

**CARACTERIZACION Y DETERMINACION DE LAS PROPIEDADES
TERMODINAMICAS DEL FOSFATO DE CIRCONIO**

DENNYS PAOLA GUARIN PLATA

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTA DE INGENIERIAS FISICO QUIMICAS
BUCARAMANGA**

2006

**CARACTERIZACION Y DETERMINACION DE LAS PROPIEDADES
TERMODINAMICAS DEL FOSFATO DE CIRCONIO**

DENNYS PAOLA GUARIN PLATA

**DIRECTOR
DOCTOR TAHIR CAGIN**

**CODIRECTOR
DIONISIO LAVERDE**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTA DE INGENIERIAS FISICO-QUIMICAS
ESCUELA DE INGENIERIA QUIMICA
BUCARAMANGA**

2006

CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCION	9
1. ANTECEDENTES	11
1.1 GENERALIDADES	11
1.1.1 Que son los nanomateriales	11
1.1.2 Materiales laminares	13
1.2 FOSFATO DE CIRCONIO	14
1.2.1 Circonio	14
1.2.2 Descripción de la molécula de Fosfato de Circonio	17
1.2.3 Información Cristalográfica	20
1.2.4 Aplicaciones	21
1.3 DESCRIPCION EL SOFTWARE CERIU ²	22
2. METODOLOGIA	23
2.1 ETAPAS METODOLOGICAS	25
2.1.1 Caracterización estructural del fosfato de circonio α -ZrP	26
2.1.2 Construcción y visualización de la estructura	27
2.1.3 Construcción de la supercelda y las estructuras con diferente numero de láminas (planos)	28
2.1.4 Simulación dinámica inicial para la determinación del rango de temperatura	31
2.1.5 Simulación general	33
3. RESULTADOS Y ANALISIS	36
3.1 RESULTADOS DE LA SIMULACION	36
3.2 ANALISIS DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS A TRAVES DE LAS SIMULACION MOLECULAR.	42
CONCLUSIONES	47
BIBLIOGRAFIA	49
ANEXOS	

LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla.1 Descripción elemental del circonio	15
Tabla 2. Parámetros de celda del circonio	15
Tabla. 3 Propiedades termodinámicas del circonio	16
Tabla 4. Fases cristalográficas del fosfato de circonio.	18
Tabla 5. Parámetros de celda del α -ZrP	20
Tabla 6. Posiciones atómicas del α -ZrP	21
Tabla 7. Parámetros de celda C de diferentes planos.	30
Tabla 8. Características de la simulación molecular herramienta DINAMIYS SIMULATION	32
Tabla 9. Parámetros característicos de la simulación	33
Tabla 10. Parámetros de celda de la supercelda de Fosfato de Circonio.	36
Tabla 11. Número de átomos de los diferentes modelos del fosfato de circonio contruidos en Cerius ² .	37
Tabla 12. Parámetro de celda c para los modelos estructurales laminares con diferente número de planos laminares de α -ZrP.	37
Tabla 13. Energía total de los diferentes modelos moleculares laminares correspondientes al α -ZrP.	38
Tabla 14. Propiedades del sistema molecular de 2 planos de α -ZrP.	40
Tabla 15. Energía de Gibbs por plano molecular	42
Tabla 16. Delta de Energía de Gibbs o Energía requerida	43
Tabla 17. Capacidades caloríficas	44
Tabla A.1. Propiedades del sistema molecular de 1 plano de α -ZrP	51
Tabla A.2 Propiedades del sistema molecular de 4 planos de α -ZrP	53
Tabla A.3 Propiedades del sistema molecular de 6 planos de α -ZrP	54
Tabla A.4 Propiedades del sistema molecular de 8 planos de α -ZrP	55
Tabla A.5 Propiedades del sistema molecular de 10 planos de α -ZrP	59

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Modelos estructurales de los nanocompuestos correspondientes a las dimensiones.	12
Figura 2. Esquema de la estructura fosfato de circonio	19
Figura 3. Mapa conceptual de la investigación	25
Figura 4. Estructura del α -ZrP (bifosfato de circonio monohidratado) $Zr(H_3PO_4)_2 \cdot H_2O$.	28
Figura 5. Súper celda de α -ZrP (2*3*1)	29
Figura 6. Estructuras laminares con diferente número de planos	31

LISTA DE GRAFICAS

	Pág.
Grafica 1. Representación grafica de la energía libre de Gibbs correspondiente a cada sistema estructural del α ZrP.	38
Grafica 2. Temperatura Vs Energía total (sistema α ZrP 2 planos)	39
Grafica 3. Temperatura Vs Densidad (sistema α ZrP 2 planos)	40
Grafica 4. Temperatura Vs Volumen (sistema α ZrP 2 planos)	40
Grafica 5. Temperatura Vs Energía Potencial (sistema α ZrP 2 planos)	40
Grafica 6. Ejemplo grafico de la determinación de la capacidad calorífica para un sistema molecular de α ZrP de 1 plano.	43
Grafica 7. Capacidades caloríficas	44
Grafica A.1 Temperatura Vs Energía total (sistema α ZrP 1 plano)	50
Grafica A.2 Temperatura Vs Densidad (sistema α ZrP 1 plano)	51
Grafica A.3 Temperatura Vs Volumen (sistema α ZrP 1 plano)	51
Grafica A.4 Temperatura Vs Energía Potencial (sistema α ZrP 1 plano)	51
Grafica A.5 Temperatura Vs Energía total (sistema α ZrP 4 planos)	52
Grafica A.6 Temperatura Vs Densidad (sistema α ZrP 4 planos)	53
Grafica A.7 Temperatura Vs Volumen (sistema α ZrP 4 planos)	53
Grafica A.8 Temperatura Vs Energía Potencial (sistema α ZrP 4 planos)	53
Grafica A.9 Temperatura Vs Energía total (sistema α ZrP 6 planos)	54
Grafica A.10 Temperatura Vs Densidad (sistema α ZrP 6 planos)	55
Grafica A.11 Temperatura Vs Volumen (sistema α ZrP 6 planos)	55
Grafica A.12 Temperatura Vs Energía Potencial (sistema α ZrP 6 planos)	55
Grafica A.13 Temperatura Vs Energía total (sistema α ZrP 8 planos)	56
Grafica A.14 Temperatura Vs Densidad (sistema α ZrP 8 planos)	57
Grafica A.15 Temperatura Vs Volumen (sistema α ZrP 8 planos)	57
Grafica A.16 Temperatura Vs Energía Potencial (sistema α ZrP 8 planos)	57

Grafica A.17 Temperatura Vs Energía total (sistema α ZrP 10 planos)	58
Grafica A.18 Temperatura Vs Densidad (sistema α ZrP 10 planos)	59
Grafica A.19 Temperatura Vs Volumen (sistema α ZrP 10 planos)	59
Grafica A.20 Temperatura Vs Energía Potencial (sistema α ZrP 10 planos)	59

RESUMEN

TÍTULO: CARACTERIZACION Y DETERMINACION DE LA ESTRUCTURA CRISTALINA MAS ESTABLE DEL FOSFATO DE CIRCONIO APLICANDO TECNICAS DE SIMULACION MOLECULAR*.

AUTOR: DENNYS PAOLA GUARIN PLATA**

PALABRAS CLAVE: fosfato de circonio, materiales laminares, simulación molecular, periodicidad, supercelda, índice de Miller, ensamble, CERIUS².

Usando como partida la geometría obtenida en previos estudios experimentales, se realizaron simulaciones de dinámica molecular a la fase α del fosfato de circonio. Las simulaciones sobre la celda unitaria revelan que la fase α es estable en el rango de temperatura de 200 a 900 K. Una supercelda es construida con la modificación de los parámetros de Miller (de 111 a 231) Las simulaciones en la supercelda son realizadas en ensamble NPT, y en base a ello la capacidad calorífica a presión constante es determinada.

Adicionalmente, se construyeron 5 diferentes modelos de celdas de simulación, diferenciándose unos de otros en el número de láminas a lo largo del eje cristalográfico c. Las simulaciones en estos sistemas fueron realizadas en el ensamble NVT, cuidando de que los parámetros de celdas usados se ajusten a aquellos calculados en las supercelda 231 para cualquier temperatura. El comportamiento de la energía libre de Gibbs con la temperatura revela que la supercelda, junto con los sistemas con uno y dos planos presenta el comportamiento más homogéneo, y este último presenta mayor similitud con el comportamiento de la supercelda. Para la construcción del sistema, y la simulación misma, fue empleado el software CERIUS², el cual es una herramienta bastante útil tanto en la construcción y visualización de estructuras, y en la predicción de propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas de sistemas moleculares periódicos y no-periódicos. Los detalles mas importantes de este software son descritos en este trabajo.

* Trabajo de grado

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas, Escuela de Ingeniería Química. Director: PhD. TAHIR CAGIN

ABSTRACT

TITLE: CHARACTERIZATION AND DETERMINATION OF THE MOST STABLE CRYSTALLINE STRUCTURE OF ZIRCONIUM PHOSPHATE BY APPLYING MOLECULAR SIMULATION TECHNIQUES*.

AUTHOR: DENNYS PAOLA GUARIN PLATA**

KEYWORDS: ZIRCONIUM PHOSPHATE, laminar materials, molecular simulation, periodicity, supercell, Miller index, ensemble, CERIU².

DESCRIPTION:

Classical Molecular Dynamics Simulations was performed on α phase of zirconium phosphate. The initial configuration is taken from previous experimental studies. The simulation on the unit cell reveal the stability of the α -phase as in the range from 200 to 900 K. s different systems. A supercell is built by modifying the miller parameters (from 111 to 231). The simulations on the supercell are performed using the NPT ensemble. On the basis of these simulations the heat capacity at constant pressure is determined.

Additionally, five different models of simulation cells are built, the difference among these models is the number of layer along the crystallographic axis c. The simulations on these systems were performed using NVT ensemble, accounting for the cell parameters to fit those calculated from the simulation on the 231 supercell at any temperature. The behavior of the gibbs energy as temperature changes reveals that the supercell, together with the systems possessing one and two layers, presents the most homogenous behavior. Moreover, the system with two layers is the one which is more alike the supercell.

* Work of degree

** Faculty of Physicist Chemical engineerings. School of Chemical Engineering. Manager PhD. TAHIR CAGIN

INTRODUCCION

Este trabajo de investigación fue desarrollado en la universidad de Texas A&M durante una pasantía de investigación.

La investigación realizada tiene especial importancia dado que el fosfato de circonio es considerado como un compuesto laminar, inorgánico con estructura homogénea por lo tanto presenta mejores propiedades mecánicas, termodinámicas, mejor superficie y mejor permeación. Desde hace aproximadamente 40 años este compuesto a despertado gran interés entre la comunidad científica entre los cuales se destacan los estudios realizados por el químico Abraham Clearfield siendo este uno de los primeros investigadores interesados en la determinación y estudio de las propiedades y características del fosfato de circonio.

Los materiales laminares como es el caso del fosfato de circonio, son de gran interés debido a sus importantes aplicaciones en las diferentes áreas científicas y tecnológicas como en el intercambio iónico, intercalación y catálisis también tienen numerosas aplicaciones en recubrimientos, superficies protectoras, revestimientos metálicos, bimetálicos, laminados y celdas combustibles entre otras.

La mayoría de compuestos laminares son obtenidos como polvos; con frecuencia de baja cristalinidad, por esta razón se hace difícil casi imposible la determinación estructural por análisis de rayos X. la disponibilidad de fuentes de sincrotrón y neutrones ha favorecido en los recientes años un rápido desarrollo de técnicas experimentales y numéricas para la determinación estructural de datos de polvos de difracción haciendo posible su aplicación uniforme para sistemas de media complejidad.

Sin embargo, hasta en casos donde los sólidos laminares inicialmente exhiben un alto grado de cristalinidad, sobrepasando grandes bandas relativamente pobres en patrones de difracción son con frecuencia observados cuando estos sólidos son modificados por intercambio iónico, intercalación o apilamiento ; por

está razón se han desarrollado técnicas no experimentales para el estudio y caracterización de nuevos materiales que llegue a presentar baja cristalinidad o carencia en patrones de difracción. Entre esas nuevas técnicas se encuentra la técnica Force Field (FF), la cual fue implementada en este trabajo de investigación.

Ésta técnica es considerada como una herramienta poderosa de investigación de grandes sistemas de moléculas poliatómicas, permitiendo la obtención de datos además de aplicaciones en simulaciones moleculares.

En este trabajo que principalmente tiene por objetivo la determinación de algunas propiedades termodinámicas que permitan determinar la estructura más estable del fosfato de circonio por medio de herramientas de simulación molecular; se ha empleado el paquete computacional Cerius² a través del cual es posible monitorear las fluctuaciones internas moleculares, determinar propiedades termodinámicas, mecánicas, térmicas generando información a nivel microscópico.

Este trabajo forma parte de un proyecto de investigación que conduce al estudio y al desarrollo de nuevos y mejores materiales, empleando técnicas de simulación molecular que permitan optimizar tiempos y resultados. También con este trabajo se pretende mostrar el desarrollo metodológico que condujo a la determinación de una estructura más estable, a partir del estudio de su estructura cristalina y sus propiedades termodinámicas con la ayuda del software Cerius².

1. ANTECEDENTES

En este capítulo se encuentran los fundamentos teóricos precisos para el desarrollo experimental de la caracterización y determinación de las propiedades termodinámicas del Fosfato de Circonio.

Teniendo en cuenta que el fosfato de circonio es considerado como un nanomaterial, laminar, inorgánico con características estructurales especiales y propiedades térmicas muy aplicables. Este capítulo presenta información generalizada acerca de qué son los nanomateriales, su clasificación e importancia; cuales son las características de los materiales laminares e información detallada acerca de las características, composición, tipos de estructuras o fases, propiedades físicas y químicas y aplicaciones del fosfato de circonio.

Por último se presenta una descripción del sistema de simulación molecular y se explicaran algunas de las herramientas empleadas en el desarrollo de este trabajo de investigación.

1.1 GENERALIDADES

1.1.1 Que son los Nanomateriales

Los nanomateriales son considerados como materiales a nanoescala con características estructurales de una dimensión entre 1-100 nanómetros. En su diseño se involucran sistemas de simulación por ordenador para construir un arreglo de átomos, calcular su estructura molecular y decidir sus propiedades físicas y químicas; posteriormente se elaboran prototipos reales de aquellos modelos corroborando la información obtenida por el paquete computacional.

Se desarrollan con el objetivo de obtener materiales a escala nano con propiedades adecuadas para una aplicación determinada, inteligentes,

biomiméticos, energéticamente más eficientes, reciclables y menos tóxicos a favor del medio ambiente y el desarrollo sostenible.

Los nanomateriales pueden ser subdivididos en nanopartículas, nanocapas y nanocompuestos. El enfoque de los nanomateriales es una aproximación desde abajo hacia arriba a las estructuras y efectos funcionales de forma que la construcción de bloques de materiales son diseñados y ensamblados de forma controlada.

La definición de materiales nanocompuestos se ha ampliado significativamente para abarcar una extensa variedad de sistemas tales como uni-dimensional. Bi-dimensional, tri-dimensional y materiales amorfos, hechos a partir de distintos componentes y trabajados a escala nanométrica. En la figura 1 se presentan los diferentes tipos de nanocompuestos.

