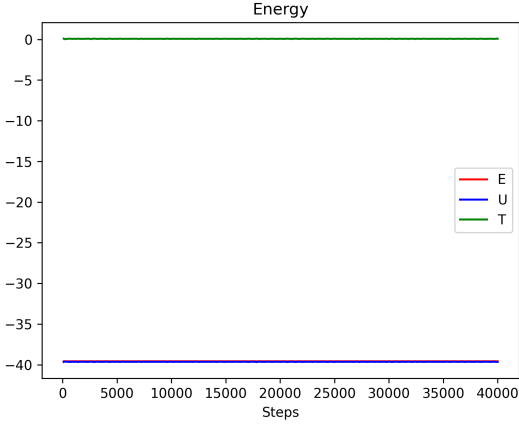


Figura 4: Energía Total

Temperatura

A una temperatura promedio de 2K, el sistema ha alcanzado una temperatura extremadamente baja, lo que implica que la energía cinética de los átomos de Xenón es mínima. En este rango de temperatura, los átomos tienen muy poca energía térmica para moverse, lo que favorece un estado sólido o cristalino.

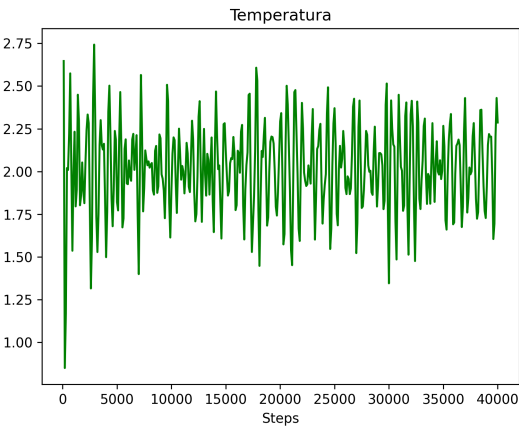


Figura 5: Temperatura

Distribución de pares

Dado que la geometría del Xenon es FCC, tiene distribuidos 4 átomos en la celda unitaria. los peaks más altas son los átomos centrados en la cara, eso quiere decir que tiene una

mayor concentración de átomos que en sus aristas, los cuales son los peaks mas bajos.

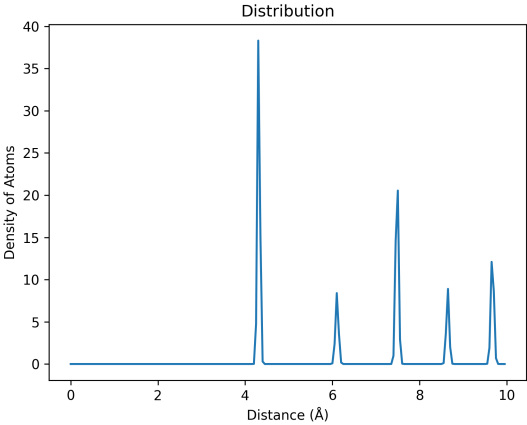


Figura 6: Temperatura

Numero de Coordinación

Tambien llamado ligancia de un átomo central en una molecula o cristal, es el número de átomos, moléculas o iones unidos a él.

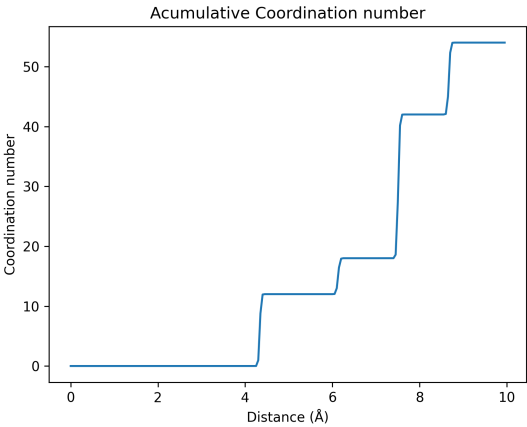


Figura 7: Numero de coordinación acumulativa

En cuyo caso tiene 12 primeros vecinos a una distancia d_1 , 6 a una distancia d_2 y 24 a una distancia d_3 , las cuales fueron descritas anteriormente.

Conclusión

Podemos concluir que es un ensamble microcanónico como la energía total es constante. Internamente la energía cinética y potencial varían, ya que las partículas pueden intercambiar energía entre ellas debido a colisiones o interacciones. Además el número de coordinaciones nos confirma que el Xenon tiene una estructura fcc, dado que a la distancia d_1 tiene 12 vecinos.