

Simulación Molecular Del Proceso De Fusión De Materiales Utilizados En El Almacenamiento
De Energía

Daniel Santiago Gordillo Camelo y Trino Javier Carreño Ballesteros

Trabajo de grado para optar al título de Ingeniero Químico

Modalidad de trabajo de investigación

Director

Giovanni Morales Medina

Ing. Químico, Dr.

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Fisicoquímicas

Escuela de ingeniería Química

Bucaramanga

2024

Dedicatorias

A mi madre, Myriam Camelo Porras por ser la fuente de mi amor, dedicación y fortaleza. Gracias por tus incontables sacrificios y por tu apoyo incondicional.

A la persona quien ha sido un padre para mí, Darío Castañeda Páez. Gracias por tus palabras de aliento y por enseñarme el valor del trabajo duro y la perseverancia.

A mi abuelo, Alfonso Camelo por ser mi refugio y mi mayor tesoro. Gracias por cada palabra de aliento, por cada gesto de cariño y por su inquebrantable apoyo. Son la base fundamental de mi vida y les agradezco infinitamente su amor.

A mi hermana, Mónica Gordillo Camelo: Por tu bondad infinita, por tus sabios consejo, agradezco profundamente tu presencia en mi vida. Los lazos que nos unen son invaluable.

A Samantha Flórez Viancha, quien ha sido mi compañera y apoyo en este camino tan importante, quiero dedicarte estas palabras para expresar la inmensa gratitud que siento por ti.

Santiago

A mi madre, Graciela Ballesteros Cruz: Mamá, eres la luz que ilumina mi camino, la melodía que armoniza mi corazón y la mano que me sostiene en los momentos difíciles. Gracias por ser mi refugio, mi confidente y la mujer que me inspira a ser mejor cada día.

A mi padre Trino Carreño Gómez: por enseñarme el valor del trabajo duro, la perseverancia y la honestidad.

A mi abuelo, Luis francisco Ballesteros: Aunque ya no estés físicamente presente, tu recuerdo sigue vivo en mi corazón con una luz radiante e inquebrantable. Agradezco profundamente el tiempo que compartimos, las valiosas enseñanzas que me dejaste y el amor incondicional que siempre me brindaste.

A mi familia, mi tesoro máspreciado: familia, ustedes son mi universo, mi refugio en la tormenta y la fuente de alegría incondicional. Gracias por su apoyo incondicional, por sus palabras de aliento y por siempre estar presentes en mi vida. Son la base fundamental de mi ser y les estoy infinitamente agradecido por todo lo que hacen por mí.

Agradecimientos

A Dios: Por ser la fuente de mi sabiduría y fortaleza. Gracias por guiar mis pasos y por darme la salud para alcanzar mis sueños.

A mi familia: Por ser mi pilar fundamental. Gracias por sus palabras de aliento, por su apoyo incondicional y por creer en mí siempre. Los amo profundamente.

Al profesor Giovanni Morales Medina: Por ser un maestro excepcional. Gracias por compartir su conocimiento con tanta pasión, por su paciencia infinita y por su invaluable guía durante mi proceso de aprendizaje.

A las personas que se ha convertido en grandes amigos: Por su apoyo incondicional en los momentos más difíciles y por ayudarme a superar obstáculos. Gracias por su amistad sincera y por ser parte fundamental de mi vida.

Tabla Contenido

Introducción.....	10
1. Objetivos	12
1.1 Objetivo General	12
1.2 Objetivos Específicos	12
2. Marco Conceptual	13
3. Marco Teórico	15
4. Estado Del Arte	20
5. Metodología.....	22
6. Análisis Resultados	25
6.1 Selección Del Material Pcm	25
6.2 Simulación Del Proceso De Fusión Del <i>N</i> -Octadecano.	31
6.3 Variación De Las Propiedades	34
7. Conclusiones.....	41
8. Recomendación.....	41
Bibliografía.....	42
Apéndice	48

Tabla de figuras

Figura 1. <i>Enfoque metodológico aplicado para el desarrollo de la investigación.</i>	22
Figura 2. <i>Estructura n-octadecano.</i>	32
Figura 3. <i>Configuración inicial y final de la caja de simulación n-octadecano obtenida con Packmol.</i>	32
Figura 4. <i>Disposición espacial de algunas moléculas aisladas después de la simulación.</i>	33
Figura 5. <i>Evolución de la temperatura respecto al tiempo de simulación.</i>	33
Figura 6. <i>Gráfica resultados de la energía potencial respecto al número de pasos del cambio de fase obtenidos por la simulación y los experimentales.</i>	34
Figura 7. <i>Gráfica resultados de la energía cinética respecto al número de pasos del cambio de fase obtenidos por la simulación y los experimentales.</i>	34
Figura 8. <i>Tendencia de la energía de Van Der Waals durante la simulación.</i>	36
Figura 9. <i>Gráfica de la distribución radial (RDF) para las diferentes temperaturas.</i>	37
Figura 10. <i>Tendencia de la viscosidad con el tiempo de simulación.</i>	38
Figura 11. <i>Gráfica del desplazamiento medio cuadrático (MSD) con el tiempo de simulación.</i>	39
Figura 12. <i>Totalidad de átomos, enlaces, ángulos, diedros del n-octadecano</i>	50
Figura 13. <i>Sección de átomos del n-octadecano</i>	52
Figura 14. <i>Sección de enlaces del n-octadecano</i>	52
Figura 15. <i>Sección de ángulos del n-octadecano</i>	53
Figura 16. <i>Sección de diedros del n-octadecano.</i>	53
Figura 17. <i>Clasificación de materiales PCM.</i>	68
Figura 18. <i>Infografía simulación</i>	69

Lista De Tablas

Tabla 1. <i>Resumen estado del arte</i>	20
Tabla 2. <i>Material bibliográfico de materiales PCM</i>	25
Tabla 3. <i>Tipos y características de materiales PCM</i>	27
Tabla 4. <i>Ventajas y desventajas de los materiales PCM</i>	29
Tabla 5. <i>Parafinas utilizadas como PCM</i>	31
Tabla 6. <i>Funciones archivo "mod" estabilizacion n-octadecano</i>	48
Tabla 7. <i>Estructura inicial data del n-octadecano</i>	51
Tabla 8. <i>Estructura de átomos - archivo data asociado al n-octadecano</i>	53
Tabla 9. <i>Estructura de enlaces - archivo data asociado al n-octadecano</i>	54
Tabla 10. <i>Estructura de ángulos - archivo data asociado al n-octadecano</i>	54
Tabla 11. <i>Estructura de diedros - archivo data asociado al n-octadecano</i>	54
Tabla 12. <i>Archivo "in" utilizado en la simulación del n-octadecano</i>	55
Tabla 13. <i>Archivo "in.viscosidad" utilizado en la simulación del n-octadecano</i>	61
Tabla 14. <i>Parámetros potenciales de Lennard-Jones para diferentes partículas</i>	67
Tabla 15. <i>Los valores de la distancia del resorte en los tipos de eslabones simples presentes en el cuadro de simulación</i>	67
Tabla 16. <i>Valores fijos utilizados en interacciones angulares simples dentro del cuadro de simulación</i>	67
Tabla 17. <i>Valores fijos utilizados en las interacciones del ángulo diédrico</i>	68

Lista de Apéndices.

Apéndice A. Código “ <i>mod</i> ” empleado en la simulación molecular para el cambio de fase para el <i>n</i> -octadecano LAMMPS.....	48
Apéndice B. Código “ <i>data</i> ” empleado en la simulación molecular para el cambio de fase para el <i>n</i> -octadecano LAMMPS.....	50
Apéndice C. Código “ <i>In</i> ” empleado en la simulación molecular para el cambio de fase para el <i>n</i> -octadecano LAMMPS.	55
Apéndice D. Código “ <i>In.viscosidad</i> ” empleado en la simulación molecular para el cambio de fase para el <i>n</i> -octadecano LAMMPS	61
Apéndice E. Parámetros y datos adicionales empleado en la simulación molecular para el cambio de fase para el <i>n</i> -octadecano LAMMPS	66

Resumen

Título: Simulación Molecular Del Proceso De Fusión De Materiales Utilizados En El Almacenamiento De Energía.*

Autor: Trino Javier Carreño Ballesteros, Daniel Santiago Gordillo Camelo.**

Palabras Clave: Simular molecular, LAMMPS, materiales PCM, cambio de Fase.

Descripción:

La transición hacia fuentes de energía renovables ha despertado un interés creciente en la optimización de su eficiencia y la superación de sus desafíos inherentes. Un enfoque crítico para mejorar la sostenibilidad de estas fuentes es la innovación en sistemas de almacenamiento de energía eficientes que disminuyen la dependencia de los combustibles fósiles en el suministro de energía cotidiano. Los materiales de cambio de fase (PCM) juegan un papel crucial en estos sistemas, ya que tienen la capacidad de almacenar y liberar grandes volúmenes de energía durante el cambio de fase, manteniendo una temperatura casi constante. Este estudio se centra en la exploración del comportamiento de la parafina, un PCM ampliamente reconocido, a nivel molecular. Se emplea un espacio rectangular como caja de simulación para observar cómo se comporta la parafina en diversos estados. Se evalúa inicialmente el rendimiento térmico del PCM, analizando cómo su temperatura influye en factores clave como la viscosidad, el flujo de calor, la conductividad térmica y el tiempo de cambio de fase.

Además, se llevan a cabo análisis exhaustivos de perfiles de energía, que incluyen potencial cinético, energía potencial de Van der Waals, viscosidades, perfiles RDF (función de distribución radial) y MSD (desplazamiento cuadrático medio). Estos análisis ofrecen una comprensión más profunda de las propiedades termodinámicas y estructurales de la parafina en diferentes condiciones, la investigación muestra que aumentar la temperatura inicial (de 300 K a 350 K) mejora el rendimiento del PCM lo que contribuye a optimizar su aplicación en sistemas de almacenamiento.

*Trabajo de grado

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Ingeniería Química. Director: Giovanni Morales Medina. PhD en Ingeniería Química.

Abstract

Title: Molecular Simulation of the Fusion Process of Materials Used in Energy Storage.*

Autor: Trino Javier Carreño Ballesteros, Daniel Santiago Gordillo Camelo.**

Keywords: Molecular simulation, LAMMPS, PCM materials, phase change.

Description:

The transition to renewable energy sources has sparked a growing interest in optimizing their efficiency and overcoming their inherent challenges. A critical approach to improving the sustainability of these sources is innovation in efficient energy storage systems, which decrease reliance on fossil fuels in everyday energy supply. Phase change materials (PCMs) play a crucial role in these systems, as they can store and release large volumes of energy during phase change, maintaining a near-constant temperature.

This study focuses on exploring the behavior of paraffin, a widely recognized PCM, at the molecular level. A rectangular space is used as a simulation box to observe how paraffin behaves in various states. The thermal performance of the PCM is initially evaluated, looking at how its temperature influences key factors such as viscosity, heat flow, thermal conductivity, and phase change time.

In addition, comprehensive analyses of energy profiles are carried out, including kinetic potential, Van der Waals potential energy, viscosities, RDF (radial distribution function) and MSD (mean square shift) profiles. These analyses offer a deeper understanding of the thermodynamic and structural properties of paraffin under different conditions, the research shows that increasing the initial temperature (from 300 K to 350 K) improves the performance of the PCM which contributes to optimizing its application in storage systems.

* Bachelor Thesis.

** Faculty of Physicochemistry. School of Chemical Engineering. Director Giovanni Morales Medina

Introducción

En 2022, la generación global de electricidad registró un hito histórico al reducir la intensidad de carbono al valor de 436 gCO₂/kWh, lo que representa un logro en la electricidad limpia producida. Este logro se debe principalmente al crecimiento de las energías eólica y solar, las cuales alcanzaron una participación del 12% en la matriz eléctrica mundial, en comparación con el 10% registrado en 2021 (Małgorzata Wiatros, Jones, Broadbent, & Fulghum, 2023). El aumento rápido en la capacidad de las energías renovables sugiere que podrían llegar a ser representativas, igualando al carbón, en términos de generación de electricidad en las próximas décadas, siempre y cuando las condiciones climáticas y otras condiciones sean favorables. (IEA, 2023). Como se evidencia las energías renovables tienen importancia significativa en diferentes aspectos, tanto a nivel ambiental, económico y social. Asimismo, Los materiales de cambio de fase (PCM) han sido reconocidos como elementos cruciales en la gestión del almacenamiento y conservación de energía. Los PCM y sus combinaciones se han utilizado en diversas aplicaciones, y se ha publicado una cantidad significativa de literatura que resalta el potencial uso del PCM como material para el almacenamiento de energía térmica (TES). (Abdul, Shima, & Zainal, 2020). La importancia de estos materiales se encuentra en sus características fisicoquímicas durante el proceso de fusión, el cual puede ser simulado por métodos moleculares.

La gama de PCMs analizados pueden ser clasificados en tres grupos principales: materiales inorgánicos, orgánicos y eutécticos. Cada uno de estos grupos presenta ventajas y desventajas que afectarán su uso final. Dentro de los materiales inorgánicos, las sales hidratadas son especialmente importantes debido a su mayor densidad de almacenamiento volumétrico (aproximadamente 350 MJ/m³) y su conductividad térmica relativamente mayor (aproximadamente 0,5 W/m·K) en comparación con los materiales orgánicos (Feijóo, Álvarez, Fuerte, Arce, & Ergenc, 2022). El polietilenglicol (PEG) es uno de los PCM más investigados y presenta varias ventajas significativas. Estos incluyen un alto calor de fusión, facilidad de modificación química, buena biocompatibilidad, respeto al medio ambiente y un comportamiento de fusión congruente, entre otros; aunque el PEG se considera un PCM prometedor, existen dos inconvenientes que limitan sus aplicaciones, estos son la temperatura de transición de fase, que generalmente se encuentra entre los 22 y 28 °C, y el grado de sobre enfriamiento relativamente alto (Yu, Jia, Liu, & Yang,

2023). En la síntesis de PCM eutécticos para aplicaciones de TES a baja temperatura, los ácidos grasos (AG) se utilizan ampliamente debido a sus propiedades termo físicas estables, su no toxicidad y su rentabilidad (Abdul, Shima, & Zainal, 2020). El ácido láurico (LA, $\text{CH}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_2$) es un tipo de PCM orgánico que presenta propiedades térmicas excelentes, que incluyen una temperatura de cambio de fase media adecuada (60°C), un alto calor latente (170-200 J/g), una excelente estabilidad química, un bajo subenfriamiento, baja toxicidad y bajo costo en la fabricación de estructuras laminares hidrofílicas. Sin embargo, también tiene desventajas como baja conductividad térmica y fugas, debido a su estructura porosa, entre otras, que limitan en gran medida su aplicación a gran escala en el campo del almacenamiento de energía térmica (Wang, y otros, 2022).