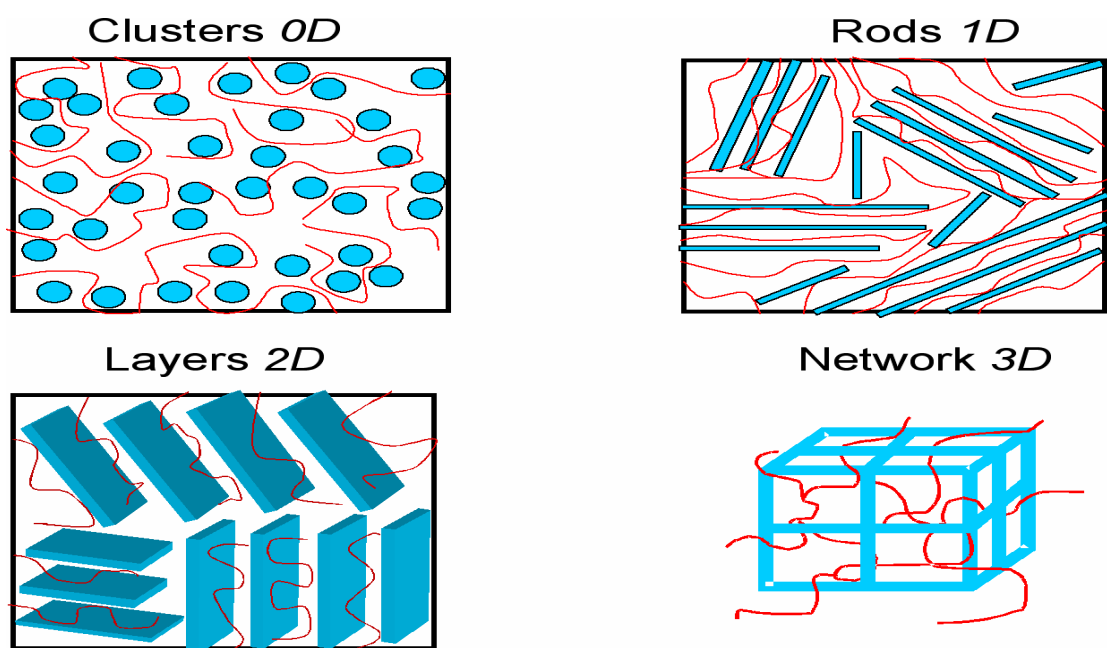


Figura 1. Modelos estructurales de los nanocompuestos correspondientes a las dimensiones.

Las propiedades de los materiales nanocompuestos dependen no solo de las propiedades de sus patrones individuales sino también de su morfología y de sus características interfaciales. Lo último puede derivarse de la combinación

de propiedades a partir de las materias constituyentes en un solo material. Hay también la posibilidad de nuevas propiedades las cuales son desconocidas en los materiales constituyentes y forman parte de recientes estudios.

El objetivo de los materiales nanocompuestos es mejorar las propiedades mecánicas, eléctricas, termodinámicas y térmicas de un material que gracias a la combinación con otros elementos puede optimizar su peso y su resistencia. En el caso de los polímeros, ellos permiten interaccionar a nivel microscópico la dimensión geométrica de nanofibras de carbón y nanotubos de carbono, siendo similares estos a las cadenas moleculares de polímeros.

Los nanocompuestos presentan una gama amplia de usos entre los cuales cabe destacar algunos como los metal-óxidos metálicos, metal-metal cerámicos y polímero-cerámico, entre otras posibles combinaciones a demás, los nanocompuestos existen de diferentes formas y diferentes características. En este trabajo se va a resaltar la importancia de los nanocompuestos inorgánicos bidimensionales laminares tales como: Arcillas, óxidos metálicos y metales; los compuestos laminares incluyen recubrimientos delgados, superficies protectoras, revestimientos metálicos, bimetálicos, laminados, catálisis y celdas combustibles entre otras aplicaciones. Algunos compuestos reforzados con fibras producidos a partir de cintas o tejidos pueden considerarse parcialmente laminares. Gran cantidad de estos, están diseñados para mejorar la resistencia a la corrosión; otras características de importancia incluyen resistencia superior al desgaste o a la abrasión, mejor apariencia estética y algunas características de expansión térmica poco usuales^[1].

1.1.2. Materiales Laminares

Los materiales con estructura laminar son sólidos bidimensionales que poseen átomos firmemente ligados entre sí en dos direcciones del espacio formando láminas (planos) y débilmente ligados en la dirección perpendicular a estas láminas. La región de interacción débil, entre las láminas, se conoce normalmente como región interlaminar o galería.

Los materiales laminares tienen bien definido y ordenado el espacio entre laminas o planos lo cual los hace potencialmente accesibles a introducir nuevos elementos. Esta habilidad permite que estos materiales puedan actuar como matrices o anfitriones para polímeros, aumentando rendimiento de los materiales híbridos.

Los sólidos laminares poseen áreas superficiales elevadas, entre 100 y 1000m²/g. En muchos casos, la superficie interlaminar es accesible solamente al agua y a otras moléculas polares pequeñas que son capaces de solvatar los iones de compensación [2].

1.2 FOSFATO DE CIRCONIO

El fosfato de circonio es considerado como un compuesto inorgánico de tipo laminar que está constituido por átomos de Circonio, Fósforo, Oxígeno e Hidrógeno [3]. Teniendo en cuenta las definiciones expuestas anteriormente acerca de los nanocompuestos y específicamente acerca de sus propiedades se considera importante tener en cuenta algunas de las propiedades e importancia del circonio. Propiedades y características que se verán reflejadas en el fosfato de circonio.

1.2.1 Circonio

Es un elemento metálico que ocupa el lugar 18 en abundancia entre los elementos de la corteza terrestre; se encuentra libre en la naturaleza, existe principalmente como silicato, en el mineral Zircón y como óxido, en el mineral Badeleyta, que se encuentra en grandes cantidades en Brasil [4].

Su descripción y propiedades están tabuladas para efectos de mayor información y resumen en las siguientes tablas:

Tabla.1 Descripción elemental del circonio

Propiedad	
Símbolo químico	Zr
Numero Atómico	40
Peso Atómico	91,224 amu
Familia	Metales de Transición
Números de Oxidación	+ 4
Niveles de Energía	5
Densidad	6,51 g/cc (300K)
Estado Estándar	Sólido (298 K)
Color	Bianco Plateado

Estructura cristalina

Space group: P63/mmc (space group number: 194)

Estructura: HPC (Hexagonal Close – Packed)

Tabla.2 Parámetros de celda del circonio.

a[nm]	b[nm]	C[nm]	α °	β °	γ °
0,323	0,323	0,514	90.00	90.00	120.00

Propiedades físicas

- Densidad del sólido (kg/m^3) = 6511
- Volumen molar (cm^3) = 14.02
- Velocidad del sonido (m/s) = 3800

Propiedades elásticas

- Modulo de Youngs (GPa) = 68
- Modulo de Rigidity (GPa) = 33

Propiedades eléctricas

- Resistividad eléctrica (10^{-8} Wm) = 42

Propiedades térmicas

Punto de Fusión (K) = 2128

Punto de Ebullición (K) = 4682

Temperatura de superconducción (K) = 0.61

Conductividad térmica (W/m*K) = 23

Coefficiente lineal de expansión térmica ($\text{K}^{-1} \cdot 10^6$) = 5.7

Entalpía de fusión (Kj/mol) = 21

Entalpía de vaporización (Kj/mol) = 580

Entalpía de atomización (Kj/mol) = 605

Tabla. 3 *Propiedades termodinámicas del circonio*

Estado	$\Delta_f H^\circ$ kJ mol ⁻¹	$\Delta_f G^\circ$ kJ mol ⁻¹	S ^o J K ⁻¹ mol ⁻¹	C _p H J K ⁻¹ mol ⁻¹	H ^o _{298.15} H ^o ₀ kJ mol ⁻¹
Sólido	0	0	39.0	25.4	5.53
Gaseoso	609	567	181.3	26.7	6.82

Aplicaciones

El circonio se usa en la fabricación de acero, porcelana, ciertas aleaciones no ferrosas y material refractario. Se utiliza también en tubos de vacío para extraer los restos de gases porque se combina fácilmente el oxígeno, el hidrógeno y el nitrógeno a altas temperaturas. El circonio se usa en intercambiadores de calor, carcasas de bombas, válvulas y otros equipos sujetos a la corrosión de los ácidos. Ciertas aleaciones especiales del metal, llamadas Zircalloy-2 y zircalloy-4, que contienen un 1,5% de estaño, se usan en los reactores nucleares como material de revestimiento para los elementos de uranio combustible, y como material estructural.

El circonio es especialmente aconsejable en los reactores nucleares, debido a su baja sección eficaz de absorción de neutrones, su excelente resistencia a la corrosión a temperaturas moderadamente altas, su resistencia mecánica, su ductibilidad y su facilidad de fabricación [4].

Este es un resumen acerca de las principales características, propiedades y aplicaciones del circonio, elemento fundamental del fosfato de circonio, a continuación se describe el Fosfato de circonio, teniendo en cuenta, su composición estructural, su estructura cristalina, sus fases, sus características, sus aplicaciones y sus propiedades físicas y químicas.

1.2.2 Descripción de la molécula de fosfato de circonio

En los años 60's el fosfato de circonio fue conocido como un Ion intercambiador inorgánico, dado que en estado sólido era empleado como electrolito para uso en celdas combustibles. En 1964 Abraham Clearfield propuso dos métodos para su obtención, uno de los métodos de preparación de fosfato de circonio propuesto consiste en tomar $12 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}$ de solución de ácido fosfórico adjunto a un proceso de Reflujo medio y dejar en reflujo por 100h [3].

El fosfato de circonio tiene distintas estructuras cristalográficas o fases cristalinas que varían en su arreglo cristalino por la cantidad de moléculas de aguas presentes, por su proceso de obtención o formación. Su formula molecular general es $\text{Zr}(\text{HPO}_4)_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$, donde n puede ser 1, 2, 7 y 8 dependiendo de su proceso de síntesis o en algunos casos los cambios estructurales se pueden presentar por calentamiento de una de las fases o por procesos de reflujo aplicado a las mismas adicionando moles de H_3PO_4 en su síntesis [5,6,7].

A continuación se presenta una tabla con las diferentes fases cristalográficas del fosfato de circonio con su respectiva formula molecular. Estos datos son reportados en la tabla 4.

Tabla 4. Fases cristalográficas del fosfato de circonio.

NOMBRE DE LA FASE	Formula molecular
α – ZrP	$Zr(HPO_4)_2 \cdot H_2O$
β – ZrP	$Zr(HPO_4)_2$
γ – ZrP	$Zr(HPO_4)_2 \cdot 2H_2O$
δ - ZrP	$Zr(HPO_4)_2 \cdot 1/2H_2O$
θ – ZrP	$Zr(HPO_4)_2 \cdot 8H_2O$

En la anterior tabla, tal como se puede observar el número de moléculas de agua varía dentro de la estructura molecular en cada una de ellas.

La composición cristalina del $Zr(HPO_4)_2 \cdot nH_2O$ es estrictamente estequiométrica y presenta una estructura laminar^[5,6,7].

Una descripción estructural de la molécula se presenta a continuación:

Las capas de fosfato de circonio constan de átomos de circonio localizados en el mismo plano y unidos unos a otros con grupos fosfato por encima y debajo del plano compuesto de átomos de circonio. Tres átomos de oxígeno de cada fosfato están unidos a tres diferentes átomos de circonio dispuestos en ápices cerca de un triángulo equilátero. En la figura 2 se ilustra un diagrama de la molécula de fosfato de circonio, en la cual los átomos de circonio están representados por el color morado, los de fósforo por el color verde, los de oxígeno por el color blanco y los de hidrógeno por el color rojo. Las moléculas de agua se encuentran ubicadas en la zona interlaminar del compuesto tal y como se puede apreciar en la figura 2.

En esta se pueden observar claramente la estructura laminar del fosfato de circonio. También a continuación se hace una descripción más exacta del tipo de enlaces y de estructura.

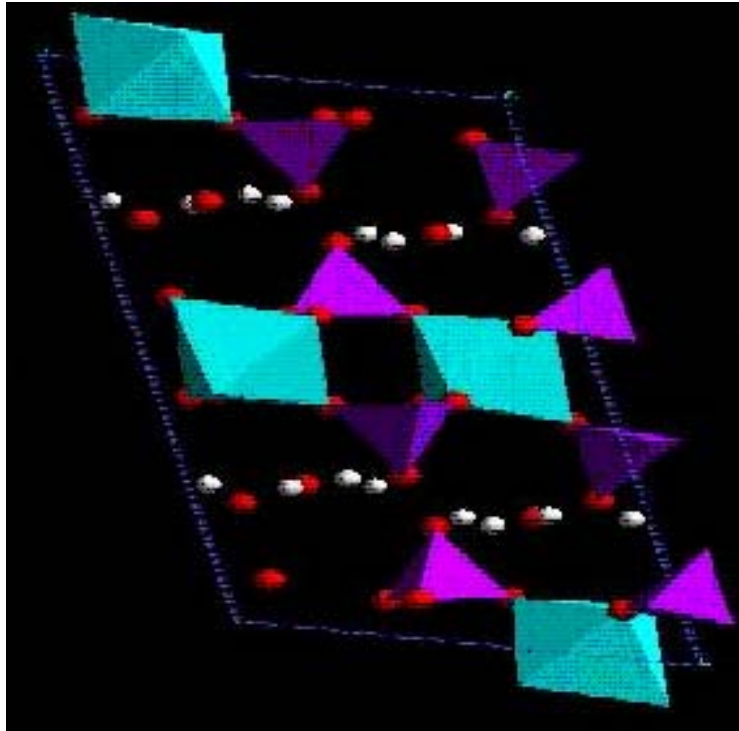


Figura 2. *Esquema de la estructura de fosfato de circonio*

Las láminas están conformadas por capas del metal coordinado octaédricamente entre dos capas de fosfato tetraédrico. Cada uno de los tres oxígenos del grupo fosfato se coordina a un metal distinto y el cuarto oxígeno apunta hacia la región interlaminar, este oxígeno es el que forma la molécula de agua situada en la región interlaminar de la estructura cristalina. Cada lámina puede ser considerada como una macromolécula planar en la cual grupos ácidos P-OH están presentes. Estos grupos están dispuestos en la superficie de las laminas en vértices alternados de una estructura hexagonal con una distancia de $5,3 \text{ \AA}$ entre ellos. El número de grupos ácidos P-OH en cada lado $1,47 \cdot 10^{14} / \text{cm}^2$ y el área libre asociada a cada grupo es de 24 \AA^2 .

La molécula de agua interacciona con estos grupos POH, pero las laminas no forman entre si enlaces de hidrogeno, sino que están unidos únicamente por fuerzas de van der Waals^[7,8].

1.2.3 Información cristalográfica

El proceso de caracterización estructural se lleva a cabo usando diferentes técnicas instrumentales, entre las cuales se incluyen, Difracción de Rayos X, espectroscopias de infrarrojo (IR) y espectroscopia de ultravioleta y visible (UV-Visible), Near-Infrared spectroscopy (NIR) y espectroscopia foto electrónica de rayos X (XPS). En la literatura se describe el procedimiento de empleado en la obtención de los datos cristalográficos y el procedimiento experimental de preparación. Por medio de los rayos X se analizó la celda unitaria de un cristal de fosfato circonio describiendo su estructura Hexagonal y sus dimensiones exactas se obtuvieron empleando fotografías de precisión usando la radiación de Mo y K α .; encontrando los siguientes parámetros de celda, los cuales son reportados en la tabla 5.

Tabla 5. *Parámetros de celda del α -ZrP⁷*

a₁[nm]	a₂[nm]	C[nm]	α °	β °	γ °
9,076	5,298	16,22	90.00	90.00	101,71

Las dimensiones de la celda junto con las posiciones de los átomos fueron obtenidas utilizando el equipo en configuración Braga-Brentano (2θ) y usando un difractómetro de giro automático (Enraf-NoniusCAD-4)A continuación son reportadas las posiciones de los átomos en la tabla 6.

Tabla 6. Posiciones atómicas del α -ZrP

ATOMO	X	Y	Z
Zr	0,24609	0,26251	0,48506
P ₂	0,38744	0,7508	0,38567
P ₃	-0,13422	0,242	0,39658
O ₄	0,5445	0,8037	0,4374
O ₅	0,3553	0,4862	0,4007
O ₆	0,2772	0,948	0,4065
O ₇	0,3885	0,7559	0,2843
O ₈	-0,218	0,4364	0,4404
O ₉	-0,1554	-0,0205	0,4316
H ₁₀	-0,1942	0,2493	0,2949
H ₁₁	0,032	0,307	0,4086
H ₁₂	0,0042	0,7241	0,2617
H ₁₃	0,424	0,907	0,267
H ₁₄	-0,261	0,245	0,28
H ₁₅	0,043	0,815	0,247
H ₁₆	0,027	0,701	0,33

De esta forma también es viable determinar otras propiedades de la molécula de fosfato de circonio, tales como el volumen correspondiente a la celda unitaria que es de $75,7\text{Å}^3$; con cuatro determinaciones es posible determinar el valor de la densidad como $2,76\text{ g/cm}^3$; comparada con una densidad observada, determinada cicrométricamente en ciclohexano es de $2,72 \pm 0,049\text{ g/cm}^3$. Con un grupo espacial $P2_1/n$ [10,11].

1.2.3 Aplicaciones del Fosfato de Circonio

En el mundo se han hecho estudios para la intercalación de fosfato de circonio con etanol con el objetivo de producir materiales pilareantes empleados en

muchos campos, como en procesos de absorción, separación química y catálisis. Este estudio también conduce a determinar que dicho proceso de intercalación se puede dar con otras moléculas y obtener materiales favorables para la construcción de iones conductores y membranas intercambiadores.

También es posible encontrar este material apto en recubrimiento para naves aeroespaciales por sus propiedades térmicas y como recubrimiento de materiales cerámicos. Otra de las tantas aplicaciones es su uso como un protón conductor para membranas de intercambio (PEM) en celdas de combustible ^[12,13].

Es posible encontrar la aplicación del fosfato de circonio en la formación de Epoxi Composites basados en procesos de sinterización entre estructuras laminares de fosfato de circonio dada su alta capacidad de intercambio iónico y su fácil modificación estructural, como producto de la homogeneidad de su estructura laminar; para ser empleada como refuerzo de materiales cerámicos y poliméricos ^[14].

Otra aplicación es el proceso de intercambio entre el fosfato de circonio con cationes de sodio (Na^+) y potasio (K^+) con variaciones significativas en el pH para la producción de soluciones sólidas ^[15].

1.3 DESCRIPCION DEL SOFTWARE CERIUS²

Cerius² es un paquete computacional creado por Molecular Simulation Inc. dedicado al modelaje de sistemas moleculares periódicos y no-periódicos. Está enfocado hacia las ciencias físicas previendo herramientas para el estudio de sistemas químicos y nuevos materiales, además ofrece una alta visualización, facilitando al investigador el diseño y el análisis de datos en el modelaje molecular.

El paquete incluye los siguientes módulos:

Visualizer, Cristal Builder, Amorphous Builder, Polymer Builder, Surface Builder, Open Force-Field, Force Field Editor, Minimizer, Dynamics, Compass, Discovery, los cuales a su vez están constituidos por un número determinado

de módulos y herramientas necesarias en la simulación de sistemas moleculares.

Los principales módulos empleados en el desarrollo de la investigación son:

VISUALIZER: representa la interfaz gráfica de Cerius², todo el ambiente de trabajo y las conexiones de trabajo a los programas. Este módulo permite visualizar estructuras moleculares, trayectorias animadas, espectros, dinámicas animadas, movimientos en 3D de sistemas en estudio y otras facilidades gráficas.

Cristal Builder: permite construir estructuras cristalinas orgánicas, inorgánicas y poliméricas para la simulación de sólidos, estudia la simetría del cristal, construye caras P1 a partir de las unidades asimétricas y operadores simétricos, despliega celdas unitarias o arreglos de celdas superiores a dimensiones 20x20x20, y planos cristalográficos especificados por los índices de Miller, muestra diferentes facetas del cristal a lo largo de conjuntos de planos y tiene facilidades para incluir el factor de temperatura de estabilidad del cristal.

Este a su vez contiene algunos parámetros que son importantes en la construcción de la estructura cristalina, estos son:

Add Atoms: Selección del elemento e ingreso de la posición de los átomos en la estructura correspondientes al elemento seleccionado.

Cell parameters: Entrada de valores de los parámetros de celda correspondientes a la celda unitaria de la estructura (a, b, c, alfa, gama y beta).

Build Cristal: Construcción de la estructura en tres dimensiones.

Force Field: Permite calcular los campos de fuerza y energías para moléculas y superficies (aplicable a sistemas con condiciones de contorno 2D-periódicas) o sistemas en "bulk" (aplicable a sistemas con condiciones de contorno 3D-periódico) a través de cálculos de mecánica molecular, además predice morfología de sistemas y optimiza los campos de fuerza.

Minimization: Minimiza la energía de las estructuras periódicas usando cálculos de mecánica molecular.

Dynamics: Realiza simulaciones dependientes del tiempo que calculan las fuerzas y el movimiento de los átomos en respuesta a esas fuerzas, resolviendo las ecuaciones clásicas de movimiento para sistemas de N partículas, lo que permite el estudio de sistemas dependientes de tiempo a temperaturas diferentes a cero, como moléculas biológicas, polímeros, materiales catalíticos en una variedad de estado (gaseoso, acuoso y cristales). También estudia el espacio conformacional y encuentra el estado conformacional más estable para moléculas altamente flexibles o desarrolla las regiones más flexibles de macromoléculas. Produce conjuntos de estructuras en 3D consistentes con la geometría (longitudes de enlace, ángulos y ángulos de torsión) deducida a partir de espectros RMN experimentales. Calcula energías de enlace, incluyendo efectos de solvatación y entrópicos.

Analysis: Es utilizado en el análisis de trayectorias generadas por simulación, análisis estadístico de propiedades, cálculos de constantes de difusión, función de auto correlación dipolo dipolo y análisis de fluctuaciones ^[16].

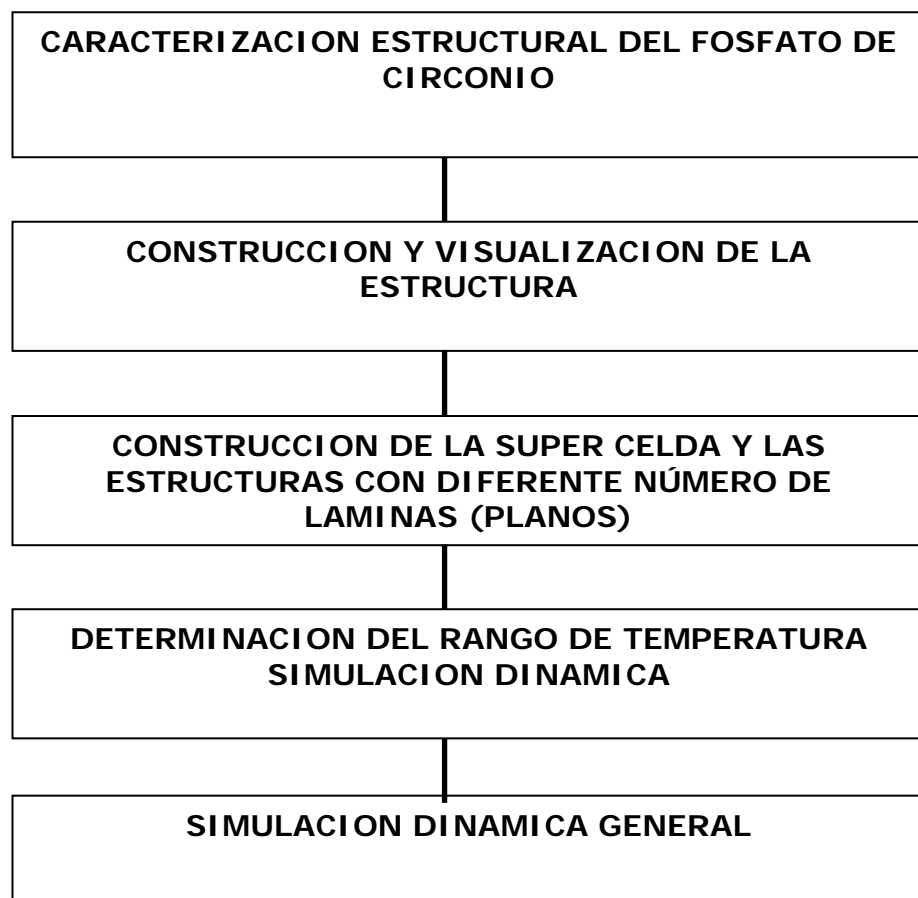
2. METODOLOGIA

En este capítulo se describirán detalladamente las fases metodológicas implementadas para el desarrollo de este trabajo de investigación.

Inicialmente se contó con una investigación de tipo bibliográfica para la identificación y caracterización estructural del fosfato de circonio, información requerida en el posterior desarrollo de la simulación dinámica que conducirá a la determinación de las propiedades termodinámicas y estabilidad de la estructura.

2.1 ETAPAS METODOLOGICAS

Figura 3. *Mapa conceptual de la investigación*



2.1.1 Caracterización Estructural del Fosfato de circonio α -ZrP.

La caracterización de la estructura se realizó por medio de una búsqueda bibliográfica exhaustiva, obteniendo información a nivel estructural importante, necesaria para la determinación de las propiedades termodinámicas, por medio del uso del paquete computación Cerius² a través de una simulación dinámica a nivel molecular; dichos datos corresponden a estudios anteriormente realizados por el Químico Abraham Clearfield^(6,7) y otros investigadores que desde los años 60's se interesaron por trabajar en la determinación cristalográfica y estructural de algunos compuestos laminares, entre los cuales se encuentra el objeto de esta investigación, el fosfato de circonio.

La información encontrada acerca del fosfato de circonio corresponde a propiedades fisicoquímicas, térmicas y mecánicas además de la caracterización estructural cuyos contenidos principales son las posiciones atómicas, grupos espaciales, parámetros de celda e información adicional, acerca de las diferentes fases estructurales correspondientes al fosfato de circonio.

Es de destacar entre la información encontrada, que el fosfato de circonio es un compuesto laminar, que presenta diferentes estructuras cristalográficas, que varían por la cantidad de moléculas de agua presentes en la zona interlamina del compuesto. Esto se debe al proceso de síntesis u obtención del compuesto, o en algunos casos, las variaciones corresponden a procesos de calentamiento o de reflujo de algunas de las fases; por esta razón fue necesario determinar cual de las fases cristalográficas del fosfato de circonio sería el objeto de nuestro estudio.

La determinación de la fase cristalográfica de interés se dio por consideraciones especiales en la estabilidad estructural de cada una de las fases, ya que la cantidad de moléculas de agua influye de manera importante en la conformación de la estructura, pues estas no están unidas por enlaces con los grupos fosfato, sino que están unidas únicamente por fuerzas de Van der Waals; razón por la cual las moléculas de agua pueden ser fácilmente removidas de la estructura durante un proceso de calentamiento, por dicho

motivo se seleccionó la fase alfa(α) que contiene tan solo una molécula de agua en su zona interlamina lo cual hace que la estructura presente mayor estabilidad y un menor margen de probabilidad que la molécula de agua sea removida la estructura cristalina.

Una vez establecida la fase cristalográfica; su composición, caracterización estructural, aplicaciones, síntesis y propiedades fueron descritas con profundidad, tal y como se hizo en el capítulo anterior.

2.1.2 Construcción y Visualización de la Estructura α -ZrP.

Cuando ya se contaba con la descripción cristalográfica del fosfato de circonio ($\text{Zr}(\text{H}_3\text{PO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$), para la construcción de las moléculas se empleó el software Cerius² el cual es considerado como un paquete dedicado al modelaje de sistemas moleculares periódicos y no-periódicos que ofrece una alta calidad en modelaje y visualización.

La creación se realizó empleando una herramienta contenida dentro del software llamada Cristal Builder la cual es utilizada en la simulación de sólidos, permitiendo la construcción de estructuras cristalinas, periódicas en 3D. Los datos de entrada necesarios para que se produjera dicha visualización fueron:

- Posiciones atómicas dentro de la estructura cristalina
- Parámetros de celda
- Grupo espacial

Una vez son ingresados los datos al software, se produce la visualización teniendo en cuenta la simetría del cristal y los enlaces entre los átomos, dicha visualización se puede apreciar en la figura 4.

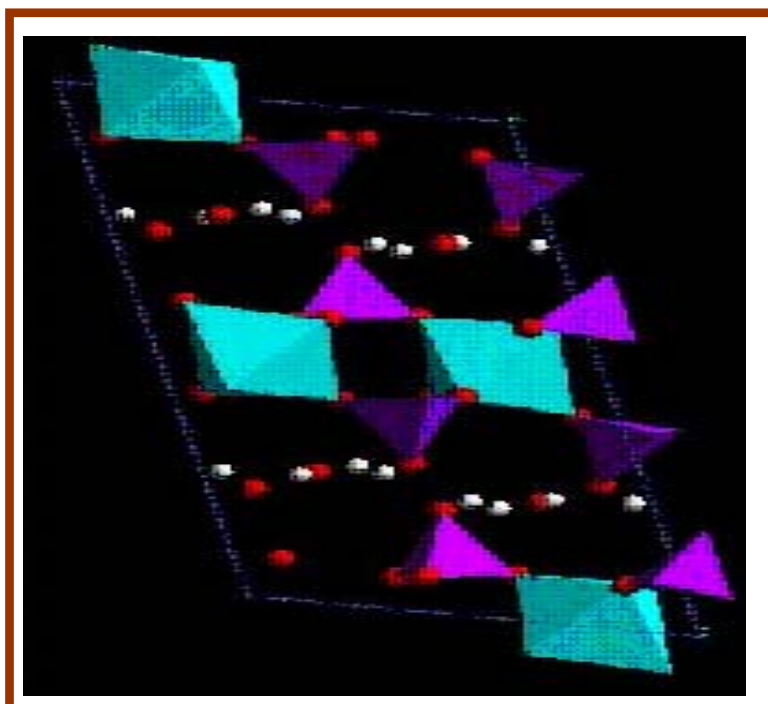


Figura 4. Estructura del α -ZrP (bifosfato de circonio monohidratado) $Zr(HPO_4)_2 \cdot H_2O$. (Visualización en 3D del fosfato de circonio. Modelo estructural obtenido del paquete computacional CERIOUS2 – CRYSTAL BUILDER).

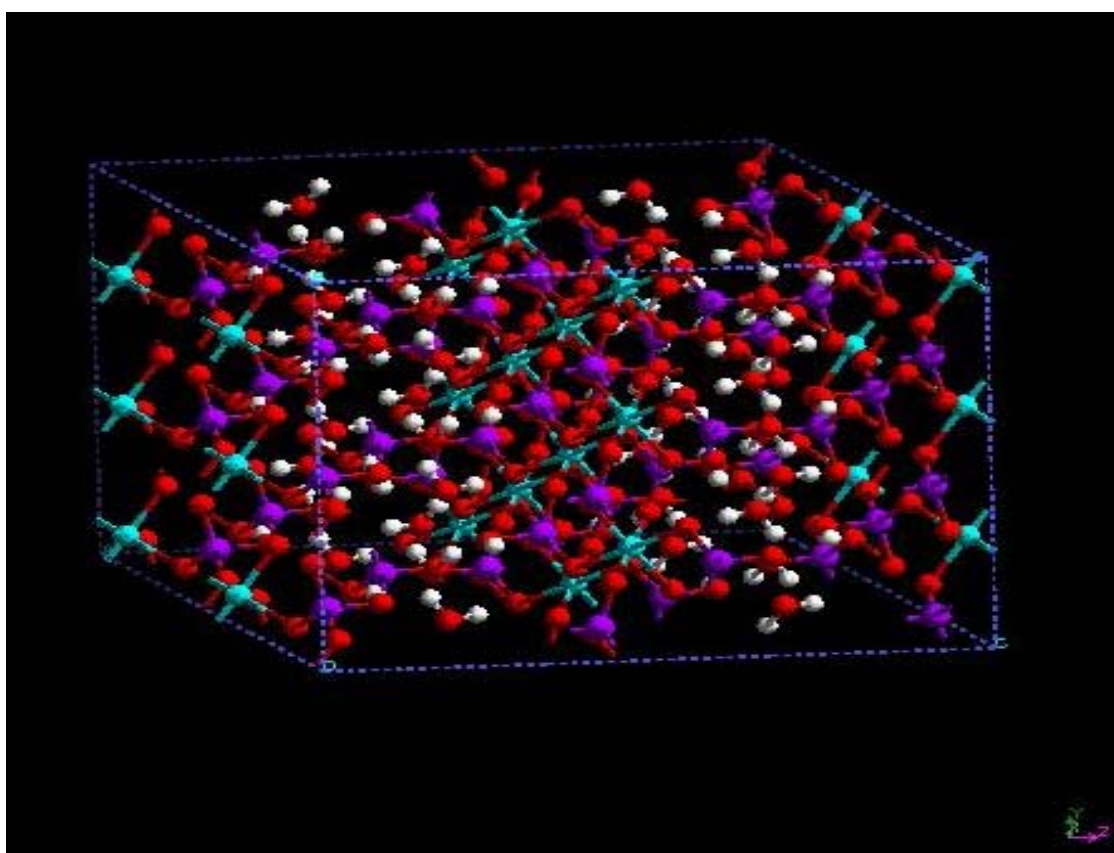
En la figura 4 se puede observar que las partículas rojas corresponden a los átomos de oxígeno, las blancas a átomos de hidrógeno, las moradas a átomos de fósforo y las verdes a átomos de Zirconio. Esta es una visualización del plano frontal de la celda unitaria, con el objetivo de ver los planos conformados por los grupos fosfato y el circonio y la posición interlaminar de las moléculas de agua dentro de la estructura del α - fosfato de circonio.