Por su parte, los métodos de simulación molecular han sido aplicados en el análisis de los PCM. Estos métodos facilitan el estudio de su estructura, mecanismos de cambio de fase, conductividad térmica, temperatura de fusión entre otros, abriendo un abanico de posibilidades para el diseño de nuevos PCMs con aplicaciones en almacenamiento y aislamiento térmico. Por ejemplo, la simulación de dinámica molecular sobre mejora térmica de PCMs basados en nanotubos de carbono (CNT) reportó resultados de una mejora de la conductividad térmica con el uso de CNT comparado con los PCM puros (Dua Y. , Zhou, Zhao, & Dingc, 2022). Asimismo, la creación de una estructura optimizada con buena afinidad de unión y estabilidad de simulación dinámica molecular se realizaron para comprender la estabilidad a 50 ns, que permite una mejor reproducción de datos experimentales dentro del sitio activo del compuesto. (El Bakri, El Hassane, Subramani, Ben Yahya, & El Mokhtar , 2020)

Con lo descrito anteriormente, en este documento se presentan los resultados más relevantes respecto a la aplicación de la simulación molecular en el análisis del comportamiento de un PCM durante su cambio de fase. La pregunta de investigación correspondió a: ¿cuáles son las tendencias en las propiedades de un material PCM durante su proceso de fusión (almacenamiento de energía)?

1. Objetivos

1.1 Objetivo General

- Analizar las propiedades de los materiales PCM durante el almacenamiento de energía mediante la aplicación del método de dinámica molecular.

1.2 Objetivos Específicos

- Definir un material PCM con base en una revisión de literatura, considerando los indicadores frecuencia de aplicación, campo de fuerza utilizado, cantidad de energía, disponibilidad, impacto ambiental y costo, para su análisis por dinámica molecular.
- Establecer la geometría molecular del material PCM seleccionado, con base en reportes de literatura y cálculos de optimización geométrica, para la construcción de la simulación.
- Determinar las modificaciones en las propiedades del material PCM durante su cambio de fase, por medio de los resultados de simulaciones por dinámica molecular.

2. Marco Conceptual

Conductividad térmica: Capacidad de los materiales de transferir calor, los materiales que transfieren el calor rápidamente se consideran de alta conductividad, y aquellos que lo hacen de manera lenta se consideran de conductividad baja.

Dinámica molecular: Técnica de simulación por computadora donde se estudia el movimiento y las interacciones de las moléculas.

Energía: Capacidad de realizar trabajo, hay diversas formas de energía, como energía cinética, energía potencial, energía térmica entre otras.

Materiales de cambio de fase: Materiales que cambian de estado físico (sólido, líquido y gaseoso), al absorber o liberar energía.

Materiales eutécticos: Mezcla de materiales que se funden a temperatura menor que la de sus componentes individuales

Materiales inorgánicos: Materiales sin base de carbón

Materiales orgánicos: Materiales con base de carbón

Campo de fuerza: Funciones matemáticas que describen las fuerzas interatómicas entre las partículas de un sistema, usadas para determinar el movimiento y las interacciones entre moléculas.

Geometría molecular: Forma tridimensional de la molécula.

En las simulaciones de dinámica molecular (MDS), se monitorizan diversas propiedades físicas para obtener información sobre el comportamiento del sistema. Algunas de las propiedades más importantes son:

Presión: Es una medida de la fuerza que ejercen las moléculas sobre las paredes del contenedor. En un MDS, la presión se puede calcular a partir de la siguiente ecuación:

$$P = \frac{NkBT}{V} + \frac{1}{3} \sum_i r_i f_i \quad (\text{ec.1})$$

Donde N es el número de partículas simuladas, K_B es la constante de Boltzmann, T es temperatura, V es volumen, r_i es la ubicación de la partícula i y f_i es la fuerza sobre la partícula i .

Energía cinética: Es la energía asociada al movimiento de las moléculas. Se calcula como:

$$K = \sum_i \frac{1}{2} m_i v_i^2 \quad (\text{ec.2})$$

Donde m_i es la masa de la partícula y v_i es la velocidad de la i partícula.

Energía potencial: Es la energía almacenada en las interacciones entre las moléculas. Se calcula a partir de:

$$U = \sum_{ij} u_{ij} \quad (\text{ec.3})$$

donde u_{ij} es la interacción atómica mutua de las partículas i y j .

En el apéndice E se presenta la tabla 1 que contiene algunos valores típicos de los parámetros para diferentes tipos de partículas.

3. Marco Teórico

3.1 Dinámica molecular

La dinámica molecular es un modelo que busca encontrar las características de un sistema de partículas a partir de sus interacciones (campo de fuerza) y la evolución del sistema según la aplicación de las leyes del movimiento de Newton (física clásica). Comúnmente, la dinámica molecular es aplicada por medio de software debido a la gran cantidad de átomos y moléculas que conforman los sistemas en estudio (Dua Y. , Zhou, Zhao, & Dingc, 2022). El algoritmo de Verlet es el procedimiento utilizado para la integración numérica de las ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden con valores iniciales, resultantes de la aplicación de las leyes de movimiento de Newton en los sistemas moleculares. El objetivo del algoritmo es la solución en conjunto de las siguientes ecuaciones:

$$V_{n+\frac{1}{2}} = V_n + \frac{\Delta t}{2} M^{-1} F_{n+1} \quad (\text{ec.4})$$

$$X_{n+1} = X_n + \Delta t V_{n+\frac{1}{2}} \quad (\text{ec.5})$$

$$F_{n+1} = F(X_{n+1}) \quad (\text{ec.6})$$

$$V_{n+\frac{1}{2}} = V_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} M^{-1} F_{n+1} \quad (\text{ec.7})$$

El principio general del algoritmo de Verlet consiste en calcular la posición y la velocidad de una partícula en un instante de tiempo $t + dt$, utilizando la posición y la velocidad en el instante de tiempo anterior t , y la aceleración en el instante de tiempo actual. t . A partir de estos valores, se pueden obtener las nuevas posiciones y velocidades de las partículas en cada paso de tiempo. (Valadez Acuña, 2018)

3.2 Campo de fuerza

El campo de fuerza es una representación matemática de las interacciones para estimar las fuerzas entre los átomos dentro de las moléculas y también entre diferentes moléculas. Específicamente, se refiere a la función matemática y a los parámetros utilizados para calcular la energía potencial de un sistema de átomos o partículas granuladas mediante la aproximación de la mecánica molecular. La mecánica molecular considera a los átomos como esferas rígidas con carga, mientras a las moléculas como átomos unidos por medio de resortes. Las funciones de

energía que están consideradas en la mayoría de los campos de fuerza son presentadas en las Ec. (8) – (10) (Dua Y. , Zhou, Zhao, & Dingc, 2022).

$$E_{total} = E_{covalente} + E_{nocovalente} \quad (\text{ec.8})$$

$$E_{covalente} = E_{enlace} + E_{angulo} + E_{diedro} \quad (\text{ec.9})$$

$$E_{nocovalente} = E_{electrostatica} + E_{vander\ waals} \quad (\text{ec.10})$$

Uno de los campos de fuerza utilizados en materiales PCM corresponde al *Universal Force Field* (UFF) (A.K., C.J. , K.S. , W.A., & W.M., 1992), el campo de fuerza se usó para estimar la energía de enlace covalente Ec. 9. La expresión matemática que describe la interacción de estiramiento de enlace armónico de este campo corresponde a

$$E_R = \frac{1}{2} k_{ij} (r - r_{ij})^2 \quad (\text{ec.11})$$

Donde E_R es el estiramiento de enlace, donde k_{ij} es la constante de fuerza en unidades de (kcal/mol)/Å², r_{ij} es la longitud del enlace natural o estándar en Å.

Las constantes de fuerzas del enlace son obtenidas de una generalización de las reglas de Badger, para una curva simple delimitadora.

$$E_R = E_\theta - FR - G(Z_i * Z_j / R^2) \quad (\text{ec.12})$$

$$F = G(Z_i * Z_j / r_{ij}^2) \quad (\text{ec.13})$$

$$k_{ij} = 2G(Z_i * Z_j / R^3) \quad (\text{ec.14})$$

Donde E_R es el estiramiento de enlace para las constantes de fuerzas, Z_i y Z_j son cargas efectivas, G es la constante (332.06), R es la distancia entre los átomos en el enlace (en Å), y E_R en kcal/mol.

En UFF, la curvatura del ángulo se describe con la expansión general de Fourier para casos no lineales que consta de tres coeficientes.

$$E_\theta = K_{ijk} (C_0 + C_1 \cos \theta + C_2 \cos 2\theta) \quad (\text{ec.15})$$

$$C_2 = \frac{1}{4 \sin^2 \theta} \quad C_1 = -4C_2 \cos \theta \quad C_0 = C_2 (2 \cos^2 \theta + 1) \quad (\text{ec.16})$$

El potencial de Lennard-Jones (LJ) es un modelo ampliamente utilizado para describir las interacciones intermoleculares entre átomos y moléculas neutros, es decir la modelación de las interacciones no covalentes Ec. 10. La forma más común de la función potencial de Lennard-Jones

$$U_{ij} = 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right] \quad (\text{ec.17})$$

Este potencial se caracteriza por dos parámetros: la distancia de equilibrio (σ_{ij}) y la profundidad del pozo de potencial (ϵ_{ij}). Estos parámetros son específicos para cada par de partículas que interactúan y determinan la forma y la fuerza de la interacción.

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j} \quad (\text{ec.18})$$

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \quad (\text{ec.19})$$

Tipos de interacciones angulares:

- **Interacciones angulares simples:** Se definen por una constante de fuerza que describe la resistencia a la desviación del ángulo ideal.
- **Interacciones diédricas:** Se definen por dos constantes de fuerza que describen la resistencia a la rotación alrededor del eje del enlace.

En este modelo, las interacciones entre átomos se asemejan a osciladores simples. Se define un coeficiente del resorte constante de 350 kcal/mol·Å para todos los enlaces simples, representando la fuerza de interacción entre átomos. varía según el tipo de enlace (ver Tabla 14 Apéndice E).

Las interacciones angulares en las muestras atómicas se describen usando una fórmula que se basa en cómo los átomos se comportan como si estuvieran conectados por resortes (llamado "oscilador armónico"). Esto se hace para entender cómo los átomos se mueven y vibran en relación con sus vecinos. Las "constantes" en estas interacciones son valores numéricos que determinan la fuerza de estos "resortes" virtuales entre los átomos, y se pueden encontrar en las Tablas 15 y 16

en el Apéndice E. En resumen, esta formulación ayuda a modelar y predecir cómo los átomos se mueven en las muestras atómicas.

Las interacciones angulares en las moléculas se modelan como osciladores armónicos. Las constantes de estas interacciones, que se encuentran en las Tablas 16 y 17 en el Apéndice E, las cuales definen la fuerza y la forma de la interacción de las moléculas.

Los datos y ecuaciones encontrados en las tablas anteriormente nombradas fueron tomados de (Raiszadeh Mousavian, Jahangiri, Ameri, & Ahmadi, 2023).

3.3 Programas para simulación molecular

Los programas utilizados en simulaciones moleculares comprenden programas de visualización y diseño de moléculas, programas de ejecución de cálculos de simulación y programas de interpretación de resultados. Entre los programas de visualización y diseño de moléculas se encuentran Avogadro, OVITO y Packmol. Avogadro es un editor molecular avanzado y de código abierto diseñado para ser flexible y fácil de usar. Se utiliza para construir, editar y visualizar estructuras moleculares en 3D, siendo ampliamente utilizado en química computacional y bioinformática debido a su capacidad para generar y modificar estructuras moleculares con precisión y eficiencia (Hanwell et al., 2012). OVITO (Open Visualization Tool) es un software de análisis y visualización de datos científicos, particularmente útil para simulaciones de dinámica molecular. Permite la visualización de trayectorias de partículas y la realización de análisis complejos de datos obtenidos de simulaciones, manejando grandes conjuntos de datos con herramientas de visualización interactivas que facilitan la comprensión de procesos dinámicos a nivel atómico (Avogadro, s.f.). Para crear configuraciones iniciales, se pretende usar el programa Packmol, que es utilizado en simulaciones de dinámica molecular para empaquetar moléculas en regiones definidas del espacio. Su objetivo principal es garantizar que las interacciones repulsivas de corto alcance no interrumpan las simulaciones, asegurando una distribución inicial adecuada de las moléculas y evitando superposiciones atómicas que podrían causar problemas en las simulaciones (Martínez et al., 2009).

Entre los programas usados en la ejecución de simulaciones moleculares se encuentra LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). La ejecución de

LAMMPS comprende la codificación de tres tipos de archivos: “mod”, “.data” y “.in”. El archivo “mod”, también conocido como archivo de parámetros, contiene las especificaciones del modelo de la simulación, incluyendo las definiciones de los tipos de átomos, enlaces, ángulos y potenciales que se usarán en la simulación. El archivo “.data” contiene la información inicial del sistema, como las posiciones iniciales de los átomos, las velocidades y las características topológicas (enlaces, ángulos y dihedrales), estableciendo el estado inicial del sistema antes de que comience la simulación. Por su parte, el archivo “.in” de entrada contiene los comandos que controlan la ejecución de la simulación en LAMMPS, incluyendo instrucciones sobre la configuración del sistema, las condiciones de contorno, los ensambles termodinámicos, los pasos de tiempo y los métodos de integración, así como instrucciones para calcular propiedades específicas y definir la duración y tipo de simulación (Plimpton, 1995).

4. Estado del Arte

(D, T, A, SY, & M, 2004), en este documento se presentan los posibles usos de los ácidos grasos como PCM (materiales de cambio de fase) en el almacenamiento de energía térmica, abordando sus ventajas y desventajas aplicativas y económicas; además de contar con una recopilación de información de otros autores.

(Abdul, Shima, & Zainal, 2020) en esta revisión bibliográfica se presenta la opción de usar materiales de desecho como relleno para mejorar las propiedades termodinámicas de los PCM (materiales de cambio de fase), concluyendo que, en la mayoría de los casos, el rendimiento del PCM ha mejorado significativamente con la adición de materiales de desecho sin embargo recalcando la necesidad de más estudios.