2.1.3 Construcción de la supercelda

En la etapa anterior construimos y visualizamos una celda unitaria del fosfato de circonio, a continuación se produce la construcción y visualización de una supercelda de fosfato de circonio, por medio de una herramienta que se encuentra en Cristal Builder llamada Visualization. Inicialmente es necesario llamar dentro del software al archivo donde se construyó la molécula y posteriormente ingresar a la herramienta de Visualization contenida dentro de

Cristal Builder, al desplegarse ésta, el programa ofrece la posibilidad de reproducir la molécula en los tres sentidos del plano (X, Y, Z), dado que es una estructura periódica, introduciendo un rango de visualización en los tres ejes; en este caso se empleó un rango de $2*3*1$, obteniendo a continuación una supercelda que contiene 384 átomos, la cual se muestra en la figura 5.

Es conveniente aclarar que esta visualización a simple vista corresponde a una sola celda pero realmente la estructura esta repetida infinitamente en todas las direcciones del plano, por su condición periódica.



*Figura 5. Súper celda de α -ZrP ($2*3*1$)*

Visualización en 3D de la supercelda del fosfato de circonio. Modelo estructural obtenido del paquete computacional CERIU2 – CRYSTAL BUILDER.

Esta visualización permite observar la figura en sus tres dimensiones, la organización de los átomos dentro de la estructura, la conformación de algunas

láminas, y los enlaces entre los grupos fosfato con los átomos de zirconio. Los átomos de circonio están representados por las partículas de color verde, los átomos de fósforo por las partículas de color morado, los átomos de hidrogeno por el color blanco y los átomos de oxigeno por el color rojo igual que en la figura 4 correspondiente a la visualización de la celda unitaria de fosfato de circonio.

Las superceldas son estructuras más estables, puesto que el número de moléculas de fosfato de circonio contenidas están en continua interacción y la estructura cristalina presenta una mayor atracción entre los átomos; de ahí la importancia de su construcción en el estudio de la estabilidad de compuestos laminares.

Las estructuras de fosfato de circonio con diferentes número de planos laminares se construyeron empleando la herramienta CRYSTAL BUILDER, y se modificó el parámetro de celda C para cada estructura dependiendo del número de planos deseados, ya que el fosfato característico tiene 2 planos y al aumentar su valor es posible que la visualización y tamaño de la celda también aumenten.

En la siguiente tabla se establece el cambio del parámetro de celda C para cada una de las diferentes estructuras:

Tabla 7. *Parámetros de celda C de diferentes planos.*

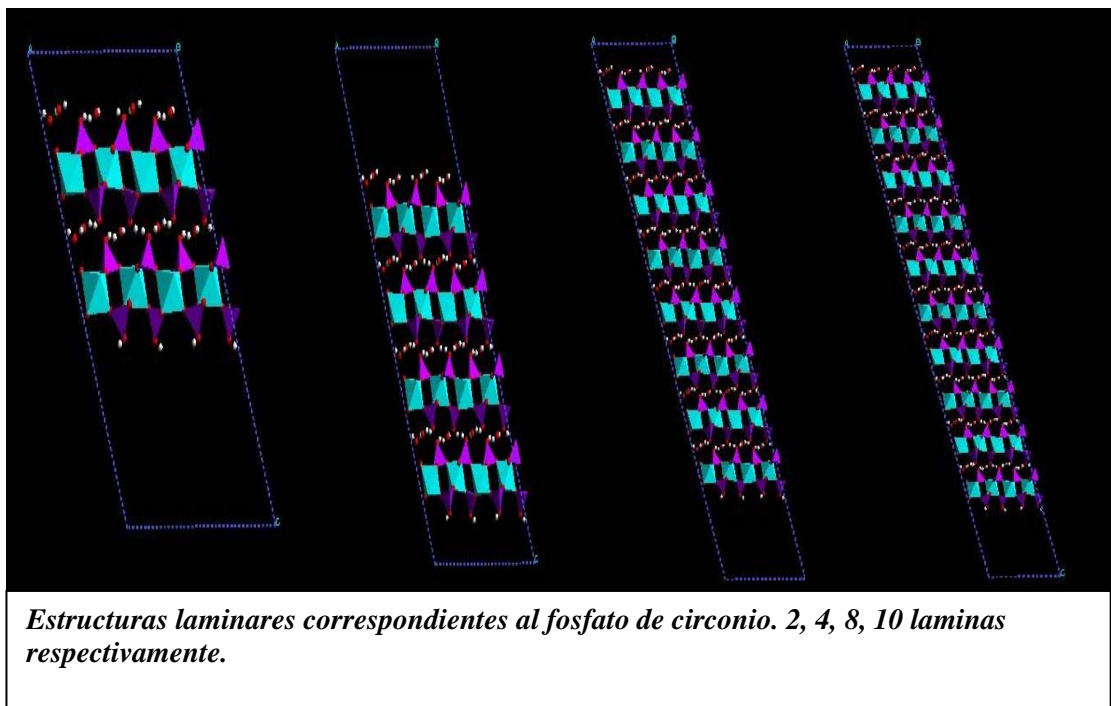
Numero de planos	Parámetros de celda
1 plano	$[a]_{\text{Bulk}}, [b]_{\text{Bulk}}, ([c]_{\text{Bulk}})/2+30$
2 planos	$[a]_{\text{Bulk}}, [b]_{\text{Bulk}}, ([c]_{\text{Bulk}})+30$
4 planos	$[a]_{\text{Bulk}}, [b]_{\text{Bulk}}, 2*([c]_{\text{Bulk}})+30$
6 planos	$[a]_{\text{Bulk}}, [b]_{\text{Bulk}}, 3*([c]_{\text{Bulk}})+30$
8 planos	$[a]_{\text{Bulk}}, [b]_{\text{Bulk}}, 4*([c]_{\text{Bulk}})+30$
10 planos	$[a]_{\text{Bulk}}, [b]_{\text{Bulk}}, 5*([c]_{\text{Bulk}})+30$

Bulk: supercelda

Los valores de las constantes se remplazan por los valores correspondientes a la supercelda a cada temperatura, esto es para la rutina de simulación y de esta forma preservar el volumen de la estructura constante.

De esta forma se obtienen las siguientes estructuras para cada grupo de planos, lo cual se muestra en la siguiente figura.

Figura 6. *Estructuras laminares con diferente número de planos*



2.1.4 Simulación dinámica inicial para la determinación del rango de temperatura de simulación.

Teniendo en cuenta la celda unitaria del fosfato de circonio y su respectiva supercelda, se dio inicio a la determinación de las características de nuestra simulación, propiedades como temperatura, presión, volumen son necesarias para la simulación y para el estudio de nuestro compuesto.

El rango de temperatura se determinó teniendo en cuenta las propiedades térmicas, que le confiere el circonio a la estructura, ya que al ser considerado el circonio como un elemento metálico resistente a altas temperaturas este

trasmite al fosfato de circonio propiedades térmicas especiales que resultan de gran interés en el estudio de materiales cerámicos, teniendo en cuenta también las aplicaciones del fosfato de circonio; se establece un rango de temperatura inicial entre 50 y 2000K. Este rango se le aplicó a la estructura cristalina correspondiente a la celda unitaria y a la supercelda, realizando simulaciones simultaneas, con un tiempo de 12 horas y 48 horas de simulación respectivamente.

La herramienta DINAMYS SIMULATION presenta un conjunto de características necesarias para la implementación de la simulación molecular que son resumidas en la Tabla 8.

Tabla 8. *Características de la simulación molecular herramienta DINAMIYS SIMULATION.*

CARACTERISTICAS	
Force-Field	UNIVERSAL1.02
Dynamics Method	Constant NPT
Dynamics-canonical thermostat	HOOVER
Pressure	0,0001
Number steps	300000
Rango de Temperatura	50-2000 K

Con esta corrida inicial se presentaron deformaciones en la estructura molecular y cambios en la fase del fosfato de circonio, teniendo en cuenta los datos obtenidos por la simulación fue posible determinar un rango de temperatura que correspondiera a la fase alfa (α) del fosfato de circonio, sin que se produjeran cambios aberrantes en la estructura.

2.1.5 SIMULACION DINAMICA GENERAL

El nuevo rango de temperatura impuesto fue entre 100-900K, rango en el cual la estructura conserva todos sus átomos, incluyendo las moléculas de aguas contenidas en los espacios interlaminares y conservando la estructura laminar característica del fosfato de circonio.

Esta no era la única característica requerida por el simulador Cerius² para el desarrollo de la simulación molecular del fosfato de circonio, también era necesario determinar las condiciones de presión, el tipo de Force Field a emplear, el método y el termostato empleado para el control de temperatura.

Estas características fueron elegidas con la ayuda y orientación de personas con experiencia en el tema y basado en resultados reportados en la bibliografía.

Tabla 9. *Parámetros característicos de la simulación*

CARACTERISTICAS	
Force-Field	UNIVERSAL1.02
Dynamics Method	Constant NPT
Dynamics-canonical thermostat	HOOVER
Pressure	0,0001
Number steps	300000
Rango de Temperatura	200-900 K

En la tabla 9 se resumen los parámetros que se emplearon en la simulación, después de haber indagado y probado diferentes características, hasta obtener este conjunto.

La determinación de las propiedades requiere de la creación de una rutina o archivo guía, que facilita y reduce trabajo, ya que es posible crear todas las rutinas para cada una de las estructuras moleculares de interés.

La rutina o archivo guía contiene unos parámetros específicos a desarrollar:

1. Llamar el archivo que contiene la estructura cristalina y modificar los parámetros de celda en el caso de las estructuras con mayor número de planos.
2. Minimizar la energía del sistema molecular
3. Determinar la cargas eléctricas de todos los átomos de la estructura
4. identificar la estructura como un SUPERLATTICE, o sea como un conjunto de átomos que tienen enlaces y que interaccionan como un todo.
5. Introducir el parámetro de FORCE-FIELD correspondiente al sistema molecular y por ser un compuesto laminar e inorgánico, es recomendable emplear el parámetro UNIVERSAL1.02.
6. Minimizar la energía del sistema con un número de iteraciones dependiente del número de átomos del sistema, para un mayor número de átomos es necesario un número mayor de iteraciones de energía.
7. Introducir el parámetro de METHOD, NVT para las estructuras donde varía el número de planos y NPT para la supercelda de fosfato de circonio.
8. Introducir el parámetro CANONICAL_THERMOSTAT, para efectos de esta investigación es más recomendable el uso del HOOVER.
9. Introducir el valor de temperatura inicial correspondiente al rango de experimentación.
10. Introducir el tiempo de simulación, en este trabajo se emplean 30000 pasos correspondientes a 3ns.
11. Crear un archivo que guarde la trayectoria de simulación.
12. Iniciar la simulación
13. Crear un archivo que guarde la configuración cristalina final.
14. abrir el modulo "analysis" y ingresar a los archivos que contienen la trayectoria de cada estructura y para cada temperatura y analizar propiedades como, energía potencial, energía total, densidad, volumen, presión y parámetros de celda.

Estos son las etapas concernientes a dicha simulación, este archivo guía se elabora para cada una de las moléculas, conservando el mismo orden y efectuando las modificaciones necesarias en cuanto a valores de temperatura, parámetros de celda y nombre de los archivos. En los anexos se dará un ejemplo de alguno de los archivos diseñados y empleados en el desarrollo de este trabajo de investigación.

3. RESULTADOS Y ANALISIS

3.1 RESULTADOS OBTENIDOS DE LA SIMULACION MOLECULAR

En este capitulo se consignan y se discuten los resultados obtenidos de la simulación molecular a través de representaciones graficas. Mostrando el efecto de las diferentes estructuras laminares correspondientes al fosfato de circonio. Estudiando las propiedades termodinámicas y la estabilidad de la molécula.

La tabla 10 muestra los resultados obtenidos, después de analizar los datos de la simulación dinámica molecular para la supercelda de α -ZrP con el software Cerius² en el rango de temperatura establecido.

Tabla 10. *Parámetros de celda de la supercelda de Fosfato de Circonio.*

Temperatura	a(A°)	b(A°)	c(A°)	Alfa	Beta	Gama
200	18,11512	15,71015	13,36246	90,36372	106,0755	89,82009
300	18,11265	15,71162	13,3645	90,33954	106,0926	89,83253
400	18,11001	15,7138	13,3659	90,32077	106,1018	89,84583
500	18,10939	15,71482	13,3677	90,28129	106,1176	89,86645
600	18,10741	15,71832	13,36967	89,94109	106,1276	90,02895
700	18,10715	15,72743	13,37317	89,91644	106,113	90,03963
800	18,10527	15,73695	13,37579	89,98512	106,0905	90,00839
900	18,10272	15,74287	13,3771	89,97069	106,0811	90,01226

La anterior tabla muestra los resultados obtenidos para la supercelda de α -ZrP en cuanto a parámetros de celda respecto a un intervalo de temperatura. La supercelda contiene 384 átomos, los cuales interacciones entre sí, pero al emplear como método de simulación “constant NPT” lo que se hace es que se mantiene constante la presión de la supercelda.

Tabla 11. Número de átomos de los diferentes modelos del fosfato de circonio construidos en Cerius².

Estructura	Supercelda	1 Plano	2 Planos	4 Planos	6 Planos	8 Planos	10 Planos
# átomos	384	60	128	256	368	512	640

Tabla 12. Parámetro de celda $C(A^\circ)$ para los modelos estructurales laminares con diferente número de planos laminares de α -ZrP.

Temperatura	Supercelda	1 Plano	2 Planos	4 Planos	6 Planos	8 Planos	10 Planos
200	13,36246	36,68123	43,36246	56,72492	70,08738	83,44984	96,8123
300	13,3645	36,68225	43,3645	56,729	70,0935	83,458	96,8225
400	13,3659	36,68295	43,3659	56,7318	70,0977	83,4636	96,8295
500	13,3677	36,68385	43,3677	56,7354	70,1031	83,4708	96,8385
600	13,36967	36,684835	43,36967	56,73934	70,10901	83,47868	96,84835
700	13,37317	36,686585	43,37317	56,74634	70,11951	83,49268	96,86585
800	13,37579	36,687895	43,37579	56,75158	70,12737	83,50316	96,87895
900	13,3771	36,68855	43,3771	56,7542	70,1313	83,5084	96,8855

Los datos reportados en la tabla 12 corresponden a los parámetros “c” de la celda unitaria de cada modelo en cada intervalo de temperatura, necesarios en el archivo guía, para la modificación del volumen de la celda ya que se considera importante y necesario cambiar el parámetro de simulación que indica el método, en este caso o para efectos del estudio de los modelos moleculares con diferente número de planos se emplea el método “Constant NVT” manteniendo constante el volumen de la celda.

En los anexos se adjuntarán algunas tablas y gráficas correspondientes a los resultados obtenidos para cada uno de los modelos estructurales, para no hacer el texto más extenso. En la siguiente tabla se muestran los valores

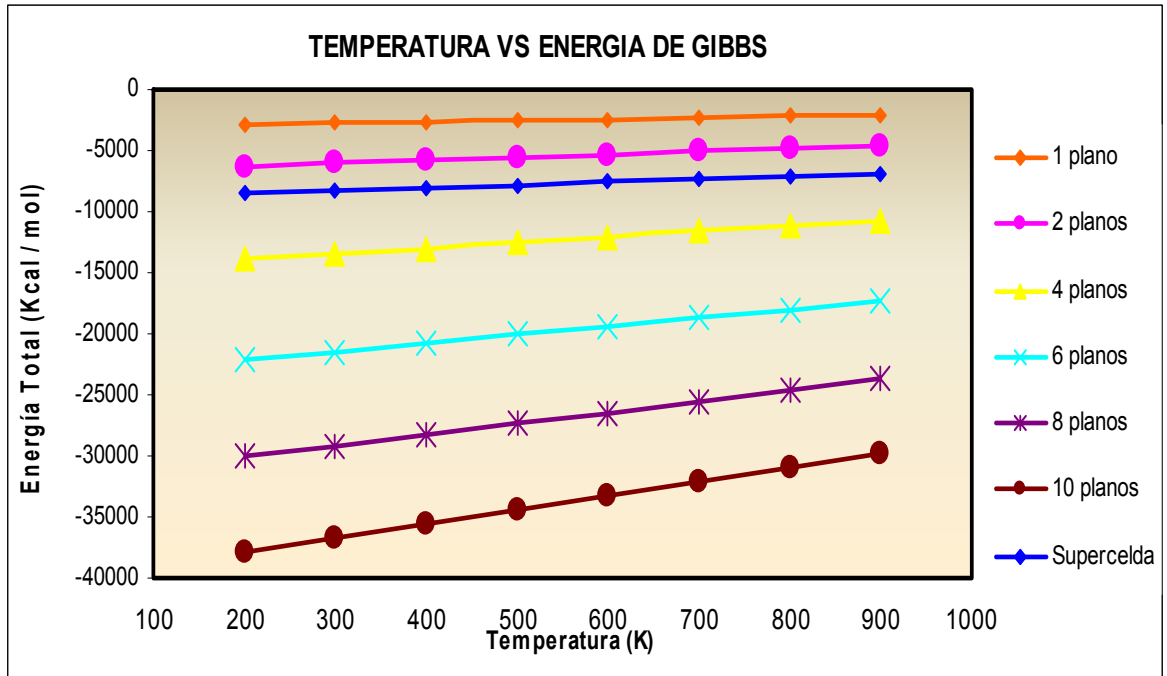
correspondientes a la energía total requerida por el sistema para su interacción, resultados que posteriormente serán analizados y representados gráficamente para estudiar la estabilidad de los diferentes modelos moleculares de α -ZrP.

Tabla 13. *Energía total (kcal/mol) de los diferentes modelos moleculares laminares correspondientes al α -ZrP.*

ESTRUCTURA	E.T (kcal/mol) (200K)	E.T (kcal/mol) (300K)	E.T (kcal/mol) (400K)	E.T (kcal/mol) (500K)	E.T (kcal/mol) (600K)	E.T (kcal/mol) (700K)	E.T (kcal/mol) (800K)	E.T (kcal/mol) (900K)
Supercelda	-8489,656	-8259,829	-8029,366	-7795,431	-7557,715	-7308,633	-7068,091	-6832,913
1 Plano	-2897,685	-2782,41	-2659,025	-2528,973	-2420,351	-2272,54	-2183,872	-2060,535
2 Planos	-6257,214	-6035,703	-5804,69	-5571,144	-5335,121	-5090,591	-4851,038	-4609,768
4 Planos	-13898,22	-13468,86	-13008,42	-12544,28	-12085,12	-11603,29	-11128,8	-10711,75
6 Planos	-22125,25	-21447,82	-20751,71	-20054,97	-19352,69	-18636,78	-18020,8	-17332,45
8 Planos	-30039,43	-29167,38	-28301,59	-27384,29	-26459,6	-25502,54	-24557,27	-23610,55
10 Planos	-37857,87	-36747,8	-35588,02	-34495,36	-33350,63	-32175,66	-30978,22	-29767,35

Esta tabla contiene la información obtenida después de la simulación molecular de cada uno de los diferentes sistemas estructurales del fosfato de circonio propuestos para el análisis, en esta se especifica el valor correspondiente a la energía total del sistema, representada dentro del software Cerius² por el valor de la energía libre de Gibbs. Es conveniente a continuación hacer una representación grafica que nos permita observar el comportamiento de la energía de cada sistema, con respecto al rango de temperatura establecido para la simulación y con respecto a las demás estructuras.

Grafica 1. Representación grafica de la energía libre de Gibbs correspondiente a cada sistema estructural del α -ZrP.



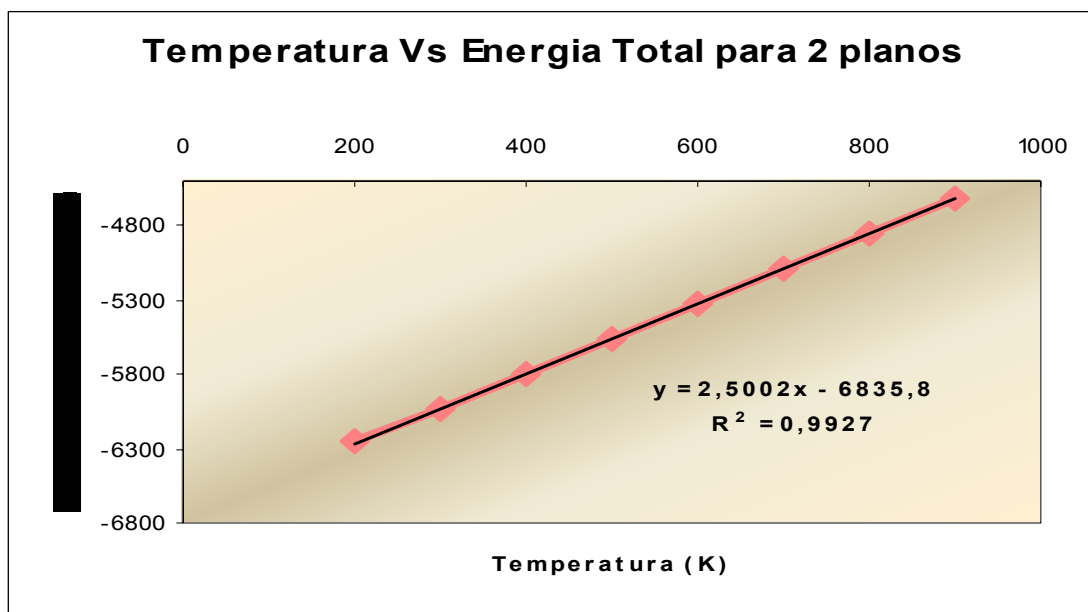
Estos datos de energía forman parte del conjunto de propiedades que han sido analizadas para cada sistema con la herramienta “analysis” contenida en el paquete computacional “cerius²”. Así que se presentaran los resultados de todas las propiedades para una de los sistemas estructurales y los otros serán presentados en los anexos.

En la tabla 14 se reportan las propiedades correspondientes al sistema estructural de 2 planos.

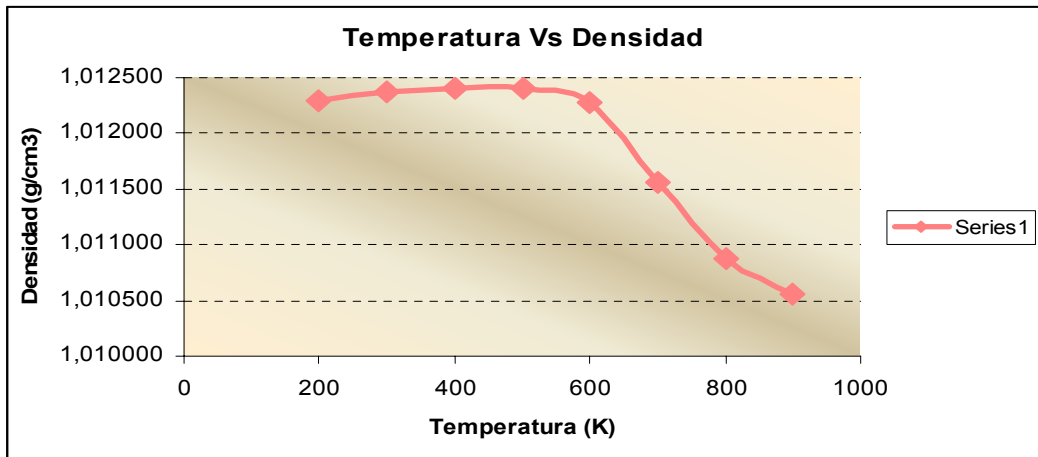
Tabla 14. Propiedades del sistema molecular de 2 planos de α -ZrP.

Temperatura (K)	Energía Total (Kcal/mol)	Energía Potencial (kcal/mol)	Densidad (g/cm ³)	Volumen (nm ³)	a (nm)	b (nm)	c (nm)	Alfa	Beta	Gama
200	-6257,214	-6481,367	1,012300	11857,7800	18,115120	15,710150	43,362460	90,363720	106,075500	89,81567
300	-6035,703	-6372,579	1,012380	11856,8400	18,112350	15,711620	43,364500	90,339540	106,092600	89,82009
400	-5804,690	-6253,874	1,012401	11856,6000	18,110010	15,713800	43,365900	90,339540	106,101800	89,83253
500	-5571,144	-6132,876	1,012403	11856,5700	18,109390	15,714820	43,367700	90,281290	106,117600	89,84583
600	-5335,121	-6008,986	1,012281	11858,0000	18,107410	15,718320	43,369670	89,941090	106,127600	89,86645
700	-5090,591	-5877,507	1,011553	11866,5300	18,107150	15,727430	43,373170	89,916440	106,113000	90,02895
800	-4851,038	-5749,352	1,010871	11874,5300	18,105270	15,736950	43,375790	89,985120	106,090500	90,03963
900	-4609,768	-5621,274	1,010554	11878,2700	18,102720	15,742870	43,377100	89,970690	106,081100	90,01226

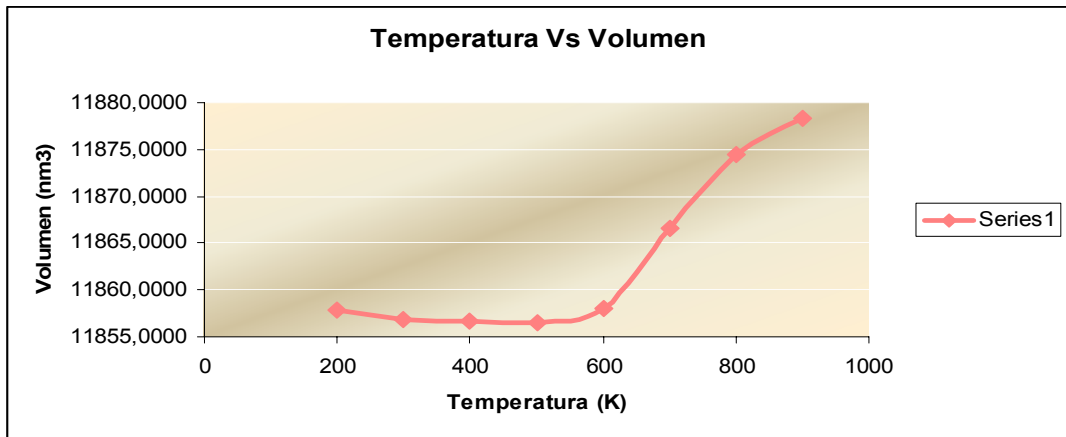
Grafica 2. Temperatura Vs Energía total



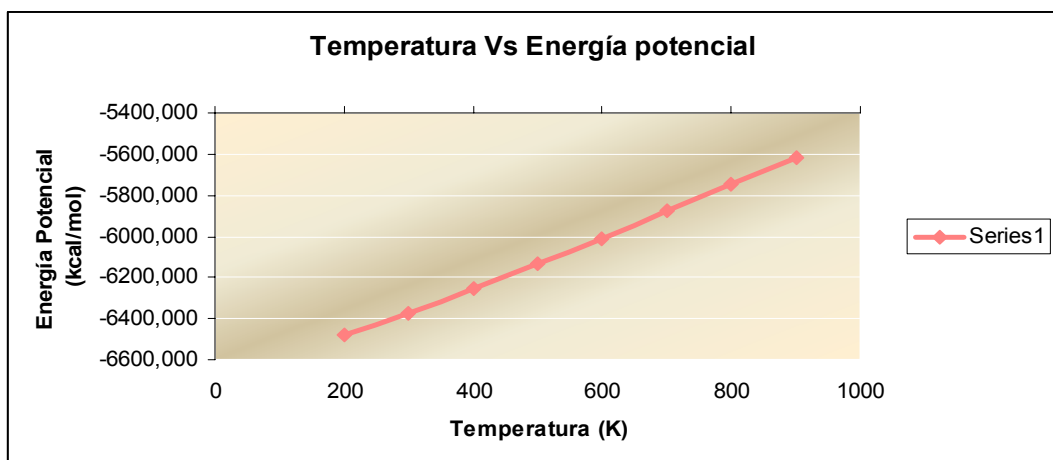
Grafica 3. Temperatura Vs Densidad



Grafica 4. Temperatura Vs Volumen



Grafica 5. Temperatura Vs Energía potencial



Estas graficas corresponden a las diferentes propiedades que son determinadas con ayuda del modulo Analysis y permite observar cual es el comportamiento de las propiedades de la estructura evaluadas en una temperatura especifica.

3.2 ANALISIS DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS A TRAVÉS DE LA SIMULACION MOLECULAR

La determinación del sistema estructural de fosfato de circonio más estable se realizó teniendo en cuenta la energía libre de Gibbs respecto a la supercelda de fosfato de circonio, ya que esta es considerada como una estructura estable debido a los múltiples enlaces existentes entre átomos y a la periodicidad de la molécula.

Ahora es necesario establecer cual es el diferencial de energía de cada sistema estructural de α -ZrP respecto a la supercelda y para ello se lleva a cabo el siguiente procedimiento:

1. Tomar el valor de la energía correspondiente a cada uno de los sistemas estructurales y dividirlos entre el número de planos moleculares que constituyen dicho sistema, y de esta forma determinar el valor de la energía de Gibbs para un solo plano. Estos valores se reportaron en la Tabla 15.

Tabla 15. *Energía de Gibbs por plano molecular*

ESTRUCTURA	E.T (kcal/mol) (200K)	E.T (kcal/mol) (300K)	E.T (kcal/mol) (400K)	E.T (kcal/mol) (500K)	E.T (kcal/mol) (600K)	E.T (kcal/mol) (700K)	E.T (kcal/mol) (800K)	E.T (kcal/mol) (900K)
Supercelda	-4244,828	-4129,915	-4014,683	-3897,716	-3778,858	-3654,317	-3534,046	-3416,457
1 Plano	-2897,685	-2782,41	-2659,025	-2528,973	-2420,351	-2272,54	-2183,872	-2060,535
2 Planos	-3128,607	-3017,852	-2902,345	-2785,572	-2667,561	-2545,296	-2425,519	-2304,884
4 Planos	-3474,555	-3367,215	-3252,105	-3136,07	-3021,28	-2900,823	-2782,2	-2677,938
6 Planos	-3687,542	-3574,637	-3458,618	-3342,495	-3225,448	-3106,13	-3003,467	-2888,742
8 Planos	-3754,929	-3645,923	-3537,699	-3423,036	-3307,45	-3187,818	-3069,659	-2951,319
10 Planos	-3785,787	-3674,78	-3558,802	-3449,536	-3335,063	-3217,566	-3097,822	-2976,735

- Tomar los valores reportados en la tabla 15 y determinar la diferencia entre el valor de la energía de Gibbs de un solo plano de los diferentes sistemas moleculares y los valores correspondientes a un solo plano de la supercelda de α -ZrP. Estos datos corresponden a la energía requerida por los diferentes planos dentro de cada sistema estructural para conservar su estabilidad, los cuales son reportados en la tabla 16.