(LI, y otros, 2023) el documento presenta las pautas y proceso de fabricación por primera vez de un compuesto de cambio de fase termo conductor habilitado por una estructura 3D-SCND, con conductividad térmica máxima de 1,53 W/mK, que entre otras propiedades que le permiten tener una conversión fototérmica del 90,2%.

Tabla 1. *Resumen estado del arte.*

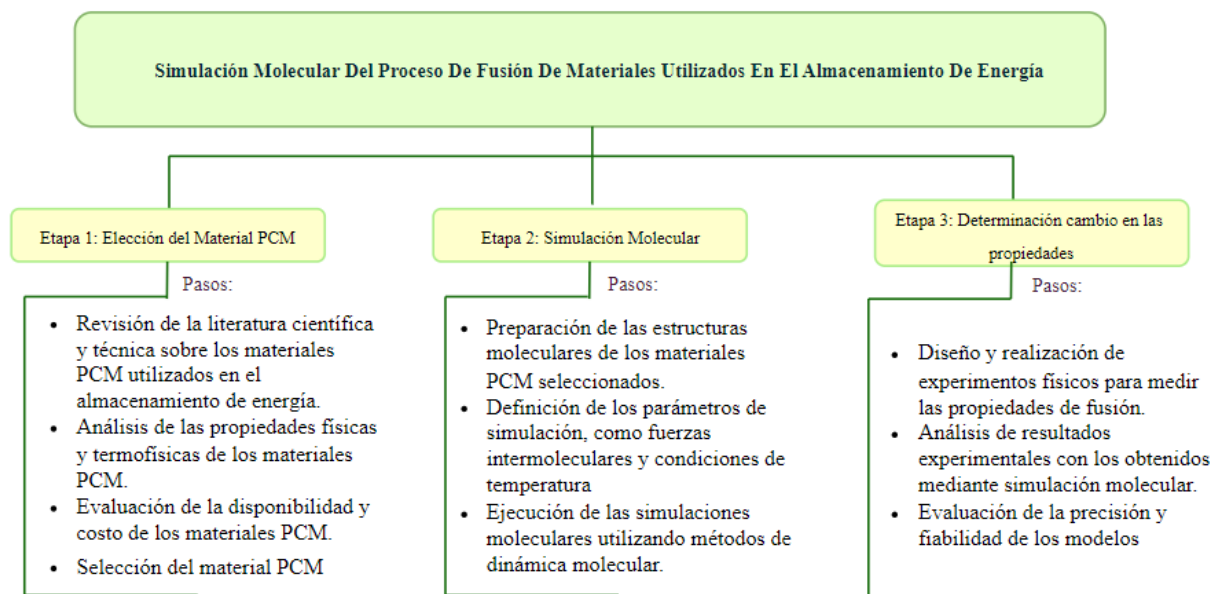
Autores	Premisa	Resultados
(D, T, A, SY, & M, 2004)	Se presentan los posibles usos de los ácidos grasos como PCM (materiales de cambio de fase) en el almacenamiento de energía térmica, abordando sus ventajas y desventajas aplicativas y económicas	Presenta una recopilación de información de otros autores sobre las ventajas y desventajas que presenta el uso como material de cambio de fase de los ácidos grasos.
(Abdul, Shima, & Zainal, 2020)	En esta revisión bibliográfica se presenta la opción de usar materiales de desecho como relleno para mejorar las propiedades termodinámicas de	El uso de material de desecho como PCM ha demostrado un gran potencial ya que brinda un rendimiento comparable al de los convencionales PCM. El PCM derivado de materiales de

	los PCM (materiales de cambio de fase)	diseño y rellenos ha resultado en buenas propiedades térmicas. relaciones tales como entalpía, capacidad calorífica, conductividad y densidad. En la mayoría de los casos, el rendimiento del PCM ha aumentado significativamente.
(LI, y otros, 2023)	El documento presenta las pautas y proceso de fabricación por primera vez de un compuesto de cambio de fase termo conductor habilitado por una estructura 3D-SCND	El material exhibe una conductividad térmica máxima de $1,53 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ con una carga SCND extremadamente baja del 5 % en volumen, puede lograr una eficiencia de conversión fototérmica del 90,2 %, y también produce una densidad de potencia de salida termoeléctrica efectiva de $22,7 \text{ W m}^{-2}$

5. Metodología

El trabajo de investigación consto de tres etapas metodológicas las cuales se ilustran en la Figura 1. La primera etapa abarcó la elección del material PCM a partir de la revisión de literatura, en donde se analizaron las propiedades físicas y termo físicas de los materiales PCM, con el fin de evaluar la disponibilidad y demás factores de los materiales para su selección.

Figura 1. Enfoque metodológico aplicado para el desarrollo de la investigación.



5.1 Etapa 1: Elección del Material PCM

Actividad 1: Una revisión de la literatura científica disponible fue realizada en las bases de datos Science Direct, Springer, Taylor & Francis y Oxford Academic. Esta búsqueda se llevó a cabo utilizando las palabras clave "simulación dinámica" y "materiales de cambio de fase" (PCM). Los artículos encontrados fueron revisados para identificar los PCM utilizados en cada caso.

Actividad 2: A continuación, se procedió a elaborar una matriz de comparación entre los diferentes materiales PCM identificados. Estos materiales fueron evaluados en términos de varios criterios: estabilidad térmica, frecuencia de aplicación, disponibilidad, capacidad de

almacenamiento a temperatura ambiente, bajo punto de fusión y costo. Basándose en esta matriz de comparación, se seleccionó el material PCM que obtuvo la mayor puntuación en los criterios mencionados. Esta metodología permitió identificar el PCM más adecuado para la simulación, asegurando que se elija el material con las mejores características para el objetivo de estudio.

5.2 Etapa 2: Construcción de la celda de simulación.

Actividad 3: Se realizó la consulta de la geometría del material PCM, se recurrió a la base de datos de la Biblioteca Nacional de Medicina, al *National Institute of Standards and Technology* (NIST) y al programa Avogadro para obtener información detallada sobre la geometría y propiedades del PCM seleccionado.

Actividad 4. La celda de simulación fue diseñada utilizando el programa de uso libre Packmol (Martínez et al., 2009), que permitió generar las configuraciones iniciales de las moléculas para la simulación molecular. Para esto, una celda de $30 \times 30 \times 30 \text{ \AA}^3$ fue definida con 50 moléculas del material PCM seleccionado. La ejecución del programa Packmol condujo a la obtención de una posición inicial para la posterior simulación del sistema.

Actividad 5. La información de la simulación fue definida con la configuración inicial en el archivo "data" (Apéndice A).

5.3 Etapa 3: Determinación del cambio en las propiedades

Actividad 6: Los parámetros del campo de fuerza UFF (Sección 3.2) fueron codificados en un archivo "data" (Apéndice B). Estos parámetros fueron tomados de los documentos de (A.K., C.J., K.S., W.A., & W.M., 1992) y (Raiszadeh Mousavian, Jahangiri, Ameri, & Ahmadi, 2023).

Actividad 7: El archivo "in" fue codificado para la simulación del sistema. En primer lugar, se equilibró el sistema utilizando el conjunto NVE (conservación de la energía total, volumen y número de partículas) durante un número definido de pasos de simulación. Posteriormente, se realizaron simulaciones adicionales con el conjunto NVT (conservación de la energía total, volumen y temperatura) utilizando la temperatura de fusión del material y temperaturas superiores a esta. La simulación se configuró para registrar los siguientes datos en intervalos específicos de pasos: temperatura, posición de los átomos en coordenadas x, y, z, energía potencial, energía cinética, energía de Van der Waals, función de distribución radial (RDF), viscosidad y

desplazamiento cuadrático medio (MSD). La temperatura de fusión o de cambio de fase fue analizada a partir de simulaciones a 290 K, 300 K, 310 K, 320 K, 330 K, 340 K y 350 K. Los pasos de simulación definidos fueron 5 millones (Apéndice C).

Actividad 8: El método de Green-Kubo fue codificado en el archivo “in” para el cálculo de la variación de la viscosidad. Este método se basa en la teoría de fluctuaciones y disipación, y permite calcular la viscosidad a partir de las fluctuaciones espontáneas de las corrientes de momento en el sistema. Específicamente, la viscosidad se obtiene integrando la función de autocorrelación temporal del tensor de esfuerzos en equilibrio (Todd & Daivis, 2017).

Actividad 9: Se analizaron los resultados de la simulación del punto de fusión se plasmaron en el archivo final denominado “log_PA_293” obtenido tras la simulación. Para su análisis y visualización, se empleó el programa de uso libre OVITO, el cual permitió observar el paso a paso del proceso y su resultado final.

6. Análisis Resultados

En esta sección se presentan los resultados obtenidos a través de la simulación molecular del proceso de fusión de materiales para la captura de energía. Los procedimientos realizados están descritos en la Metodología.

6.1 Selección del material PCM

En la Tabla 2 se resume la información más relevante encontrada sobre las clases de materiales PCM. Entre los materiales PCM se encuentran ceras de parafina, materiales de fase basados en polietilenglicol, parafinas orgánicas e inorgánicas, ácidos grasos orgánicos y aceites vegetales orgánicos. De otro lado, una posible clasificación de los materiales PCM para la transformación de fase sólido-líquido, la cual se obtuvo por medio de material bibliográfico, es presentada en la Figura 17 del Apéndice E.

Tabla 2. *Material bibliográfico de materiales PCM*

Título	Autores	Material	Resultados
Material preparation and heat transfer characterization of porous graphene aerogel composite phase change material	(Cheng, Li, Chen, Zeng, & Qiuwang, 2024)	Cera de parafina impregnada con Aero gel de grafeno.	Se determinaron condiciones óptimas de tratamiento. El Aero gel de grafeno tiene la capacidad de absorber 32 veces su masa en cera de parafina

Thermal properties of PEG-based form-stable Phase Change Materials (PCMs) incorporated in mortars for energy efficiency of buildings	(Sarcinella Barroso de Aguiar, Carlos Jesus, & Frigione, 2023)	Materiales de fase basados en polietilenglicol (PEG)	Modificar el comportamiento térmico debido a la capacidad del PCM (Polietilenglicol 800 y Polietilenglicol 1000).
Simple analytical and experimental method of solidification PCM material inside a spherical capsule	(Lipnicki, Malolepszy, & Gortych, 2022)	PCM líquido (RT64HC)	El modelo analítico simple usado en el estudio es útil para calcular la solidificación del material PCM líquido
Évaluation expérimentale des matériaux à changement de phase à basse température pour les applications de froid et de conditionnement d'air	(Guarda, Righetti, Longo, Zilio, & Mancin, 2023)	Parafinas orgánicas e inorgánicas, ácido graso orgánico, aceite vegetal orgánico	La duración del cambio de fase depende no sólo del calor latente, sino también de otras propiedades termo físicas, como la conductividad térmica y la viscosidad dinámica.

En la Tabla 3 se encuentran indicadores para varios PCM, como la frecuencia de aplicación, el campo de fuerza utilizado, la cantidad de energía, la disponibilidad, el impacto ambiental y el costo. Según esta tabla, las parafinas son los PCM que se encuentran con mayor frecuencia en las simulaciones. Este tipo de PCM ha sido ampliamente estudiado debido a sus propiedades específicas que los hacen adecuados para aplicaciones en almacenamiento de energía térmica y otros campos relacionados.

Tabla 3. *Tipos y características de materiales PCM*

Material	Frecuencia de aplicación y campo de fuerza	Cantidad de energía e impacto ambiental	Costo relativo y ejemplo
Sales hidratadas	<p>Las sales hidratadas presentan problemas de corrosión, inestabilidad, dificultades de re-solidificación y tendencia al subenfriamiento, lo que ha llevado a su uso como aditivos en otros materiales (Younsi & Naji, 2017).</p> <p>Para describir las interacciones agua-agua, ion-agua y ion-ion, se eligen campos de fuerza por su capacidad predictiva de solubilidad en agua. Los campos de fuerza no polarizables son ineficaces para simulaciones de hidratos con Li⁺, mientras que los polarizables son más adecuados (Matysová, Lísal, & Moučka, 2023).</p>	<p>El rango de fusión de las sales hidratadas está entre 7,7 y 25,3 °C, y el calor de fusión es de 125,0 kJ/kg (Younsi & Naji, 2017).</p> <p>El cloruro de magnesio hexahidratado, el nitrato de magnesio hexahidratado, el sulfato de sodio decahidratado, el acetato de sodio trihidratado y el hidrogenofosfato disódico dodecahidratado son prácticamente inofensivos para la salud humana. En contraste, el carbonato de sodio decahidrato, el cloruro de calcio hexahidrato y el hidróxido de bario octahidrato son medianamente nocivos (Nartowska, Stys-Maniara, & Koszłowski, 2023).</p>	<p>Alto</p> <p>(Sulfato de sodio decahidratado 1kg us\$102,02, (Sigma-Aldrich, s.f.))</p>
Parafinas	<p>Las parafinas comerciales y las ceras de parafina son especialmente interesantes</p>	<p>La temperatura de fusión de las parafinas generalmente se encuentra entre 40 y 65 °C, y</p>	<p>Bajo y de fácil consecución</p>

<p>para calefacción y su calor de fusión es de (parafina refrigeración debido a su aproximadamente 200-220 highly liquid temperatura de fusión (Jeong & Kim, 2024). 1 litro & Kim, 2024). El material de cambio de fase us\$58,84, El campo de fuerza de (cera de parafina) se usa (Sigma-Lennard-Jones es crucial para ampliamente debido a sus Aldrich, s.f.)) comprender la interacción atributos no corrosivos, no entre partículas o moléculas tóxicos, químicamente neutras (An et al., 2024). estables y su capacidad para almacenar calor (Kibria et al., 2024).</p>	<p>(parafina highly liquid 1 litro us\$58,84, (Sigma-Aldrich, s.f.)) ampliamente debido a sus atributos no corrosivos, no tóxicos, químicamente estables y su capacidad para almacenar calor (Kibria et al., 2024).</p>
--	---

<p>Ácidos grasos</p>	<p>Los ácidos grasos tienen excelentes características térmicas y un amplio rango de temperatura de refrigeración sin subenfriamiento, sin embargo, no se consideran para escenarios energéticos a largo plazo (Sari & Bicer, 2012). Los campos de fuerza CHARMM y NAMD se usaron en simulaciones de dinámica molecular para estudiar su comportamiento, otorgando propiedades más precisas (Monje et al., 2013).</p>	<p>Los ácidos grasos tienen un punto de congelación entre 60 y 100 °C y no sufren subenfriamiento por encima de los 15 °C (Sari & Bicer, 2012). Algunos sistemas de ácidos grasos ofrecen soluciones más respetuosas con el medio ambiente, enfrentándose a restricciones según las políticas ambientales actuales (Alper Aydin, 2013).</p>	<p>Moderado Ácido láurico 1kg us\$83,03 (Sigma-Aldrich, s.f.)</p>
-----------------------------	---	---	---

Mezclas eutécticas	Las mezclas de ácidos grasos son más atractivas para fabricar y comercializar que las mezclas eutécticas (Silva et al., 2019). Se utilizó metodología computacional DFT y GROMACS para estudiar mezclas eutécticas, incluyendo minimizaciones de energía, calentamiento a temperatura y volumen constantes, y calentamiento a temperatura y presión constantes (Aslam et al., 2024).	Generalmente, el punto de fusión de las mezclas eutécticas se encuentra entre 15 y 70 °C, con una entalpía de fusión típica entre 10-80 kJ/mol, dependiendo de la composición y los compuestos involucrados (Silva et al., 2019).	Menor al de sales hidratadas, al ser mezclas su valor depende de los compuestos y sus proporciones
---------------------------	--	---	--

De igual manera, en la Tabla 4 se presentan las ventajas y desventajas de cada grupo de material PCM. Según esta tabla, el grupo de las parafinas presenta la ventaja de estabilidad térmica, bajo punto de fusión, así como de ser químicamente inerte. Con lo anterior las parafinas fueron seleccionadas para su aplicación en la simulación. Este material además posee un punto de fusión claramente definido y relativamente bajo, son relativamente más inertes, poseen un costo bajo y son de fácil consecución (NIST). Por lo anterior, las parafinas son una opción adecuada en el contexto del almacenamiento de energía.

Tabla 4. *Ventajas y desventajas de los materiales PCM.*

Material	Ventajas	Desventajas
-----------------	-----------------	--------------------

Sales hidratadas	Alta capacidad de almacenamiento de calor latente, bajo punto de fusión (Younsi & Naji, August 2017)	Corrosivas, pueden absorber humedad, Amplia gama de puntos de fusión, depende del tipo de sal y la cantidad de agua de hidratación, generalmente más altos que ácidos grasos y parafinas (Younsi & Naji, August 2017)
Parafinas	Buena estabilidad térmica, bajo punto de fusión, inerte (Jeong & Kim, 2024)	Capacidad moderada de almacenamiento de calor, Amplia gama de puntos de fusión varía según la longitud de la cadena de carbono (Jeong & Kim, 2024)
Ácidos grasos	Buena capacidad de almacenamiento de calor latente (Sari & Bicer, 2012)	Alto punto de fusión, susceptibilidad a la oxidación, Amplia gama de puntos de fusión varía según la longitud de la cadena de carbono (Sari & Bicer, 2012)
Mezclas eutécticas	Alta capacidad de almacenamiento de calor latente, punto de fusión único, ajustable y definido, menor al de sus componentes (C N & Behura, 2024)	Alto punto de fusión, Corrosivas, inflamables, incompatibilidad con materiales, requiere procesos de fabricación (C N & Behura, 2024)

La Tabla 5 compara algunas propiedades de diferentes parafinas. El octadecano fue seleccionado como material base para las simulaciones, debido a su punto de fusión cercano a la temperatura ambiente (aproximadamente 28°C), lo que significa que es sólido a temperatura ambiente. Asimismo, el octadecano presenta un elevado calor de fusión, útil en aplicaciones de almacenamiento de energía. De igual manera, esta parafina ha sido analizada en simulaciones publicadas en artículos de literatura académica.

Tabla 5. *Parafinas utilizadas como PCM.*

Propiedad	Heptano	Eicosano	Ciclohexano	Octadecano
Fórmula molecular	C ₇ H ₁₆	C ₂₀ H ₄₂	C ₆ H ₁₂	C ₁₈ H ₃₈
Peso molecular (g/mol)	100.20	284.49	98.19	254.48
Punto de fusión (°C)	-90.6	36.6	8.0	28.1
Punto de ebullición (°C)	98.4	343.2	110.5	319.0
Densidad (g/cm ³)	0.684	0.803	0.789	0.773
Calor de fusión (kJ/mol)	12.1	28.5	25.1	24.9

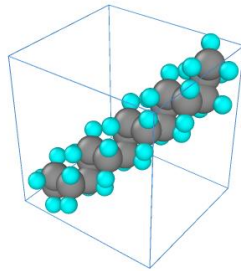
(National Library of Medicine)

6.2 Simulación del Proceso de Fusión del *n*-Octadecano.

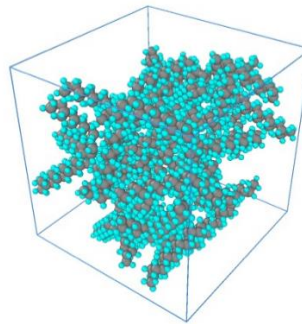
El *n*-octadecano es un alcano alifático lineal de 18 átomos de carbono (Figura 2a) que en estado sólido forma cristales con una estructura ordenada (National Library of Medicine). La Figura 3b presenta la disposición inicial reportada con el programa Packmol para una celda de densidad de 0,778 g/mL para el *n*-octadecano sólido a 298 K (50 moléculas de *n*-octadecano), con ajuste estructural para compactar la densidad adecuada de simulación (Figura 2b). La celda con la disposición inicial fue simulada en LAMMPS, según lo definido en la Metodología. La Figura 3b presenta la distribución espacial final resultante de la simulación por dinámica molecular hasta un tiempo 5 ns. En esta figura se aprecia la distribución de los átomos constituyentes de las diferentes moléculas de *n*-octadecano que conforman la celda; en esta celda hay porciones de moléculas debido a la característica de fronteras periódicas aplicada durante la simulación. La Figura 4 ilustra la disposición espacial de algunas moléculas aisladas después de la simulación. Según esta figura, las moléculas giran en sus ángulos diedros, alcanzando una posición energética estable con la densidad y las condiciones especificadas. La Figura 5 ilustra la variación de la temperatura durante

la simulación, alcanzando un estado pseudoestacionario para cada una de las elevaciones de temperatura en el sistema. En la última etapa (de producción), la temperatura alcanza un punto de estabilización en 300 K, oscilando con amplitud de ± 2.0 K.

Figura 2. Estructura *n*-octadecano.

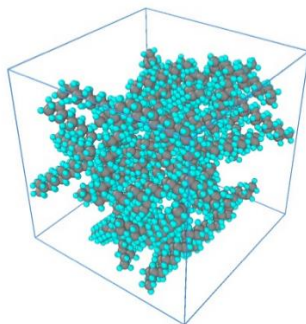


(a) *n*-octadecano

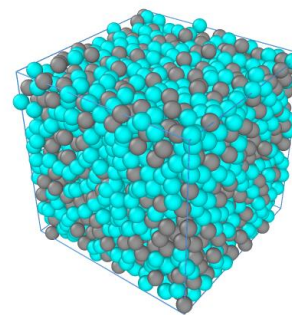


(b) Caja de *n*-octadecano (50 moléculas)

Figura 3. Configuración inicial y final de la caja de simulación *n*-octadecano obtenida con Packmol.



(a) Inicial



(b) final

Nota. Los átomos de color gris y azul corresponden a los C y H respectivamente.

Figura 4. Disposición espacial de algunas moléculas aisladas después de la simulación.

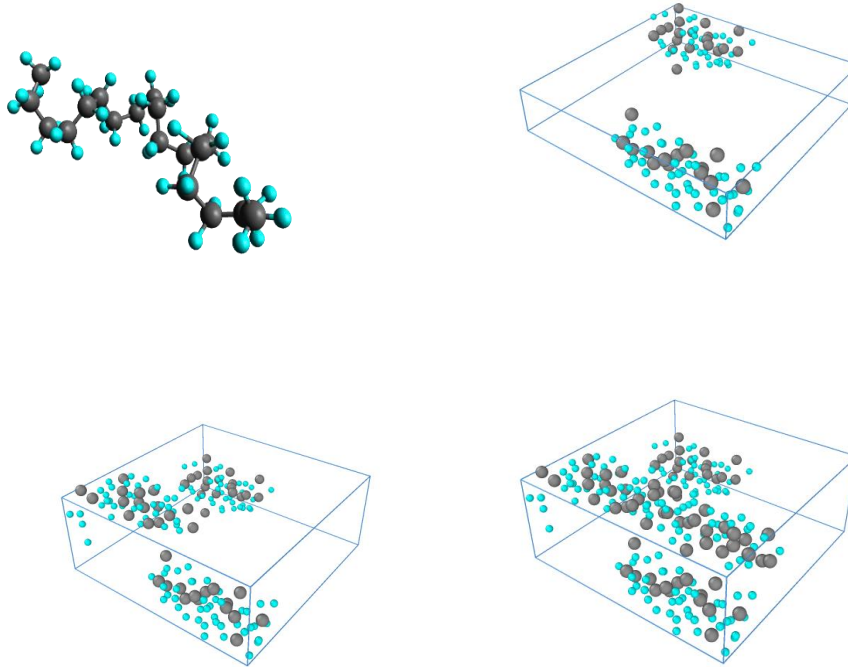
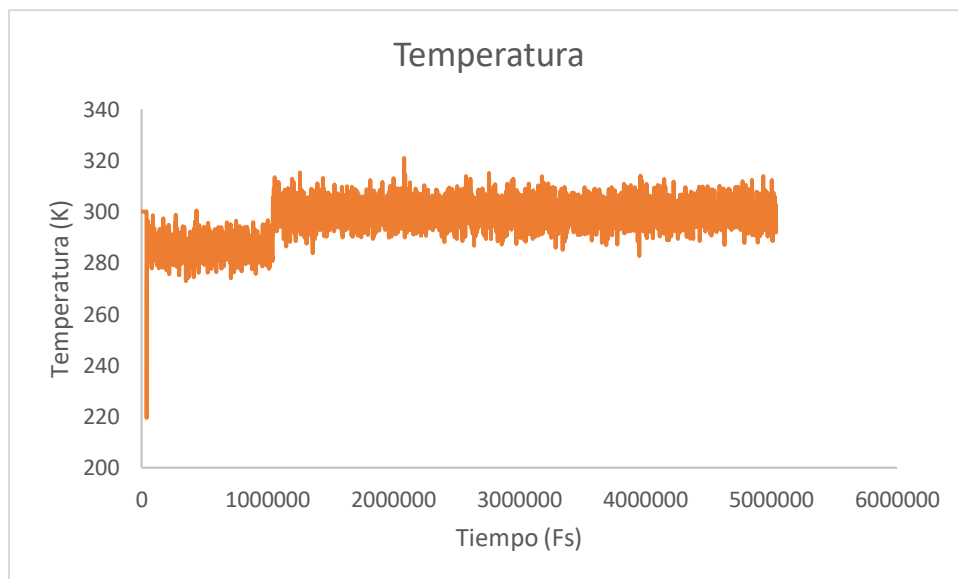


Figura 5. Evolución de la temperatura respecto al tiempo de simulación.



6.3 Variación de las Propiedades

Al ejecutar la simulación a diferentes temperaturas y observar su comportamiento con respecto al tiempo, se pueden analizar las modificaciones en las diversas propiedades del *n*-octadecano. La Figura 5 muestra las fases de la simulación; en la primera fase NVE las condiciones mantienen las moléculas de *n*-octadecano en estado sólido y dispuestas en una estructura ordenada; en la segunda fase NVT el cambio de la temperatura provoca que las moléculas de *n*-octadecano adquieran más energía y se muevan más rápido, lo que causa que la configuración de las moléculas se vuelva más desordenadas

Las Figuras 6 y 7 presentan los perfiles de las energías potenciales y cinéticas, respectivamente, para cada una de las simulaciones en un rango entre 290-350 K.

Figura 6. Gráfica resultados de la energía potencial respecto al número de pasos del cambio de fase obtenidos por la simulación y los experimentales.

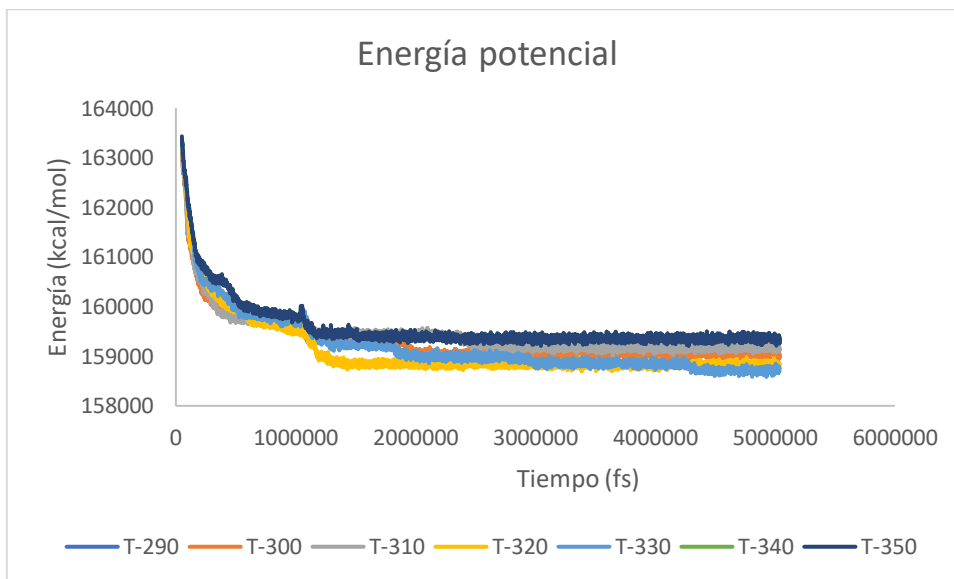
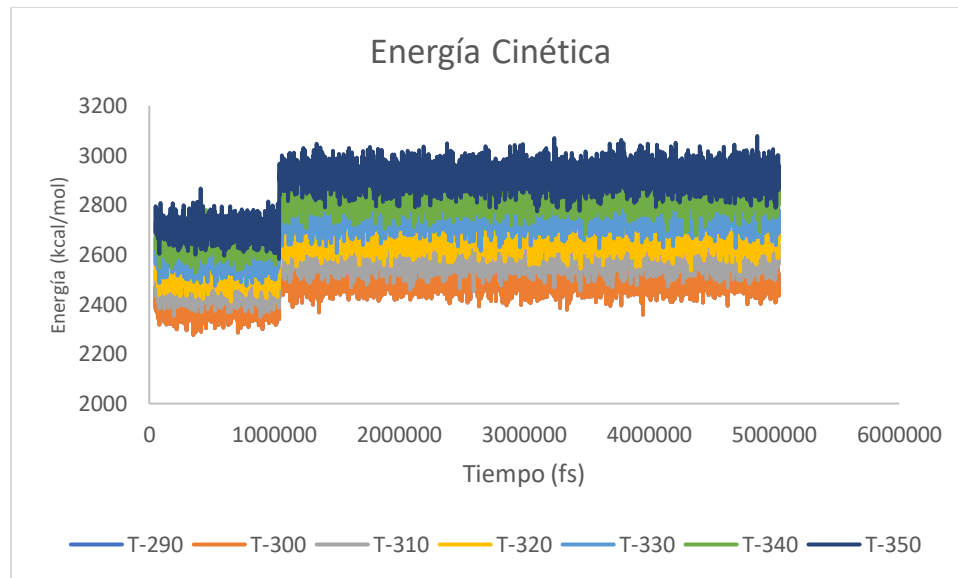