Tabla 16. *Delta de Energía de Gibbs o Energía requerida*

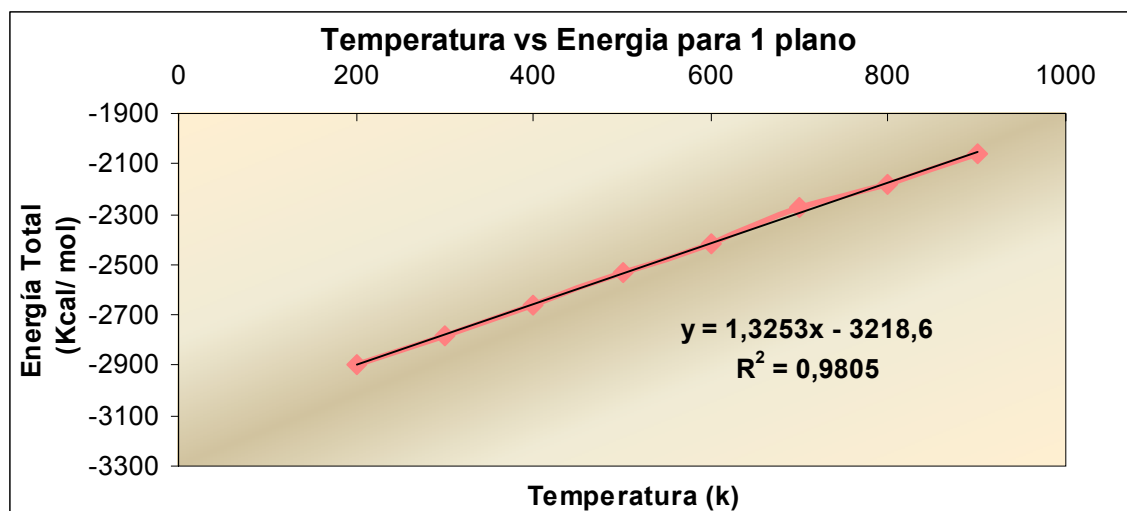
DELTA	E.T (kcal/mol) (200K)	E.T (kcal/mol) (300K)	E.T (kcal/mol) (400K)	E.T (kcal/mol) (500K)	E.T (kcal/mol) (600K)	E.T (kcal/mol) (700K)	E.T (kcal/mol) (800K)	E.T (kcal/mol) (900K)
Delta S-1	-1347,143	-1347,505	-1355,658	-1368,743	-1358,507	-1381,777	-1350,174	-1355,922
Delta S-2	-1116,22	-1112,06	-1112,34	-1112,14	-1111,3	-1109,02	-1108,53	-1111,57
Delta S-4	-770,273	-762,7	-762,578	-761,646	-757,578	-753,494	-751,846	-738,519
Delta S-6	-557,286	-555,278	-556,065	-555,22	-553,409	-548,187	-530,579	-527,715
Delta S-8	-489,899	-483,992	-476,984	-474,679	-471,408	-466,499	-464,387	-465,138
Delta S-10	-459,041	-455,135	-455,881	-448,18	-443,795	-436,751	-436,224	-439,722

Con los datos reportados en la tabla 15 se observa que la energía requerida por cada plano disminuye al incrementar el número de planos dentro del sistema.

Una vez establecido el diferencial de energía de cada uno de los sistemas estructurales respecto de la supercelda, es necesario determinar la capacidad calorífica de cada uno de los sistemas estructurales del fosfato de circonio, y de esta forma continuar con el análisis termodinámico del α -ZrP.

Para el cálculo de la capacidad calorífica de cada una de las estructuras se empleo un método grafico. Graficando Temperatura Vs Energía de Gibbs y linealizando la curva obtenida, se procede a determinar la pendiente de dicha linealización y este valor corresponderá a la capacidad calorífica de cada sistema. A continuación se presenta un ejemplo del método de determinación y las demás representaciones graficas se encuentran en los anexos.

Grafica 6. Ejemplo grafico de la determinación de la capacidad calorífica para un sistema molecular de α -ZrP de un plano.



En la grafica 3 e observa que el valor de la capacidad calorífica para este sistema es de 1,3253 Kcal/mol*T.

En la Tabla 17 se resumen todos los valores correspondientes a la capacidad calorífica de cada sistema molecular de fosfato de circonio (α -ZrP).

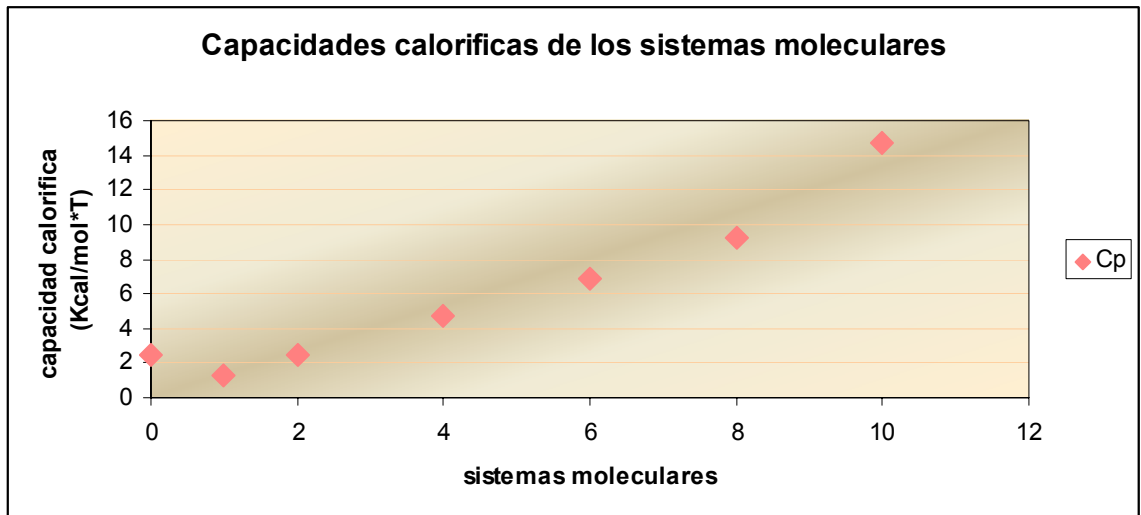
Tabla 17. Capacidades caloríficas

ESTRUCTURA	Cp
BULK	2,476
1 Plano	1,32253
2 Planos	2,5002
4 Planos	4,76
6 Planos	6,8728
8 Planos	9,2113
10 Planos	14,714

Se observa que la capacidad calorífica aumenta con la cantidad de planos, además es posible deducir que el sistema estructural con 2 planos es el que mas próximo se encuentra al valor de la supercelda. Al igual que en la grafica 1 donde el sistema de dos planos presentaba un comportamiento muy similar y cercano al de la supercelda.

Si tomamos como referencia la supercelda es posible observar mediante una grafica la proximidad que existe entre las capacidades caloríficas de sistema de dos planos y la supercelda. Esto se hace a través de la grafica.

Grafica 7. Capacidades caloríficas



Teniendo en cuenta los resultados obtenidos al calcular la capacidad calorífica de cada sistema molecular de α -ZrP y observando la grafica 3 es posible corroborar el hecho de que el sistema molecular α -ZrP de dos planos es el sistema más estable.

La estabilidad de un sistema laminar esta asociada a los cambios estructurales de sus propias laminas, es por eso que en esta investigación se construyeron diferentes modelos estructurales con diferente numero de laminas y de esta manera poder observar en cual de los modelos se presentaban menos cambios estructurales. Con las observaciones hechas y teniendo en cuenta los resultados obtenidos de la simulación, es propio afirmar que la estructura laminar con dos laminas es la que mas estabilidad presenta, si se tiene en

cuenta que es el sistema que muestra mayor aproximación a las propiedades de la supercelda en cuanto a energía y capacidad calorífica.

El análisis hecho a partir de la determinación de la capacidad calorífica para cada sistema junto con el análisis previamente hecho entre los diferentes sistemas estructurales y la supercelda, conduce a determinar que el sistema estructural de fosfato de circonio conformado por dos laminas, es el sistema que presenta mayor estabilidad frente a los demás. Presenta los requerimientos tanto energéticos, como estructurales para la aplicación como material de refuerzo en estructuras cerámicas o poliméricas.

CONCLUSIONES

- El fosfato de circonio presenta diferentes fases que varían por su composición y estructura cristalina; en algunos casos dichas variaciones se presentan debido al proceso de síntesis o en otros casos a procesos de calentamiento de algunas de las fases, donde se producen pérdidas o ganancias según sea el caso de las moléculas de agua que forman parte del arreglo cristalino; en el caso de cambios en el proceso de síntesis se producen diferentes grupos fosfato como producto del reflujo de ácido fosforoso (H_3PO_3).
- El sistema estructural de fosfato de circonio con mayor estabilidad encontrado en este estudio fue el correspondiente al arreglo cristalino con dos láminas, dado que los valores determinados de capacidad calorífica, variación de energía y energía requerida por el sistema, se aproximan a los encontrados para la supercelda. Teniendo en cuenta que la supercelda es un sistema estructural periódico, altamente estable.
- En el estudio de la estabilidad de un sistema es posible encontrar regiones de mayor estabilidad, como producto de cambios en algunas de las propiedades. Como es el caso de la densidad en este trabajo ya que se presentan cambios violentos en su valor, de ahí la importancia en la escogencia del rango de temperatura, ya que esta estructura presenta cambios de fase sensibles a procesos de calentamiento, especialmente la fase α -ZrP, la cual es objeto de este estudio.
- La simulación molecular es una herramienta que posee características especiales que la hacen útil para el estudio y desarrollo de materiales, dada la alta velocidad de procesamiento y la integración de múltiples ciencias para el desarrollo de cálculos que permiten predecir y determinar estructuras cristalinas, propiedades físicas y químicas,

propiedades termodinámicas, mecánicas y térmicas, comportamientos y fluctuaciones de los sistemas en estudio.

- Este estudio es el producto de una investigación que integra los conocimientos adquiridos en las áreas de materiales, termodinámica y programación; lo cual permite que los ingenieros actúen como seres integrales capaces de aprender, innovar y desarrollar mejoras que contribuyan al crecimiento y desarrollo de nuevos conocimientos.

BIBLIOGRAFIA

1. Sílbele B. C. Pergher. Quim.Nova Vol 22 n 5. Sao Paulo. Oct. 1999.
2. ABRAHAM CLEARFIELD. Ann.Rev. Mater.Sci.1984.14:205-29
3. Materials science
4. A. CLEARFIELD and J. STYNES. J. Inorg. Nucl. Chem. 1964. pp. 26-17
5. S. G. BOGDANOW, E. Z. VALIEV. J. Phys. Condens. Matter.
6. G. DAVID SMITH and A. CLEARFIELD. Inorg, Chem. Vol. 8. No.3, 1969
7. J. M. TROUP and A. CLEARFIELD. Inorg. Chem. Vol. 16. No.12, 1977.pp. 3311-3313.
8. A. CLEARFIELD. Inorg. Nucl. Chem. 1968, Vol.30 2249 – 2258
9. GIULIO ALBERTI, ANTONIO GRASSI. Inorg. Chem. 1999,38, 4249-4255
10. XAVIER MATHEW and V. U. NAYAR. Infrared Phys. Vol. 28, No. 3, pp. 189-194, 1988.

ANEXOS

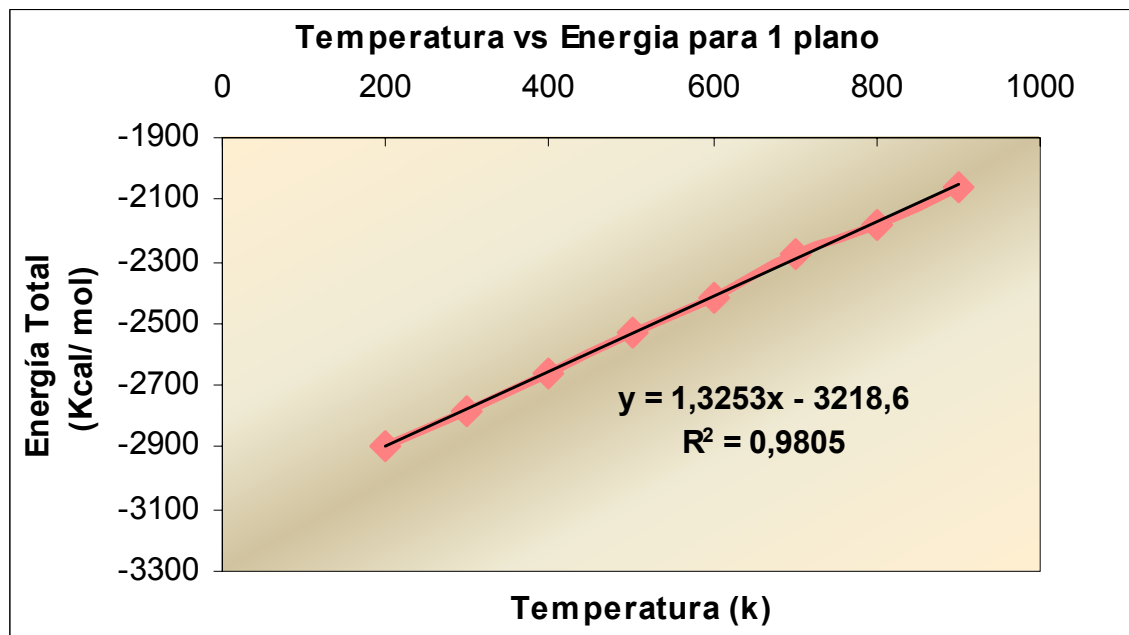
ANEXO A

Propiedades determinadas durante la simulación para cada uno de los sistemas moleculares de fosfato de circonio con diferente número de planos.

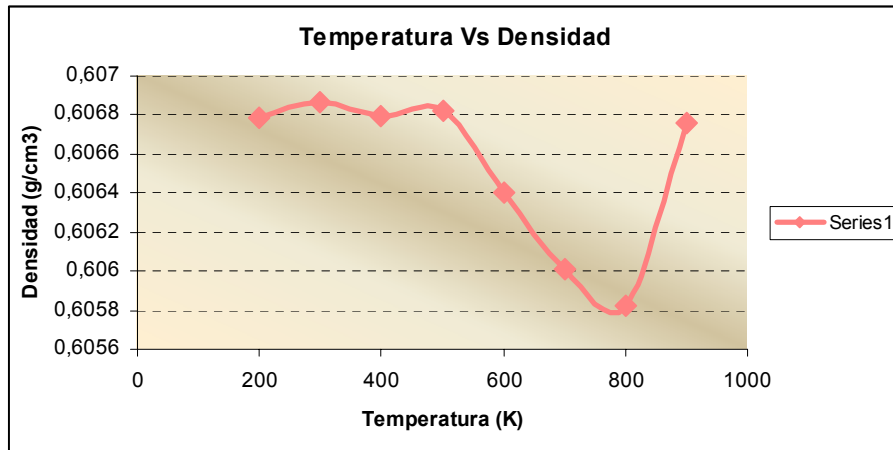
TABLA A.1. Propiedades del sistema molecular de 1 plano de α -ZrP.