Figura 7. Gráfica resultados de la energía cinética respecto al número de pasos del cambio de fase obtenidos por la simulación y los experimentales



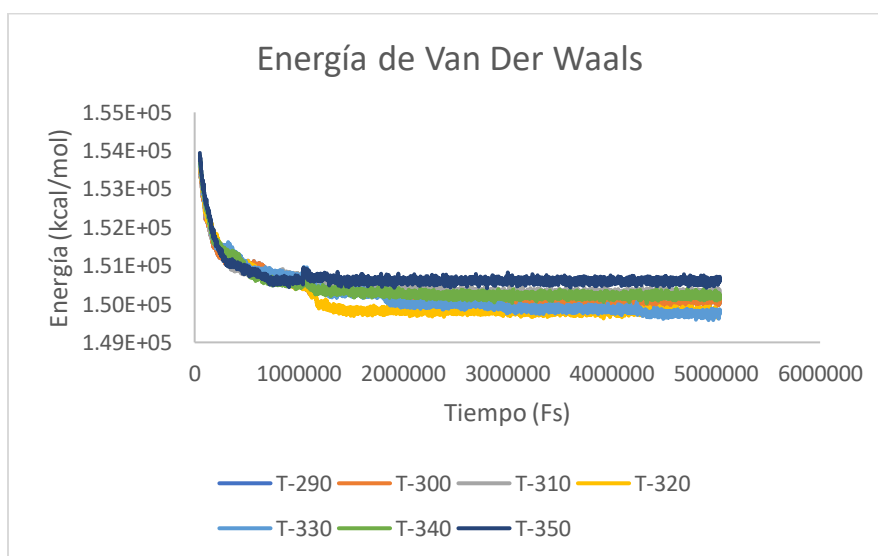
En la Figura 6 se observa que en la primera fase a medida que se aplica energía al sistema, las moléculas de octadecano comienzan a vibrar y rotar más rápidamente, lo que disminuye su energía potencial, en la segunda fase se continúa aplicando energía al sistema, lo que hace que las moléculas de octadecano vibren y roten aún más rápidamente, sin embargo, como la temperatura del sistema es constante, la energía cinética aumenta causando la ruptura de los enlaces entre las moléculas, lo que hace que el octadecano pase de estado sólido a líquido.

De la Figura 7 es posible mencionar que, la energía cinética del *n*-octadecano presenta un aumento en su tendencia concordante con un aumento en la temperatura. Esta energía, al igual que la potencial, se estabilizan en la región de producción final de la simulación por estabilización de la temperatura en el sistema. Con el aumento del tiempo de simulación, tanto la energía potencial como la cinética convergen hacia un valor específico, indicando que el sistema ha alcanzado el equilibrio termodinámico bajo las condiciones definidas. La energía cinética refleja la energía del movimiento molecular y su convergencia sugiere una distribución estable de velocidades moleculares. La energía positiva obtenida indica una fuerza de repulsión interatómica moderada, que ayuda a mantener una distancia promedio adecuada entre las moléculas, evitando enlaces no deseados (Allen & Tildesley, 1989). Esta estabilidad y control de las interacciones moleculares se presentan en el almacenamiento de energía en materiales PCM.

Según los datos presentados por (Raiszadeh Mousavian, Jahangiri, Ameri, & Ahmadi, 2023), tanto la energía potencial y cinética tienen convergencia, los valores máximos de energía cinética se encuentran entre 2000 y 2500 Kcal/mol lo cual coincide con los valores obtenidos en esta simulación, sin embargo, los valores de referencia de la energía potencial fueron más bajos a comparación de los valores obtenidos, debido a las diferencias de programación. Se reportan el cambio en las energías en el paso de 290 a 300, de 300 a 310, de 310 a 320, de 320 a 330, de 330 a 340 y de 340 a 350 usando los máximos obtenidos en la simulación respectivamente 59.1086, 67.1036, 100.7323, 82.0133, 67.6151 y 84.1375. La tasa de cambio de energía cinética parece ser relativamente constante a lo largo de los intervalos de temperatura sin considerar el cambio de fase NVE a NVT.

En la Figura 8 se muestra el perfil de energía de van der Waals de los sistemas estudiados, esta energía está relacionada con las interacciones no enlazadas de cada sistema, evidenciando que las energías oscilan constantemente. A medida que transcurre la simulación, la energía tipo van der Waals disminuye hasta llegar a estabilización, referenciando la consecución de una simulación representativa para el sistema en estudio.

Figura 8. *Tendencia de la energía de Van Der Waals durante la simulación.*

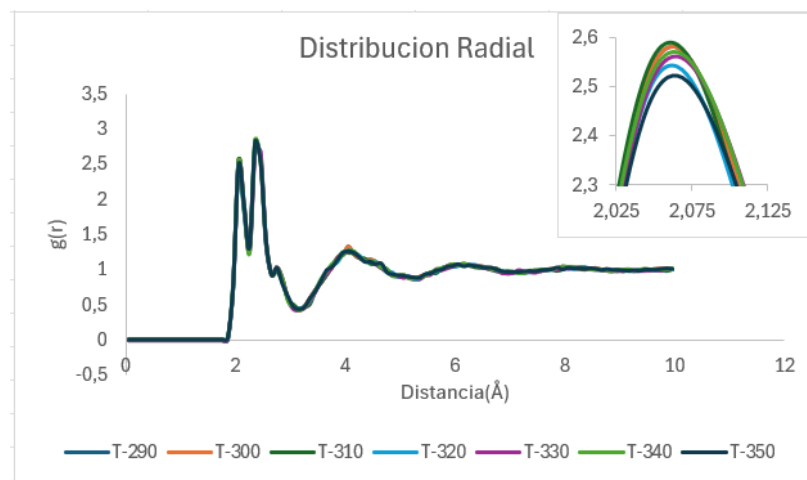


En la gráfica correspondiente, la energía de Van Der Waals del n-octadecano mide las interacciones débiles entre las moléculas, tales como las fuerzas de dispersión de London, dipolo-dipolo y puentes de hidrógeno. Estas interacciones son fundamentales para determinar propiedades

físicas y químicas como la estabilidad y volatilidad del compuesto. Según el estudio "Phase transitions of n-alkanes studied by differential scanning calorimetry" realizado utilizando calorimetría diferencial de barrido (DSC), se observa que la energía de Van Der Waals varía significativamente con la temperatura de estabilización. A temperaturas superiores a 300 K, la energía de Van Der Waals experimenta una elevación pronunciada, lo cual indica una disminución significativa en estas interacciones intermoleculares durante la fusión del n-octadecano. (Srivastava, Handoo, Agrawal, & Joshi, 1993).

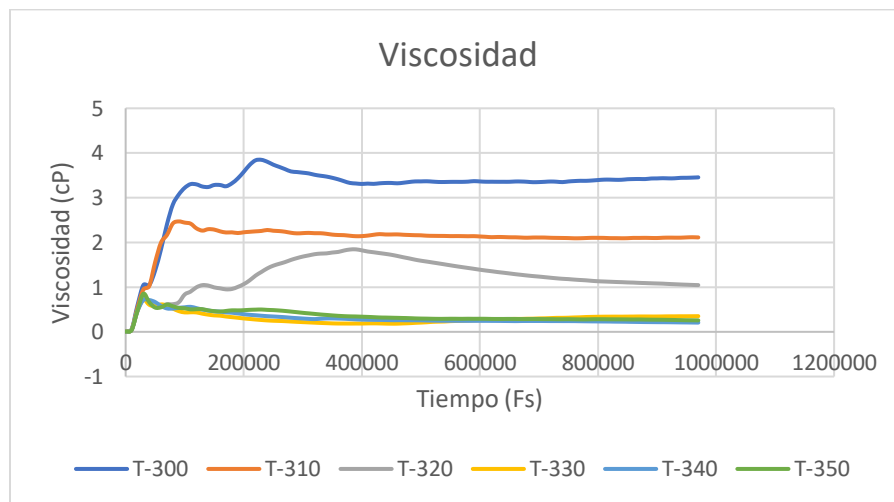
La función de distribución radial (RDF) obtenida con cada simulación de la celda de n-octadecano puede ser utilizada para analizar la posición de los átomos en el sistema. La Figura 9 presenta las RDF resultantes de la simulación a cada temperatura. Según esta figura, las simulaciones muestran picos de alta densidad poblacional de átomos, en las distancias 2.05, 2.35 para acercamientos no enlazantes entre átomos de C y 2.85 y 4.15 para no enlazantes entre átomos de C y H, concordantes con distancias entre los átomos de 2.5476, 2.75377, 0.846421 y 1.21292, respectivamente. Asimismo, los picos tienden a disminuir su altura (menor densidad poblacional) con el aumento en la temperatura, manifestando una separación creciente con el proceso de fusión. Las tendencias obtenidas para las RDF y mostradas en la Figura 9 coinciden con los trabajos reportados por (Raiszadeh Mousavian, Jahangiri, Ameri, & Ahmadi, 2023) y de los datos presentados por (Zhang, Xu, & Chen, 2021) donde la distribución radial alcanza picos máximos entre 2,5 y 4,5, en comparación a los datos obtenido en esta simulación donde se encuentran entre 2,5 y 3, pero manteniendo la misma tendencia con el aumento de la temperatura.

Figura 9. Gráfica de la distribución radial (RDF) para las diferentes temperaturas.



Por otro lado, la viscosidad, definida como la resistencia al flujo, puede variar significativamente con la temperatura, como puede ser apreciado en la Figura 10. En esta figura, la tendencia de las viscosidades con el tiempo de simulación es graficada para diferentes temperaturas. De esta figura es posible inferir que, el valor de la viscosidad llega a un valor de estabilización, lo cual sugiere que el tiempo de simulación fue suficiente para representar los fenómenos viscosos en el *n*-octadecano.

Figura 10. *Tendencia de la viscosidad con el tiempo de simulación.*

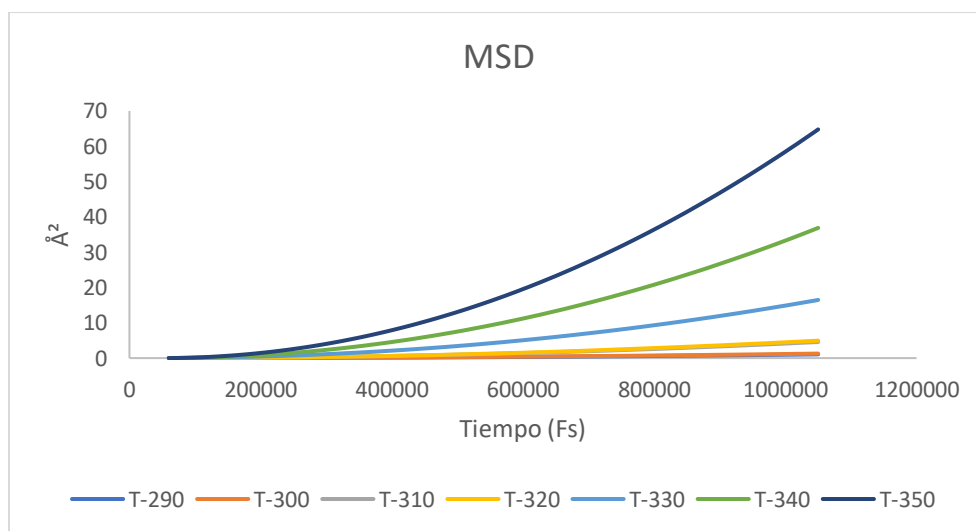


Según la Figura 10, la viscosidad disminuye de manera no lineal con el aumento en la temperatura, desde 300 °C a 350 °C. Esta disminución en la viscosidad concuerda con la disminución en la energía potencial y las fuerzas de van der Waals y el aumento en la energía cinética (Figuras 6–8). En estudios experimentales, se ha observado que el *n*-octadecano muestra una disminución significativa en la viscosidad cuando se calienta desde su punto de fusión (aproximadamente 301 K) hasta temperaturas superiores. Entre 300 K y 330 K, el *n*-octadecano pasa de una fase sólida a una fase líquida, lo que se refleja en una disminución abrupta de la viscosidad. Entre 330 K y 350 K, la viscosidad sigue disminuyendo, aunque de manera más gradual, indicando que el material está en una fase completamente líquida. (Sanguinetti, 2020) Este comportamiento con la temperatura contribuye a la homogenización de la temperatura en los procesos de almacenamiento de energía con materiales PCM. Es importante mencionar que, los

resultados obtenidos en el presente documento concuerdan con las tendencias presentadas en el trabajo de Mousavian et al. (2023); y en cuanto a las mediciones experimentales de la viscosidad del *n*-octadecano, estudios recientes han reportado datos precisos sobre esta propiedad. Por ejemplo, el trabajo de (Mazo Olarte, 2016) presenta mediciones de la viscosidad del *n*-octadecano en un rango de temperaturas de 20°C a 70°C, encontrando que la viscosidad varía de 4.5 mPa·s a 2.1 mPa·s respectivamente.

Por su parte, la Figura 11 ilustra la tendencia del desplazamiento medio cuadrático (MSD, *mean squared displacement*) con el tiempo de simulación. El MSD expresa la distancia cuadrática (área) que recorren los átomos y las moléculas del *n*-octadecano durante la simulación. Según esta figura, el valor de MSD va en aumento con el tiempo de simulación para las temperaturas definidas, hecho que concuerda con lo esperado, ya que el sistema presenta condiciones de fronteras periódicas. (Ben Said, y otros, 2024) El aumento de la temperatura incrementa la pendiente de crecimiento del MSD manifestando una fase fluida para temperaturas superiores de 330 K. Esto se debe a que el aumento de la temperatura proporciona mayor energía cinética a las moléculas, lo que les permite superar las fuerzas intermoleculares y separarse más entre sí. Este aumento en la separación intermolecular o MSD concuerda con la disminución de la viscosidad del material presentada en la Figura 10. La tendencia en el MSD presentado en la Figura 11 concuerda con lo reportado por Zhang et al. (2021).