Temperatura (K)	Energía Total (Kcal/mol)	Energía Potencial (kcal/mol)	Densidad (g/cm ³)	Volumen (nm ³)	A (nm)	b (nm)	c (nm)	Alfa	Beta	Gama
200	-2897,685	-3014,029	0,606788	10030,75	18,1g1512	15,710150	36,681230	90,363720	106,075500	89,820090
300	-2782,41	-2955,594	0,606868	10029,76	18,11265	15,711620	36,682250	90,339540	106,092600	89,832530
400	-2659,025	-2890,261	0,606797	10020,42	18,11001	15,713800	36,682950	90,339540	106,101800	89,845830
500	-2528,973	-2818,299	0,606818	10029,23	18,10939	15,714820	36,683850	90,281290	106,117600	89,866450
600	-2420,351	-2766,646	0,606402	10030,25	18,10741	15,718320	36,684840	89,941090	106,127600	90,028950
700	-2272,54	-2676,804	0,606008	10037,14	18,10715	15,727430	36,686590	89,916440	106,113000	90,039630
800	-2183,507	-2645,872	0,605825	10043,66	18,10527	15,736950	36,687900	89,985120	106,090500	89,900000
900	-2060,535	-2580,832	0,606761	10046,69	18,10272	15,742870	36,688550	89,970690	106,081100	90,012260

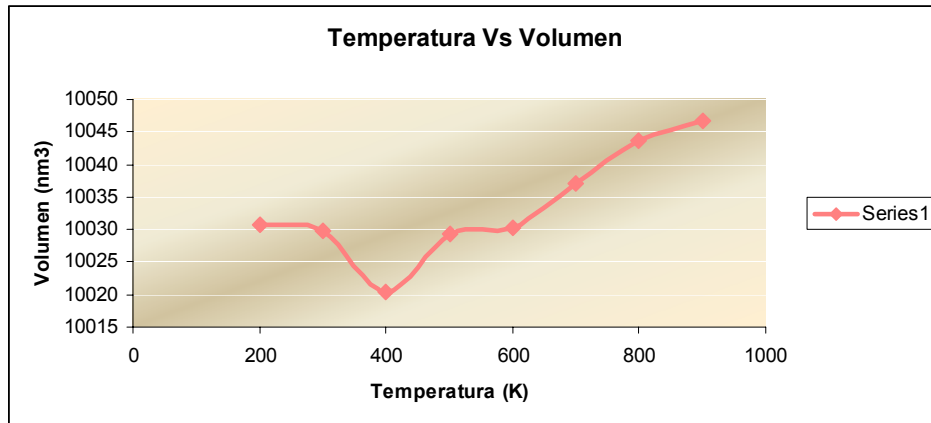
Grafica A.1 Temperatura Vs Energía total (sistema α -ZrP 1 plano)



Grafica A.2 Temperatura Vs Densidad (sistema α -ZrP 1 plano)



Grafica A.3 Temperatura Vs Volumen (sistema α -ZrP 1 plano1)



Grafica A.4 Temperatura Vs Energía Potencial (sistema α -ZrP 1 plano)

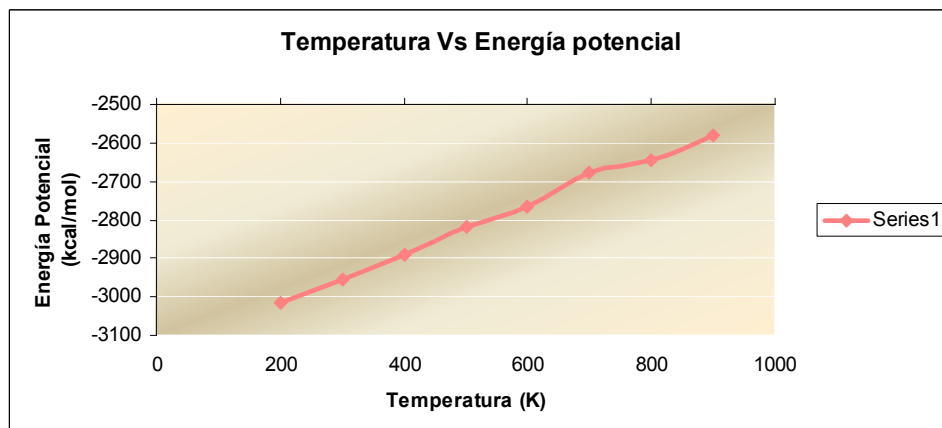
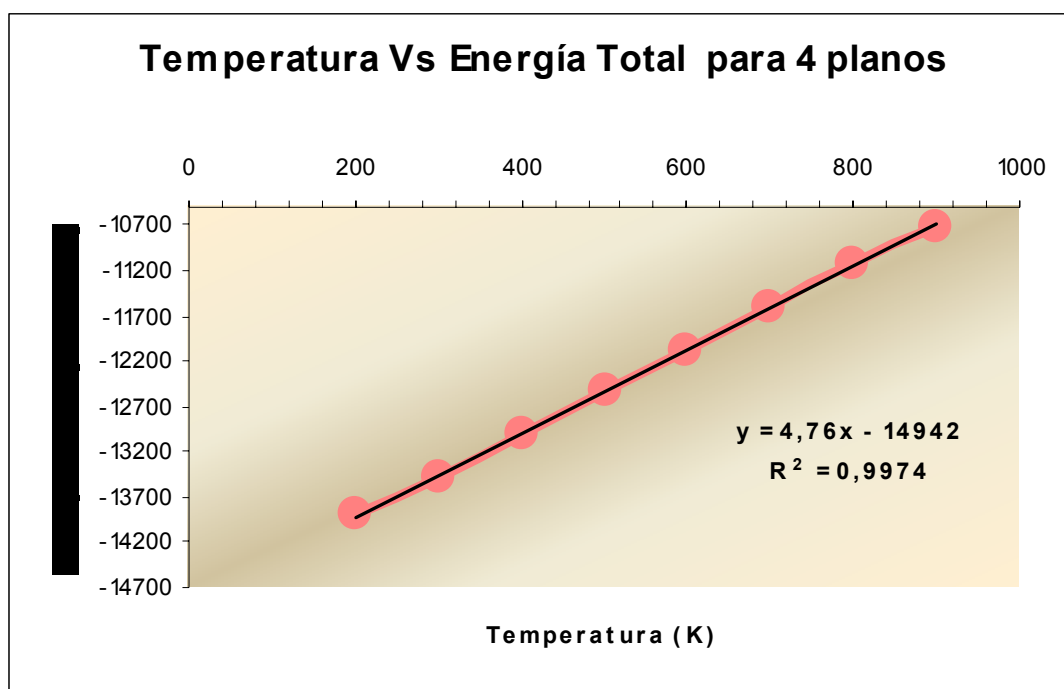


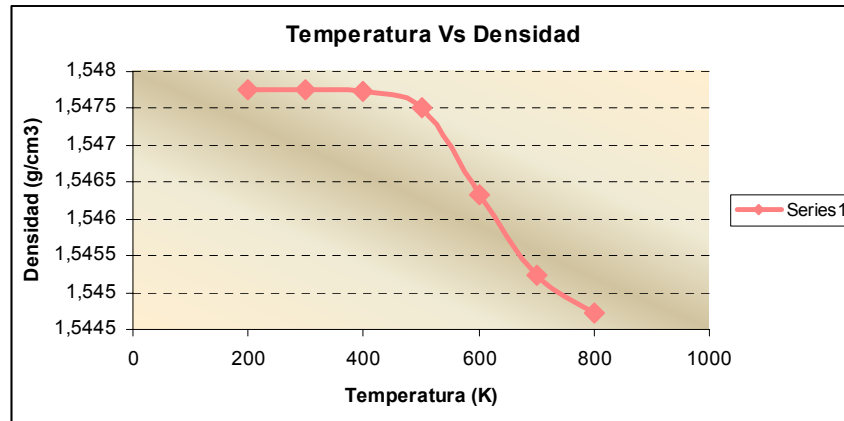
TABLA A.2 Propiedades del sistema molecular de 4 planos de α -ZrP.

Temperatura (K)	Energía Total (Kcal/mol)	Energía Potencial (kcal/mol)	Densidad (g/cm ³)	Volumen (nm ³)	a (nm)	b (nm)	c (nm)	Alfa	Beta	Gama
200	-13898,22	-14348,61	1,547672	15511,84	18,11512	15,71015	56,72492	90,36372	106,9755	89,82009
300	-13468	-14143,32	1,547756	15511	18,11265	15,71162	56,729	90,33954	106,0926	89,83253
400	-13008,42	-13907,44	1,547762	15510,94	18,11001	15,7138	56,7318	990,3395	106,1018	89,84583
500	-12544,28	-13668,09	1,547731	15511,25	18,10939	15,71482	56,7354	90,28129	106,1176	89,86645
600	-12085,12	-13434,08	1,547508	15513,49	18,10741	15,71832	56,73934	89,94109	106,1276	90,02895
700	-11603,29	-13177,29	1,54633	15525,31	18,10715	15,72743	56,74634	89,91644	106,113	90,03963
800	-11128,8	-12926,21	1,545238	15536,28	18,10527	15,73695	56,75158	89,98512	106,0905	89,9
900	-10711,75	-12733,8	1,544727	15541,42	18,10272	15,74287	56,7542	89,97069	106,0811	90,01226

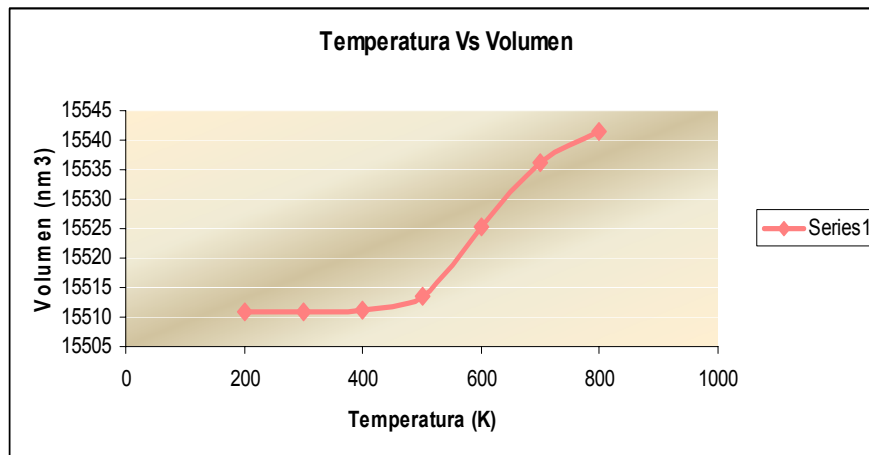
Grafica A.5 Temperatura Vs Energía total (sistema α -ZrP 4 planos)



Grafica A.6 Temperatura Vs Densidad (sistema α -ZrP 4 planos)



Grafica A.7 Temperatura Vs Volumen (sistema α -ZrP 4 planos)



Grafica A.8 Temperatura Vs Energía Potencial (sistema α -ZrP 4 planos)

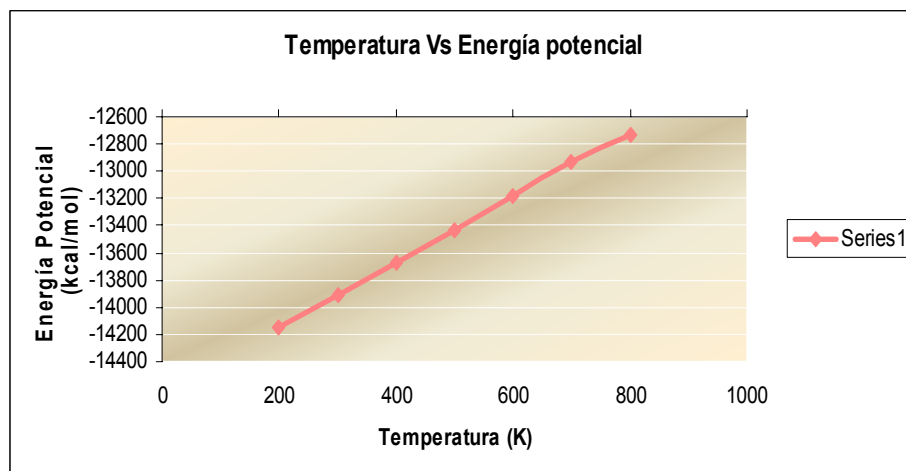
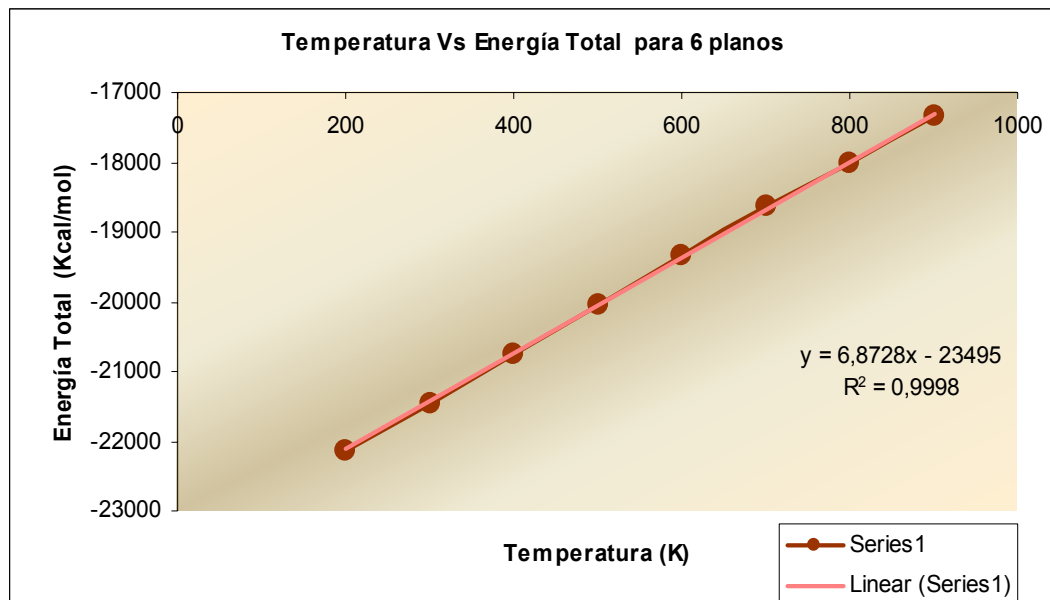


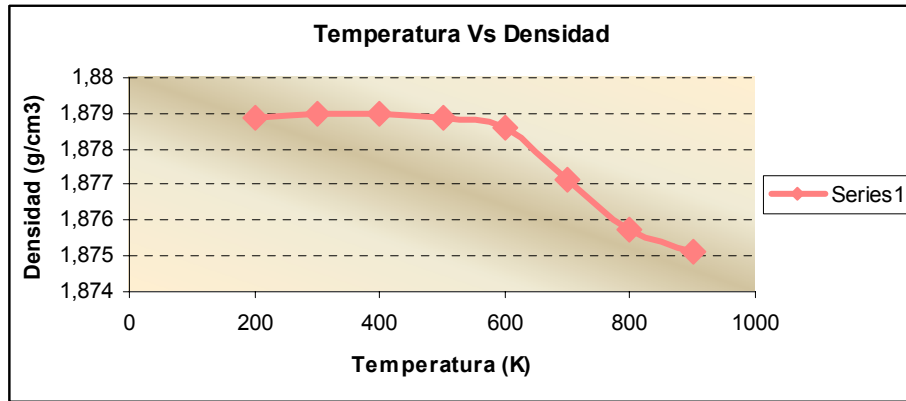
TABLA A.3 Propiedades del sistema molecular de 6 planos de α -ZrP.

Temperatura (K)	Energía Total (Kcal/mol)	Energía Potencial (kcal/mol)	Densidad (g/cm ³)	Volumen (nm ³)	a (nm)	b (nm)	c (nm)	Alfa	Beta	Gama
200	-22125,25	-22801,16	1,878903	19165,9	18,11512	15,71015	70,08738	90,36372	106,0755	89,82009
300	-21447,82	-22459,71	1,878976	19165,16	18,11265	15,71162	70,0935	90,33954	106,0926	89,83253
400	-20751,71	-22100,26	1,878963	19165,26	18,11001	15,7138	70,0977	90,33954	106,1018	89,84583
500	-20054,97	-21741,02	1,8789	19165,94	18,10939	15,71482	70,1031	90,28129	106,1176	89,86645
600	-19352,69	-21376,25	1,878601	19168,99	18,10741	15,71832	70,10901	89,94109	106,1276	90,02895
700	-18636,78	-20998,11	1,877121	19184,1	18,10715	15,72743	70,11951	89,91644	106,113	90,03963
800	-18020,8	-20718,22	1,875759	19198,03	18,10527	15,73695	70,12737	89,98512	106,0905	89,9
900	-17332,45	-20366,89	1,875121	19204,56	18,10272	15,74287	70,1313	89,97069	106,0811	90,01226

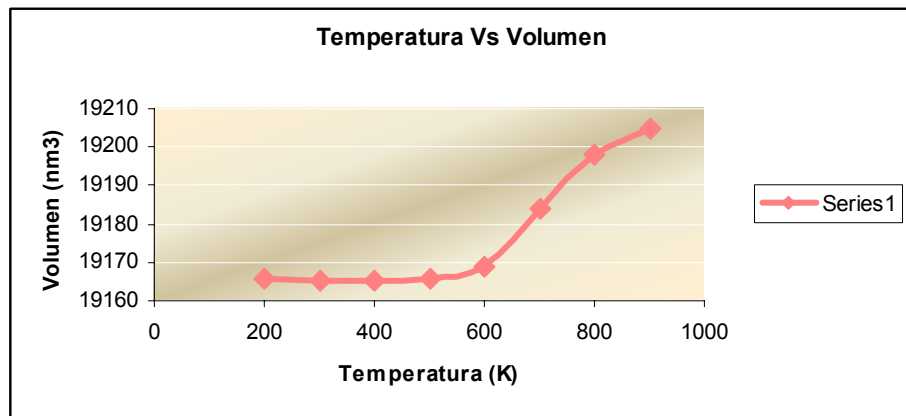
Grafica A.9 Temperatura Vs Energía total (sistema α -ZrP 6 planos)



Grafica A.10 Temperatura Vs Densidad (sistema α -ZrP 6 planos)



Grafica A.11 Temperatura Vs Volumen (sistema α -ZrP 6 planos)



Grafica A.12 Temperatura Vs Energía Potencial (sistema α -ZrP 6 planos)

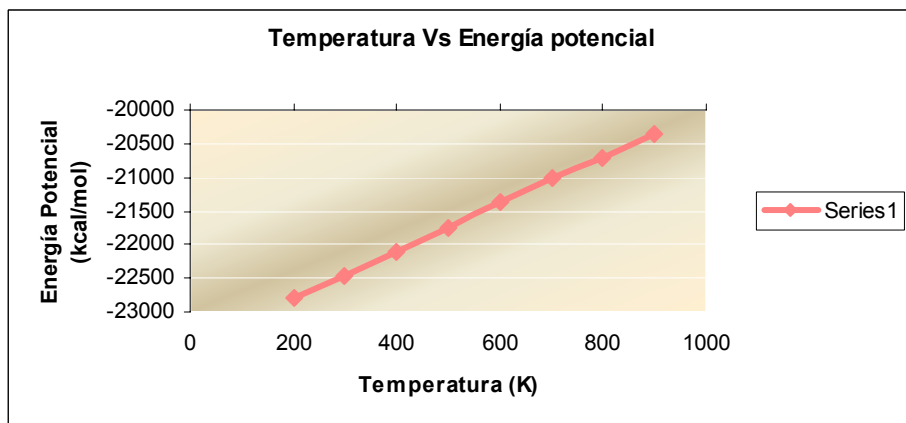
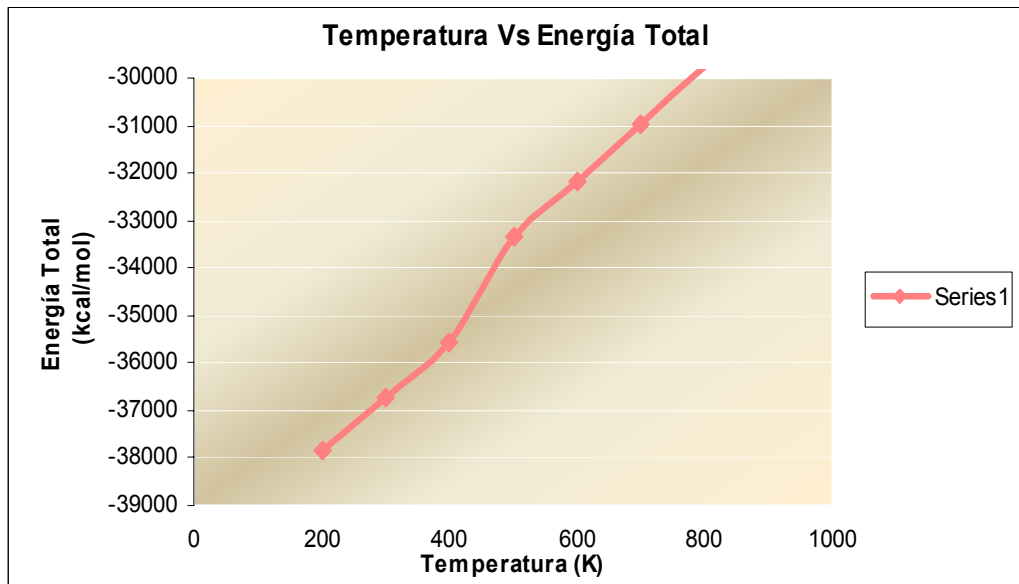


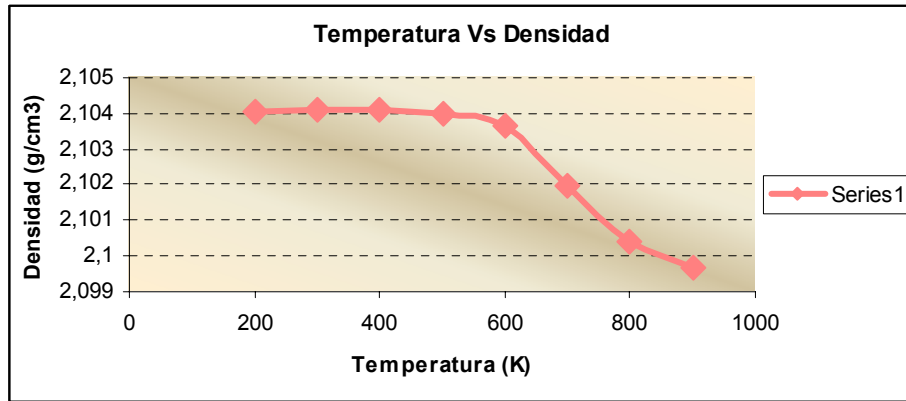
TABLA A.4 Propiedades del sistema molecular de 8 planos de α -ZrP.

Temperatura (K)	Energía Total (Kcal/mol)	Energía Potencial (kcal/mol)	Densidad (g/cm ³)	Volumen (nm ³)	a (nm)	b (nm)	c (nm)	Alfa	Beta	Gama
200	-30039,43	-30393,66	2,104057	22820	18,115	15,71015	83,45	90,36372	106,0755	89,82009
300	-29167,38	-30516,39	2,104116	22819	18,113	15,71162	83,458	90,33954	106,0926	89,83253
400	-28301,59	-30099,69	2,104087	22820	18,11	15,7138	83,464	90,33954	106,1018	89,84583
500	-27384,29	-29632,38	2,103997	22821	18,109	15,71482	83,471	90,28129	106,1176	89,86645
600	-26459,6	-29156,84	2,10364	22824	18,107	15,71832	83,479	89,49109	106,1276	90,02895
700	-25502,54	-28648,73	2,101946	22843	18,107	15,72743	83,493	89,91644	106,113	90,03963
800	-24557,27	-28153,32	2,100392	22860	18,105	15,73695	83,503	89,98512	106,0905	89,9
900	-23610,55	-27655,98	2,099663	22868	18,103	15,74287	83,508	89,97069	106,0811	90,01226

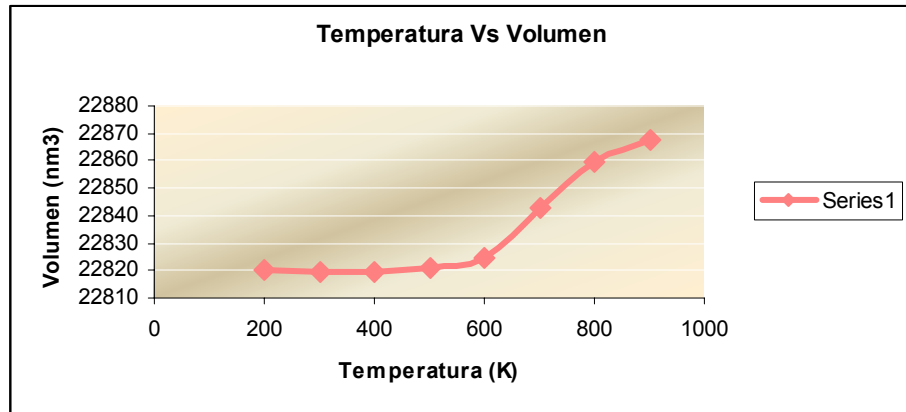
Grafica A.13 Temperatura Vs Energía total (sistema α -ZrP 8 planos)



Grafica A.14 Temperatura Vs Densidad (sistema α -ZrP 8 planos)



Grafica A.15 Temperatura Vs Volumen (sistema α -ZrP 8 planos)



Grafica A.16 Temperatura Vs Energía Potencial (sistema α -ZrP 8 planos)

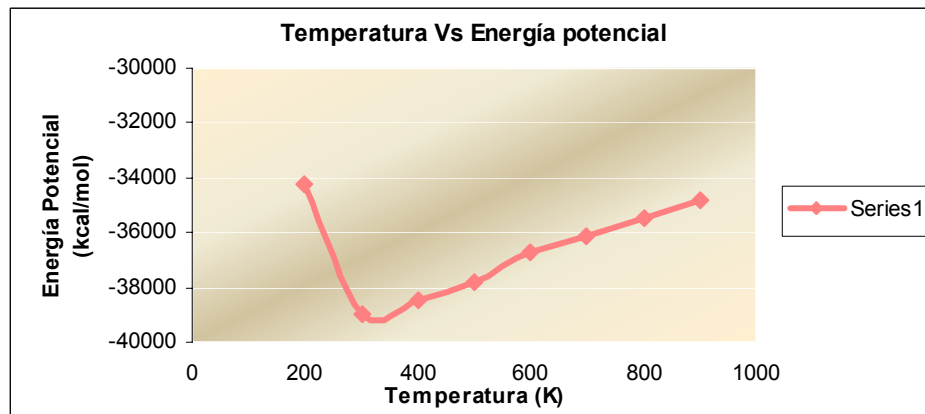
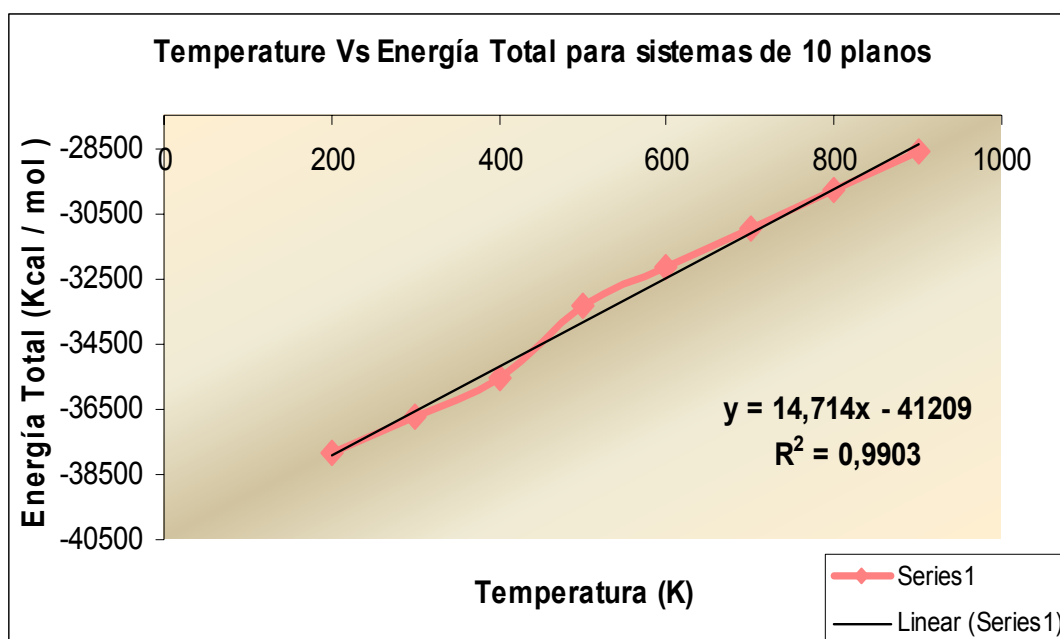


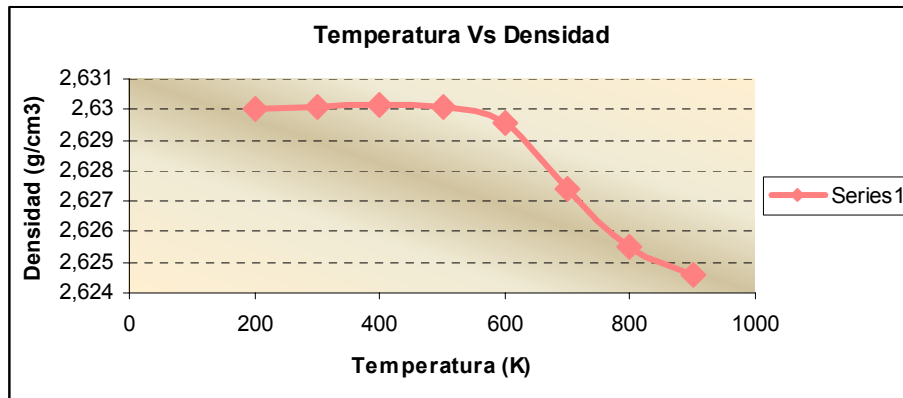
TABLA A.5 Propiedades del sistema molecular de 10 planos de α -ZrP.

Temperatura (K)	Energía Total (Kcal/mol)	Energía Potencial (kcal/mol)	Densidad (g/cm ³)	Volumen (nm ³)	a (nm)	b (nm)	c (nm)	Alfa	Beta	Gama
200	-37857,87	-34263,31	2,63002	22820,4	18,1187	15,70804	83,4468	90,37808	106,0767	89,81567
300	-36747,8	-38984,14	2,630071	22819,96	18,11512	15,71015	83,44984	90,36372	106,0755	89,82009
400	-35588,02	-38434,32	2,630145	22819,32	18,11265	15,71162	83,458	90,33954	106,0926	89,83253
500	-33350,63	-37836,71	2,630108	22819,64	18,11001	15,7138	83,4636	90,33954	106,1018	89,84583
600	-32175,66	-36724,01	2,62955	22824,48	18,10741	15,71832	83,47868	89,94109	106,1276	90,02895
700	-30978,22	-36110,41	2,627432	22842,88	18,10715	15,72743	83,49268	89,91644	106,113	90,03963
800	-29767,35	-35474,03	2,62549	22859,78	18,10527	15,73695	83,50316	89,98512	106,0905	89,9
900	-28643,26	-34826,54	2,624579	22867,71	18,10272	15,74287	83,5084	89,97069	106,0811	90,01226

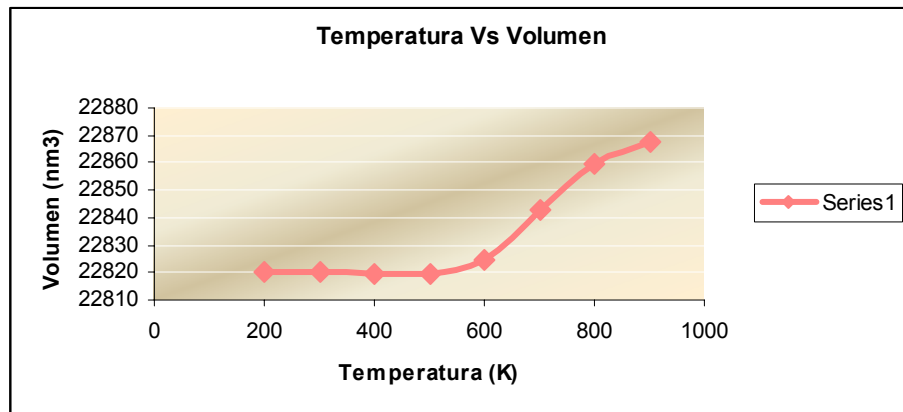
Grafica A.17 Temperatura Vs Energía total (sistema α -ZrP 10 planos)



Grafica A.18 Temperatura Vs Densidad (sistema α -ZrP 10 planos)



Grafica A.19 Temperatura Vs Volumen (sistema α -ZrP 10 planos)



Grafica A.20 Temperatura Vs Energía Potencial (sistema α -ZrP 10 planos)