Figura 11. Gráfica del desplazamiento medio cuadrático (MSD) con el tiempo de simulación.



Finalmente, respondiendo a la pregunta de investigación planteada, los resultados de simulación muestran que el *n*-octadecano experimenta un cambio en la configuración estructural, pasando de un arreglo ordenado en estado sólido a uno más desordenado en estado líquido. Este cambio se desencadena por el aumento de la temperatura suministrada al sistema. Las moléculas de octadecano, al absorber esta energía, incrementan su vibración y rotación, lo que eleva su energía cinética. Este aumento de energía cinética debilita y rompe algunos enlaces intermoleculares, permitiendo que las moléculas se separen y fluyan con mayor libertad, caracterizando el estado líquido. En resumen, la fusión del *n*-octadecano implica un reordenamiento molecular a nivel microscópico, impulsado por la energía térmica y reflejado en un aumento del desorden y la separación entre moléculas. A medida que aumenta la temperatura, la capacidad de almacenamiento de energía del *n*-octadecano disminuye ya que se dificulta mantener una configuración ordenada y almacenar energía de manera eficiente.

7. Conclusiones

- El estudio mediante dinámica molecular del octadecano como material PCM a diferentes temperaturas revela un comportamiento prometedor para el almacenamiento de energía térmica en un rango cercano a la temperatura ambiente.
- El material PCM seleccionado para la simulación molecular fue el octadecano. Este material reportó la mayor frecuencia de aplicación en estudios de cambio de almacenamiento de energía a temperaturas similares a la ambientales, por su mayor cantidad de almacenamiento, bajo impacto ambiental, bajos costos, su simplicidad estructural y la disponibilidad de campos de fuerza para simulaciones de dinámica molecular.
- La simulación del octadecano por dinámica molecular condujo a la obtención de una estructura representativa para cada temperatura ensayada.
- Como se esperaba, la tendencia de disminución de la viscosidad con la temperatura fue obtenida con los resultados de simulación. Esta tendencia en la viscosidad refleja las variaciones en las fuerzas de interacción intermolecular con el cambio en la temperatura y las tendencias obtenidas para la función de distribución radial, la viscosidad y el desplazamiento medio cuadrático coincidieron con reportes presentados en literatura.

8. Recomendación

En este trabajo, se emplearon tanto conjuntos NVE (donde N, V y E, correspondientes al número de partículas, volumen y energía total, permanecen constantes) y NVT (donde N, V y T, correspondientes al número de partículas, volumen y temperatura, permanecen constantes). Sin embargo, para simulaciones de dinámica molecular que representen escenarios donde el volumen puede variar, se recomienda el uso del conjunto NPT, este conjunto resulta particularmente útil para estudiar sistemas en condiciones de temperatura y presión constantes, como el comportamiento de materiales bajo diferentes presiones atmosféricas o la investigación de transiciones de fase.

Referencias Bibliográficas

- A.K., R., C.J., C., K.S., C., W.A., G., & W.M., S. (1992). UFF, a Full Periodic Table Force Field for Molecular Mechanics and Molecular Dynamics Simulations. *The Journal of the American Chemical Society*, 6727-6734.
- Abdul, S. G., Shima, S. J., & Zainal, S. A. (25 de enero de 2020). *Waste materials as the potential phase change material substitute in thermal energy storage system: a review*. Obtenido de <https://www-tandfonline-com.bibliotecavirtual.uis.edu.co/doi/citedby/10.1080/00986445.2020.1715960?scroll=top&needAccess=true>
- Allen, M., & Tildesley, D. (1989). COMPUTER SIMULATION OF LIQUIDS. *Journal of Solution Chemistry*, vol 18.
- Alper Aydin, A. (2013). Preparación y caracterización in situ de material de cambio de fase (PCM) basado en ésteres de ácidos grasos de cadena alta encapsulados en poli(uretano-urea) mediante el uso de aminoalcohol. *Revista de ingeniería química*, 477-483.
- An, Q., Bagheritabar, M., Basem, A., Ghabra, A. A., Li, Y., Tang, M., . . . Sabetvand, R. (2024). Efecto del tamaño de las nanopartículas de óxido de cobre sobre el comportamiento térmico de la nanoestructura de parafina/aerogel de sílice en un conducto mediante simulación de dinámica molecular. *Estudios de casos en ingeniería térmica*, volumen 60.
- Aslam, M., Pandey, G., Deshwal, N., Kumarc, A., Kumari, K., Bahadur, I., . . . Abdullah, A. (2024). Estudiar la solubilidad de ingredientes farmacéuticos y sus mezclas eutécticas: una teoría funcional de la densidad en profundidad y enfoques de simulaciones de dinámica molecular. *Revista de líquidos moleculares*, 124070.
- Avogadro*. (s.f.). Obtenido de <https://avogadro.cc/>
- Ben Said, L., Basem, A., Jasim, D. J., Alijafari, H. A., Ayadi, B., Aich, W., . . . Eftekhari, S. (2024). Numerical investigation of the heat flux frequency effect on the doxorubicin absorption by Bio MOF11 carrier: A molecular dynamics approach. *Case Studies in Thermal Engineering*, volumen 55.

- Bo, L., Mahdi, J., Rahbari, A., Sh, H. M., Xin, Y., Yaici, W., & Talebizadehsarsari, P. (2022). Estudio paramétrico de aletas torcidas para mejorar el rendimiento de solidificación de materiales de cambio de fase en un sistema de almacenamiento de energía térmica de calor latente de carcasa y tubos. *Journal of Computational Design and Engineering*, 2297-2313.
- C N, D., & Behura, A. (2024). Caracterización termofísica y análisis de confiabilidad del nanodopaje compuesto binario en PCM eutéctico de ácido esteárico-acetamida. *Materials Today Sustainability*, 100804.
- Chen, Y., Yaoa, Z., Chen, B., Liu, Z., & Yang, C. (1 de mayo de 2023). *Estudio numérico y experimental del proceso de captura de energía térmica del océano utilizando compuestos de espuma metálica y material de cambio de fase (PCM)*. Obtenido de <https://www-sciencedirect-com.bibliotecavirtual.uis.edu.co/science/article/pii/S2352152X23009970>
- Cheng, Z., Li, S., Chen, P., Zeng, M., & Qiuwang, W. (2024). material preparation and heat characterization of porous graphene aerogel composite phase change material. *international communications in heat and mass transfer*, volumen 152.
- D, R., T, C. G., A, S., SY, T., & M, S. (29 de marzo de 2004). *Ácidos grasos como materiales de cambio de fase (PCM) para el almacenamiento de energía térmica: una revisión*. Obtenido de <https://www-tandfonline-com.bibliotecavirtual.uis.edu.co/doi/full/10.1081/GE-200038722>
- Dua, Y., Zhou, T., Zhao, C., & Dingc, Y. (2022). Molecular dynamics simulation on thermal enhancement for carbon nano tubes (CNTs) based phase change materials (PCMs). *International Journal of Heat and Mass Transfer*, volumen 182.
- Dua, Y., Zhou, T., Zhao, C., & Dingc, Y. (2022). Simulación de dinámica molecular sobre mejora térmica para materiales de cambio de fase (PCM) basados en nanotubos de carbono (CNT). *International Journal of Heat and Mass Transfer*, volumen 182.
- El Bakri, Y., El Hassane, A., Subramani, K., Ben Yahya, A., & El Mokhtar , E. (2020). Síntesis, caracterizaciones espectroscópicas, DFT, acoplamiento molecular y simulaciones de

- dinámica molecular de un novedoso 2-metil-3H -bencimidazol [1,2-b][1,2,4]triazepin-4(5H)-ona. *Journal of Molecular Structure*, Volumen 1202.
- Feijóo, j., Álvarez, M., Fuerte, R., Arce, E., & Ergenc, D. (2022). Efectos de los aditivos de parafina, como materiales de cambio de fase, sobre el comportamiento de un mortero de cal tradicional. *Construction and Building Materials*, volumen361.
- Guarda, D., Righetti, G., Longo, G. A., Zilio, C., & Mancin, S. (2023). Évaluation expérimentale des matériaux à changement de phase à basse température pour les applications de froid et de conditionnement d'air. *International Journal of Refrigeration*, volumen 154, pag 33-42.
- Hussain Solangi, N., Mujawar Mubarak, N., Rao Karri, R., Ali Mazari, S., Sattar Jatoy, A., Reddy Koduru, J., & Hadi Delghani, M. (8 de NOVIEMBRE de 2022). *EL SERVIER*. Obtenido de <https://www-sciencedirect-com.bibliotecavirtual.uis.edu.co/science/article/pii/S0196890422012109>
- IEA. (2023). *IEA.org*. Obtenido de IEA (2023), Informe del mercado eléctrico – Actualización 2023 , IEA, París <https://www.iea.org/reports/electricity-market-report-update-2023>, Licencia: CC BY 4.0
- Jeong, S.-G., & Kim, S. (2024). Enhancing heating efficiency in electric radiant flooring systems with low-cost shape-stabilized paraffin wax composites: An experimental study. *Journal of Energy Storage*, volumen 92, 112219.
- Kibria, G., Mohtasim, S., Utpol K., P., Das, B. K., & Saidur, R. (2024). Impact of hybrid nano PCM (paraffin wax with Al₂O₃ and ZnO nanoparticles) on photovoltaic thermal system: Energy, exergy, exergoeconomic and enviroeconomic analysis. *Journal of Cleaner Production*.
- LI, L., LI, M., Qin, Y., Chen, Y., Dai, W., Zhang, Z., . . . Yu, J. (04 de 03 de 2023). *Eicosane-based thermo-conductive phase change composite for efficient capture solar energy and using in real-environment as power source*. Obtenido de <https://www-sciencedirect-com.bibliotecavirtual.uis.edu.co/science/article/pii/S1385894723010045>

- Lipnicki, Z., Malolepszy, T., & Gortych, M. (2022). Simple analytical and experimental method of solidification PCM material inside a spherical capsule. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, volumen135.
- Llena Asensi, O., Segarra Pérez, C. D., Rigola Serrano, J., González Castro, J., Casasayas Carles, O., Pérez Rodríguez, I., . . . Klot Galione, P. (2013). *españa Patente n° ES2828525T3*.
- M. Silva , J., Silva, E., L. Reis , R., & Duarte, A. R. (2019). Una mirada más cercana a las propiedades antimicrobianas de los disolventes eutécticos profundos basados en ácidos grasos. *Sustainable Chemistry and Pharmacy*, volumen 14,100192.
- Małgorzata Wiatros, M., Jones, D., Broadbent, H., & Fulghum, N. (11 de abril de 2023). *ember-climate.org*. Obtenido de https://ember-climate.org/app/uploads/2023/04/Global-Electricity-Review-2023_ES.pdf
- Matysová, P., Lísal, M., & Moučka, F. (2023). Molecular simulations of alkali metal hydrates. *Journal of molecular Liquids*, volumen 384.
- Mazo Olarte , J. (2016). *Investigación sobre la aplicación del almacenamiento de energía térmica mediante materiales de cambio de fase en elementos de construcción termoactivos*. <https://zaguan.unizar.es/record/48320/files/TESIS-2016-115.pdf>.
- Mohamamad, Z., Amirhossein, M., Alireza, K., Mohammad, A., & Hadi, F. (Diciembre de 2022). *The impact of employing a magnetic field as well as Fe₃O₄ nanoparticles on the performance of phase change material*. Obtenido de <https://www.proquest.com/docview/2764767324/BE86CBCA570741B4PQ/5?accountid=29068>
- Monje, V., Kim, T., Im, W., & Klauda, J. (2013). Campo de fuerza Charmm mejorado para cadenas de ácidos grasos poliinsaturados: un estudio sobre membranas DAPC. *Revista Biofísica*, 590a.
- Nartowska, E., Stys-Maniara, M., & Koszłowski, T. (2023). La potencial influencia ambiental y social de los hidratos de sales inorgánicas utilizados como material de cambio de fase para el almacenamiento de energía térmica en instalaciones solares. *Energias Renovables-Aspectos Ambientales y Sociales*.

- National Library of Medicine*. (s.f.). Obtenido de National Center for Biotechnology Information: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/home/about/>
- NIST*. (s.f.). Obtenido de National Institute of Standards and Technology: <https://webbook.nist.gov/cgi/inchi?ID=C593453&Mask=4#Thermo-Phase>
- Ovito*. (s.f.). Obtenido de <https://www.ovito.org/about/>
- Packmol*. (s.f.). Obtenido de <https://m3g.github.io/packmol/>
- Raiszadeh Mousavian, K., Jahangiri, A., Ameri, M., & Ahmadi, G. (2023). Melting and solidification analysis of paraffin phase change material in a circular space, molecular dynamics simulation. *Engineering analysis with boundary elements*, 455-466.
- Sanguinetti, E. (2020). Ley de la viscosidad de Newton: ecuación fundamental y explicación. *Instalaciones y componentes calefacción* .
- Sarcinella , A., Barroso de Aguiar, J., Carlos Jesus, & Frigione, M. (2023). Thermal properties of PEG-based form-stable Phase Change Materials (PCMs) incorporated in mortars for energy efficiency of buildings. *Journal of Energy Storage*, volumen 67.
- Sari, A., & Bicer, A. (2012). Thermal energy storage properties and thermal reliability of some fatty acid esters/building material composites as novel form-stable PCMs. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 114-122.
- Sigma-Aldrich*. (s.f.). Obtenido de <https://www.sigmaaldrich.com/CO/es>
- Simulador de dinámica molecular LAMMPS*. (s.f.). Obtenido de <https://www.lammps.org/#gsc.tab=0>
- Srivastava, S., Handoo, J., Agrawal, K., & Joshi, G. (1993). Estudios de transición de fase en n - alcanos y ceras relacionadas con el petróleo: una revisión. *Revista de Física y Química de Sólidos*, 639-670.
- Suresh, S., & Salyan, S. (2017). *Applications of solar energy*. Singapur: Springer.
- Tang, Z., Piao, C., Panpan, L., Gao, Y., & Chen, x. (junio de 2023). *Tightened 1D/3D carbon heterostructure infiltrating phase change materials for solar–thermoelectric energy harvesting: Faster and better*. Obtenido de

<https://www.proquest.com/docview/2830151282/BE86CBCA570741B4PQ/1?accountid=29068>

- Todd, B., & Daivis, P. (2017). *Nonequilibrium Molecular Dynamics Theory, Algorithms and Applications*.
- Tyagi, H., Kumar, A., Ranjan, P., & Powar, S. (2017). *Aplicaciones de la energía solar*. Singapur: Springer.
- Valadez Acuña, M. (19 de mayo de 2018). *Marco teórico: Método de Velocity-Verlet en métodos numéricos*. Obtenido de <https://fismvaladez.wordpress.com/2018/05/19/marco-teorico-metodo-de-velocity-verlet-en-metodos-numericos/>
- Wagner, H., & Mathur, J. (2018). *Introduction to wind energy systems*. Springer.
- Wang, X., Cheg, Q., Wu, M., Dua, P., Liu, C., & Rao, Z. (2022). Optimización de las propiedades térmicas del ácido láurico como material de cambio de fase con nanoláminas de nitruro de boro modificado-sulfato de sodio para almacenamiento de energía térmica. *Journal of Energy Storage*, volumen 61.
- Yang, H., Tatarchuk, B. J., Barron, T., & Dimick, P. S. (2014). *españa Patente n° ES2778903T3*.
- Younsi, Z., & Naji, H. (August 2017). A numerical investigation of melting phase change process via the enthalpy-porosity approach: Application to hydrated salts. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 12-24.
- Yu, K., Jia, M., Liu, Y., & Yang, Y. (2023). Binary decanoic acid/polyethylene glycol as a novel phase change material for thermal energy storage: Eutectic behaviors and energy conservation evaluation. *Journal of Energy Storage*, volumen 68.
- Zhang, T., Xu, B., & Chen, Z. (2021). Effect of Graphite Layers on the Conformation and Thermal Conductivity of n-octadecane: A Molecular Dynamics Study. *Journal of Thermal Science*, 1789-1802.
- Zhaodi, T., Cheng, P., Panpan, L., Yan, G., & Xiao, C. (junio de 2023). *Proquest*. Obtenido de <https://www.proquest.com/docview/2830151282/BE86CBCA570741B4PQ/1?accountid=29068>

Apéndice

Apéndice A. Código “mod” empleado en la simulación molecular para el cambio de fase para el n-octadecano LAMMPS

Los códigos usados en LAMMPS para la simulación y cambio de fase del n-octadecano para la captura de energía en el archivo mod, describen los parámetros del campo de fuerza UFF de la siguiente manera.

Tabla 6. *Funciones archivo "mod" estabilizacion n-octadecano.*

Línea	Comando	Función
1	pair_style lj/cut 10.0	El comando indica que se utilizará el potencial de Lennard-Jones con corte para calcular la fuerza intermolecular entre átomos pares. El valor 10.0 representa la distancia de corte
2	pair_modify tail yes	Establece una corrección de Van Der Waals de largo alcance a la presión y energía que no afectará la dinámica del proceso
3	pair_coeff 1 1 0.1051 3.8510	Referencia los coeficientes del campo de fuerza; donde las columnas 1 y 2 corresponde al tipo de átomo, y, las columnas 3 y 4 son σ y r respectivamente.

4	pair_coeff 2 2 0.0440 2.5710	
5	bond_style harmonic	Especifica que se utilizará el potencial armónico para modelar la energía de enlace entre átomos unidos. Al utilizar este comando, LAMMPS calculará la fuerza de restauración que actúa sobre los átomos unidos para mantenerlos a la distancia de equilibrio
6	bond_coeff 1 175 1.53	La columna 1 especifica el tipo de enlace, La columna 2 define la constante de fuerza (k), La columna 3 define la distancia de equilibrio
7	bond_coeff 2 175 1.09	
8	angle_style fourier	Define que el estilo de interacción angular entre los átomos en una simulación de dinámica molecular. se modela la energía potencial asociada a la flexión del ángulo entre los átomos utilizando el potencial de Fourier
9	angle_coeff 1 50 2.94094572 4.05723456 1.146981907	La columna 1 especifica el tipo de enlace, La columna 2 define la constante de resorte angular (k), La columna 3, 4 y 5 define la constante c0, c1 y c2 respectivamente, que representan la expansión de Fourier para el campo de fuerza UFF.
10	angle_coeff 2 50 2.94094572 4.05723456 1.146981907	

11	angle_coeff 1 50 2.94094572 4.05723456 1.146981907	
12	dihedral_style fourier	Este comando especifica que se utilizará el potencial de Fourier para modelar la energía de interacción entre un diedro formado por cuatro átomos
13	dihedral_coeff 1 1 22.5 2 180	La columna 1 especifica el tipo de enlace, La columna 2 define la constante de resorte angular (k), La columna 3 el coeficiente de Angulo y la columna 4 el ángulo de rotación
14	dihedral_coeff 1 1 22.5 2 180	

Apendice B. Código “data” empleado en la simulación molecular para el cambio de fase para el n-octadecano LAMMPS

El archivo data contiene información detallada sobre la simulación molecular, incluyendo el número total de átomos, enlaces, ángulos, torsiones (diedros), así como las dimensiones de la caja de simulación. Esta estructura es similar a la utilizada para estudiar la adsorción de energía, donde se analiza cómo cambian la cantidad de átomos, enlaces, ángulos, torsiones de las moléculas adicionales de n-octadecano en cada sección de la simulación.

Figura 12. *Totalidad de átomos, enlaces, ángulos, diedros del n-octadecano*

```
LAMMPS data file. CGCM style. atom_style full generated by
VMD/TopoTools v1.8 on
2800 atoms #17 capas
55 bonds #(c-c, c-h)
108 angles
153 dihedrals
2 atom types
2 bond types
3 angle types
2 dihedral types

-30 30 xlo xhi
-30 30 ylo yhi
-30 30 zlo zhi
```

En la figura se aprecia la estructura inicial del archivo “data” la cual se compone de:

Tabla 7. Estructura inicial data del *n*-octadecano

Comando	Función
2800 átomos	Indica la cantidad total de átomos del sistema
55 enlaces	Indica la cantidad total de enlaces del sistema
108 ángulos	Indica la cantidad total de ángulos del sistema
153 diedros	Indica la cantidad total de diedros del sistema
2 tipos de átomos	Indica la cantidad total de tipos de átomos en el sistema (C, H)
2 tipos de enlaces	Indica la cantidad total de tipos de enlaces en el sistema (C-C, C-H)
3 tipos de ángulos	Indica la cantidad total de tipos de ángulos en el sistema (C-C-C, C-C-H, H-C-H)

4 tipos de diedros	Indica la cantidad total de tipos de diedros en el sistema (C-C-C-C, C-C-C-H, H-C-C-H y H-C-C-C)
-30 30 xlo xhi	Indica las unidades inferiores (xlo) y superiores (xhi) en Angstrom en el eje X
-30 30 ylo yhi	Indica las unidades inferiores (ylo) y superiores (yhi) en Angstrom en el eje Y
-30 30 zlo zhi	Indica las unidades inferiores (zlo) y superiores (zhi) en Angstrom en el eje Z

Figura 13. *Sección de átomos del n-octadecano*

```

Atoms # full
1 1 1 -0.053 -6.34782 -26.878954 7.757023 #C
2 1 1 -0.053 -4.845426 -27.396939 7.363467 #C
3 1 1 -0.053 -3.630787 -26.289972 7.131037 #C
4 1 2 0.027 -4.948975 -27.982422 6.440359 #H
5 1 2 0.027 -4.529941 -28.083631 8.155504 #H
6 1 1 -0.053 -2.081625 -26.774119 6.700311 #C
7 1 2 0.027 -3.546097 -25.725391 8.067712 #H
8 1 2 0.027 -3.983342 -25.600518 6.35667 #H
9 1 1 -0.053 -0.837209 -25.647391 6.485519 #C
10 1 2 0.027 -2.179499 -27.327997 5.758962 #H

```

Figura 14. *Sección de enlaces del n-octadecano*

```

Bonds
1 1 45 33
2 1 31 27
3 1 25 21
4 1 19 15
5 1 39 37
6 1 13 9
7 1 52 1
8 1 7 3
9 1 55 50
10 1 5 2

```

Figura 15. *Sección de ángulos del n-octadecano*

Angles				
1	1	2	1	50
2	1	1	2	3
3	1	2	3	6
4	1	3	6	9
5	1	6	9	12
6	1	9	12	15
7	1	12	15	18
8	1	15	18	21
9	1	18	21	24
10	1	21	24	27

Figura 16. *Sección de diedros del n-octadecano.*

Dihedrals					
1	1	30	33	44	47
2	1	30	33	44	48
3	1	30	33	44	49
4	1	44	33	30	35
5	1	44	33	30	34
6	1	36	37	38	41
7	1	36	37	38	42
8	1	36	37	38	43
9	1	38	37	36	53
10	1	38	37	36	54

Las figuras anteriores se aprecian la estructura subsecuente a la inicial para la construcción total del archivo “data”. Esta se compone de la siguiente manera:

Tabla 8. *Estructura de átomos - archivo data asociado al n-octadecano*

Comando	Función
1	Indica el contador
1	Indica la etiqueta del átomo

1	Indica el tipo de átomo (1 - C, 2 - O y 3 - H)
-0.053	Indica la carga del átomo
-6.34782	Indica la posición en el eje X de la caja de simulación
-26.8789	Indica la posición en el eje Y de la caja de simulación
7.757023	Indica la posición en el eje Z de la caja de simulación

Tabla 9. Estructura de enlaces - archivo data asociado al n-octadecano.

Comando	Función
1	Indica el contador
1	Indica el tipo de enlace (1- C-C, 2- C-H)
1	Indica la afinidad del átomo 1
50	Indica la afinidad del aromo 2

Tabla 10. Estructura de ángulos - archivo data asociado al n-octadecano.

Comando	Función
1	Indica el contador
1	Indica el tipo de ángulo (1- C-C-C, 2- C-C-H y 3- H-C-H)
2	Indica la afinidad del átomo 1
1	Indica la afinidad del átomo 2
50	Indica la afinidad del átomo 3

Tabla 11. Estructura de diedros - archivo data asociado al n-octadecano.

Comando	Función
1	Indica el contador

1	Indica el tipo de diedro (1- C-C-C-C, 2- C-C-C-H, 2- H-C-C-C- y 1- H-C-C-H)
30	Indica la afinidad del átomo 1
33	Indica la afinidad del átomo 2
44	Indica la afinidad del átomo 2
47	Indica la afinidad del átomo 2

Apendice C. Código “In” empleado en la simulación molecular para el cambio de fase para el n-octadecano LAMMPS.

El archivo "in" contiene los códigos específicos que se utilizan para estabilizar la estructura de la celda de n-octadecano. Estos códigos pueden incluir instrucciones para aplicar restricciones a ciertos átomos o para realizar ajustes en la geometría de la celda, con el fin de garantizar que la simulación se ejecute de manera adecuada y que los resultados sean fiables.

Tabla 12. Archivo “in” utilizado en la simulación del n-octadecano

Código	Función
units real	Fija las unidades usadas en la simulación como: masa (gramo/mol), distancia (angstroms), tiempo (femtosegundo), energía (kcal/mol), etc.
dimension 3	Establece la identidad de las dimensiones de la caja que se lleva cabo en la simulación
processors * * *	Indica el número de procesadores que se utilizarán en cada dimensión de la malla de procesadores.

boundary p p p	Se utiliza para establecer las condiciones de contorno periódicas en las tres dimensiones espaciales (x, y, z) de la simulación
atom_style full	Define el estilo de los átomos usados en la simulación, determinando el tipo de atributos asociados a los átomos
read_data data latm.CA	Lee el archivo “data” que contiene la información necesaria para la ejecución de la simulación en Lammmps
replicate 1 1 1	Define el número de átomos de la simulación
group PA type 1 2	se utiliza para crear un grupo de átomos en función de los criterios establecidos para la simulación.
log log_PA_293.log	Este comando en LAMMPS cierra el archivo de registro actual, crea un nuevo archivo con el nombre que se especifica para comenzar a escribir información en un nuevo archivo.
include mod.CA	Abre un nuevo archivo de entrada para iniciar la lectura de comandos especificados desde ese archivo, en este caso, el archivo “mod” explicado anteriormente.
dump 1 all custom 500 PA_293.lammpstrj id mol type x y z ix iy iz	Este comando en LAMMPS imprime datos específicos en el archivo "PA_293.lammpstrj" cada 500 pasos. Los datos incluyen el identificador (ID), mol, tipo, coordenadas x, y, z, y los índices de celda x, y, z.

thermo 10	Calcula e imprime la información termodinámica para el archivo final en pasos de tiempo múltiplos de N al inicio y final para la simulación. En este caso, cada 10 pasos
thermo_style custom step atoms temp vol lx ly lz xy xz yz press pxx pyy pzz pxy pxz pyz pe ke enthalpy evdwl ecoul epair emol elong	Establece el formato y los datos que se imprimirán en la pantalla y en los archivos de registro para monitorear la simulación. Los datos incluyen información como el número de pasos, el número de átomos, la temperatura, el volumen, las longitudes de la caja, la inclinación de las cajas la presión, los componentes del tensor de presión, la energía potencial total, la energía cinética, la entalpía, la energía de Van der Waals, la energía de Coulomb, la energía de pares, la energía molecular y la energía de largo alcance.
thermo_modify norm no	Determina si los valores de salida termodinámicos se normalizan de acuerdo con el número de átomos o n, de acuerdo con el indicativo “yes” o “no” respectivamente
thermo_modify lost/bond ignore	Este comando en LAMMPS indica que se debe ignorar la información sobre enlaces perdidos al calcular propiedades termodinámicas, como una forma de evitar que afecten los resultados de la simulación.
velocity PA create 293 112 rot yes dist gaussian	El comando asigna velocidades aleatorias y distribuidas de forma gaussiana a los átomos en el grupo "PA", con una

	temperatura inicial de 293 Kelvin y conservando el momento angular total del sistema.
<code>neigh_modify delay 0 every 10 check yes</code>	Este comando en LAMMPS configura los parámetros que controlan cómo se construyen y utilizan las listas de vecinos para calcular interacciones entre átomos. Específicamente, "delay" establece cuántos pasos deben transcurrir, "every" determina cada cuántos pasos se reconstruye la lista, y "check yes" indica que se debe verificar si es necesario reconstruir la lista.
<code>neigh_modify one 10000</code>	Establece los parámetros que afectan a la construcción de la celda y uso de listas de vecinos por pares. En este caso, "one 10000" afecta en cómo se asigna la memoria para las listas de vecinos
<code>neigh_modify every 1</code>	Este comando en LAMMPS especifica que las listas de vecinos, que se utilizan para calcular interacciones entre átomos, deben ser reconstruidas en cada paso de simulación
<code>neigh_modify one 10000</code>	Establece los parámetros que afectan a la construcción de la celda y uso de listas de vecinos por pares. En este caso, "one 10000" afecta en cómo se asigna la memoria para las listas de vecinos
<code>compute RDF all rdf 100</code>	calcula la RDF para todos los átomos en la simulación, colocando las distancias entre todos los pares de átomos dentro de una cierta distancia de corte.

<code>fix 1 all ave/time 100 1 100 c_RDF[*] file archivo.rdf mode vector</code>	El código indica que se debe calcular la función de distribución radial (RDF) de los átomos.
<code>run 1000000</code>	Pasos especificados en un tiempo para ejecutar la simulación
<code>unfix 1</code>	Elimina un “fix” definido previamente con un comando “fix”
<code>minimize 1e-6 1e-6 10000 10000</code>	Realizar una minimización energética del sistema de simulación.
<code>fix 1 PA nve/limit 0.05</code>	Realiza simulaciones de dinámica molecular manteniendo constante el volumen, la energía y el número de partículas (NVE) para un grupo de átomos. En cada paso de tiempo, actualiza tanto las posiciones como las velocidades de los átomos en el grupo, con un límite máximo en la distancia que un átomo puede desplazarse en un paso de tiempo.
<code>fix 2 all langevin 293 293 10 320</code>	Aplica un termostato Langevin encargado del control de temperatura a un grupo de átomos. En este caso, temperatura inicial de 293 (Tstart), temperatura final de 293 (Tstop), tiempo de relajación de la temperatura de 10 (damp) y una semilla única con valor positivo de 320 (seed)
<code>run 1000000</code>	Pasos especificados en un tiempo para ejecutar la simulación
<code>unfix 1</code>	Elimina un “fix” definido previamente con un comando “fix”

unfix 2	Permitiendo que los átomos afectados por esa restricción vuelvan a moverse libremente según las fuerzas y condiciones del sistema
write_data Uno.data	Escribe un archivo "data" en formato de texto donde identifica el estado de la simulación.
write_restart uno_1.restart	Realiza un archivo "restart" en formato de texto del estado.
fix 1 PA nvt temp 293 293 10	Realiza la integración temporal en ecuaciones de movimiento no hamiltonianas estilo Nose-Hoover que están diseñadas para generar posiciones y velocidades muestreadas a partir de los conjuntos canónico, en este caso, NVT, ejecutándose con un Tstart y Tstop de 293 y Tdamp de 10
run 2000000	Pasos especificados en un tiempo para continuar ejecutar la simulación
unfix 1	Elimina un "fix" definido previamente con un comando "fix"
write_data CA_PA_1atm.data	Escribe un archivo "data" en formato de texto donde identifica el estado de la simulación.
write_restart dos_2.restart	Realiza un archivo "restart" en formato de texto del estado.
fix 1 all nvt temp 293 293 10	En LAMMPS establece un termostato NVT para mantener la temperatura constante a 293K en todos los átomos de la simulación,

	con un tiempo de relajación térmica de 10 unidades de tiempo.
run 2000000	Pasos especificados en un tiempo para continuar ejecutar la simulación
unfix 1	Elimina un “fix” definido previamente con un comando “fix”
write_data CA_PA_1atm,.data	Escribe un archivo "data" en formato de texto donde identifica el estado de la simulación
write_restart tres_3.restart	Realiza el ultimo archivo "restart" en formato de texto del estado.

Apendice D. Código “In.viscosidad” empleado en la simulación molecular para el cambio de fase para el n-octadecano LAMMPS

El archivo "in.viscosidad" contiene los códigos específicos que se utilizan para estabilizar la estructura de la celda de n-octadecano. Estos códigos pueden incluir instrucciones para la obtención experimental de la viscosidad a partir de los archivos de la molécula de n-octadecano suministrada.

Tabla 13. Archivo “in.viscosidad” utilizado en la simulación del n-octadecano.

Código	Función
units real	Fija las unidades usadas en la simulación como: masa (gramo/mol), distancia (angstroms), tiempo (femtosegundo), energía (kcal/mol), etc.

dimension 3	Establece la identidad de las dimensiones de la caja que se lleva cabo en la simulación
processors * * *	Indica el número de procesadores que se utilizarán en cada dimensión de la malla de procesadores.
boundary p p p	Se utiliza para establecer las condiciones de contorno periódicas en las tres dimensiones espaciales (x, y, z) de la simulación
atom_style full	Define el estilo de los átomos usados en la simulación, determinando el tipo de atributos asociados a los átomos
read_data data atm.CA	Lee el archivo “data” que contiene la información necesaria para la ejecución de la simulación en Lammmps
replicate 1 1 1	Define el número de átomos de la simulación
group PA type 1 2	se utiliza para crear un grupo de átomos en función de los criterios establecidos para la simulación.
log log_PA_293.log	Este comando en LAMMPS cierra el archivo de registro actual, crea un nuevo archivo con el nombre que se especifica para comenzar a escribir información en un nuevo archivo.
include mod.CA	Abre un nuevo archivo de entrada para iniciar la lectura de comandos especificados desde ese archivo, en este caso, el archivo “mod” explicado anteriormente.

<pre>dump 1 all custom 500 PA_293.lammpstrj id mol type x y z ix iy iz</pre>	<p>Este comando en LAMMPS imprime datos específicos en el archivo "PA_293.lammpstrj" cada 500 pasos. Los datos incluyen el identificador (ID), mol, tipo, coordenadas x, y, z, y los índices de celda x, y, z.</p>
<pre>thermo 10</pre>	<p>Calcula e imprime la información termodinámica para el archivo final en pasos de tiempo múltiplos de N al inicio y final para la simulación. En este caso, cada 10 pasos</p>
<pre>thermo_style custom step atoms temp vol lx ly lz xy xz yz press pxx pyy pzz pxy pxz pyz pe ke enthalpy evdwl ecoul epair emol elong</pre>	<p>Establece el formato y los datos que se imprimirán en la pantalla y en los archivos de registro para monitorear la simulación. Los datos incluyen información como el número de pasos, el número de átomos, la temperatura, el volumen, las longitudes de la caja, la inclinación de las cajas la presión, los componentes del tensor de presión, la energía potencial total, la energía cinética, la entalpía, la energía de Van der Waals, la energía de Coulomb, la energía de pares, la energía molecular y la energía de largo alcance.</p>
<pre>thermo_modify norm no</pre>	<p>Determina si los valores de salida termodinámicos se normalizan de acuerdo con el número de átomos o n, de acuerdo con el indicativo "yes" o "no" respectivamente</p>

<code>thermo_modify lost/bond ignore</code>	Este comando en LAMMPS indica que se debe ignorar la información sobre enlaces perdidos al calcular propiedades termodinámicas, como una forma de evitar que afecten los resultados de la simulación.
<code>velocity PA create 293 112 rot yes dist gaussian</code>	El comando asigna velocidades aleatorias y distribuidas de forma gaussiana a los átomos en el grupo "PA", con una temperatura inicial de 293 Kelvin y conservando el momento angular total del sistema.
<code>neigh_modify delay 0 every 10 check yes</code>	Este comando en LAMMPS configura los parámetros que controlan cómo se construyen y utilizan las listas de vecinos para calcular interacciones entre átomos. Específicamente, "delay" establece cuántos pasos deben transcurrir, "every" determina cada cuántos pasos se reconstruye la lista, y "check yes" indica que se debe verificar si es necesario reconstruir la lista.
<code>neigh_modify one 10000</code>	Establece los parámetros que afectan a la construcción de la celda y uso de listas de vecinos por pares. En este caso, "one 10000" afecta en cómo se asigna la memoria para las listas de vecinos.
<code>neigh_modify every 1</code>	Este comando en LAMMPS especifica que las listas de vecinos, que se utilizan para calcular interacciones entre átomos, deben ser reconstruidas en cada paso de simulación.

<code>neigh_modify one 10000</code>	Establece los parámetros que afectan a la construcción de la celda y uso de listas de vecinos por pares. En este caso, “one 10000” afecta en cómo se asigna la memoria para las listas de vecinos
<code>minimize 1e-6 1e-6 10000 10000</code>	Realizar una minimización energética del sistema de simulación.
<code>reset_timestep 0</code>	Reinicia la simulación a cero, borrando cálculos previos y preparando el sistema para una nueva ejecución. Es útil para reanudar simulaciones interrumpidas.
<code>fix NVT all nvt temp \$T \$T 100 drag 0.2</code>	
<code>variable pxy equal pxy</code>	Establece variables para almacenar valores preexistentes pxy.
<code>variable pxz equal pxz</code>	Establece variables para almacenar valores preexistentes pxz.
<code>variable pyz equal pyz</code>	Establece variables para almacenar valores preexistentes pyz.
<code>fix SS all ave/correlate \$s \$p \$d v_pxy v_pxz v_pyz type auto file S0St.dat ave running</code>	Define un fix para calcular y promediar correlaciones espaciales entre variables
<code>variable scale equal \${convert}/\${kB}\$T\$V*\$s*\$dt</code>	Definir una "escala" variable basada en constantes, temperatura, volumen, paso de tiempo y una variable

variable v11 equal trap(f_SS[3])*\${scale}	Calcula una variable "v" como el promedio de v11, multiplicado por 1000.
variable v22 equal trap(f_SS[4])*\${scale}	Calcula una variable "v" como el promedio de v22, multiplicado por 1000.
variable v33 equal trap(f_SS[5])*\${scale}	Calcula una variable "v" como el promedio de v33, multiplicado por 1000.
variable v equal ((v_v11+v_v22+v_v33)/3.0)*1000	Realiza una solución para calcular y promediar la variable "v" cada 100 pasos y almacenar los resultados en "viscosity.profile".
variable ndens equal count(all)/vol	Define una variable "ndens" como el número de átomos dividido por el volumen.
fix AVE all ave/time 100 1 100 v_v file viscosity.profile	Define una solución para calcular y promediar la variable "v" cada 100 pasos y almacenar los resultados en "viscosity.profile".
run 10000	Pasos especificados en un tiempo para continuar ejecutar la simulación
write_data GW.dat	Realiza el ultimo archivo "data" en formato de texto del estado.

Apéndice E. Parámetros y datos adicionales empleado en la simulación molecular para el cambio de fase para el n-octadecano LAMMPS

Tabla 14. *Parámetros potenciales de Lennard-Jones para diferentes partículas*

tipo de partícula	ϵ_{ij} (kcal/mol)	σ_{ij} (Å)
C	0.105	3.851
h	0.044	2.886
norte	0,069	3.660
oh	0.060	3.500
punto	0.080	2.754
Cu	0.005	3.495
Alabama	0.505	4.499

Tabla 15. *Los valores de la distancia del resorte en los tipos de eslabones simples presentes en el cuadro de simulación.*

Tipo de bono	Distancia (Å)
CC	1,53
CH-	1.09

Tabla 16. *Valores fijos utilizados en interacciones angulares simples dentro del cuadro de simulación*

Tipo de bono	Ángulo (grados)	Constante de resorte angular (kcal/mol*grado)
C-C-C	109.471	50
CCH-	109.471	50
HCH	109.471	50

Tabla 17. Valores fijos utilizados en las interacciones del ángulo diédrico

Tipo de bono	Coefficiente de ángulo	Constante de resorte angular (kcal/mol*grado)
C-C-C-H	2	22.5
H-C-C-H	2	22.5

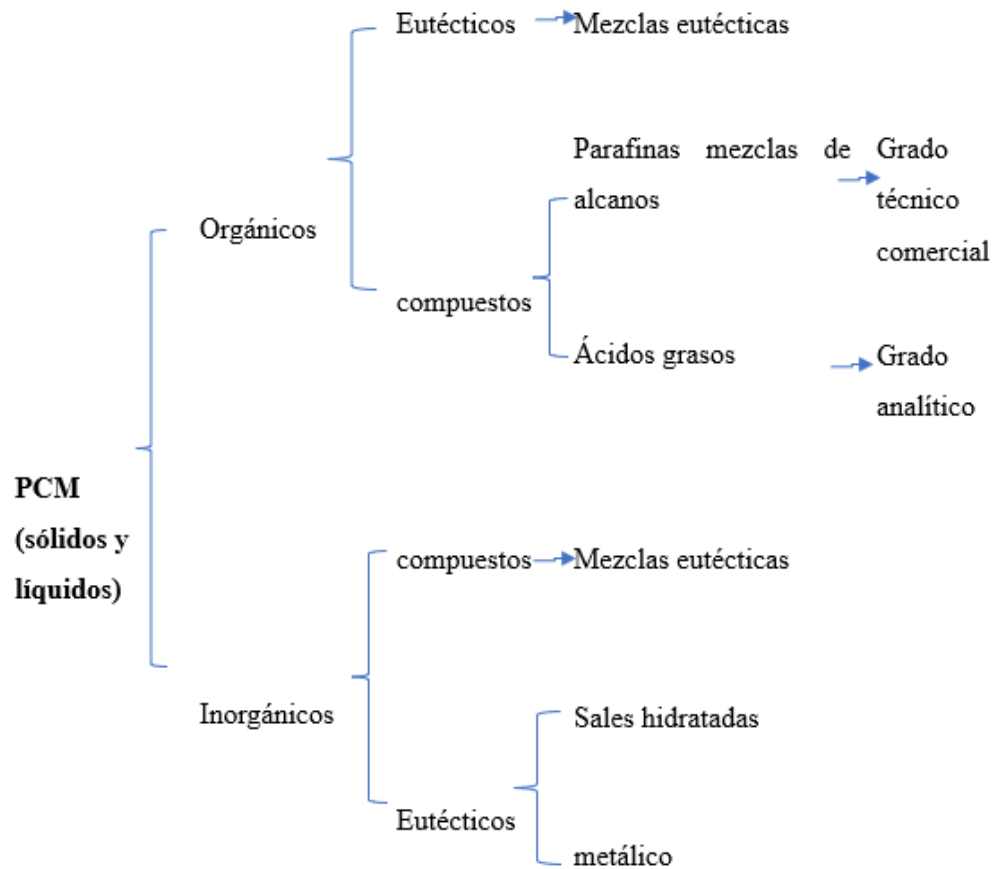
Figura 17. Clasificación de materiales PCM.

Figura 18. Infografía simulación

