



# **ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO**

**FACULTAD DE CIENCIAS**

**CARRERA DE BIOFÍSICA**

## **“SIMULACIÓN EN INTERACCIONES DE TIPO VAN DER WAALS EN SISTEMAS MOLECULARES”**

**Trabajo de Titulación**

**Tipo:** Proyecto de Investigación

Presentado para optar al grado académico de:

**BIOFÍSICA**

**AUTOR:** MARÍA BELÉN AMAGUAÑA GUEVARA

**DIRECTOR:** Dr. RICHARD PACHACAMA CHOCA

Riobamba – Ecuador

2021

© 2021, María Belén Amaguaña Guevara

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo cita bibliográfica del documento, siempre y cuando se reconozca el Derecho de Autor.

Yo, MARÍA BELÉN AMAGUAÑA GUEVARA, declaro que el presente trabajo de titulación es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autora asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este trabajo de titulación; el patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 02 de marzo de 2021.

**María Belén Amaguaña Guevara**

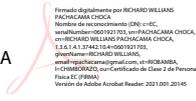
**Ci. 060423947-5**

# ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

## FACULTAD DE CIENCIAS

### CARRERA DE BIOFISICA

El Tribunal del Trabajo de Titulación certifica que: El trabajo de titulación; tipo: Proyecto de Investigación, **SIMULACION EN INTERACCIONES TIPO VAN DER WAALS EN SISTEMAS MOLECULARES**, realizado por la señorita: **MARÍA BELÉN AMAGUAÑA GUEVARA**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del trabajo de titulación, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

	FIRMA	FECHA
Biof. María Fernanda Heredia Moyano <b>PRESIDENTE DEL TRIBUNAL</b>	 Firmado electrónicamente por: <b>MARIA FERNANDA HEREDIA MOYANO</b>	2021-03-02
Dr. Richard Willians Pachacama Choca <b>DIRECTOR DE TRABAJO DE TITULACIÓN</b>	<b>RICHARD WILLIANS PACHACAMA CHOCA</b>  Firmado digitalmente por RICHARD WILLIANS PACHACAMA CHOCA Nombre de reconocimiento (DN): serialNumber=0601021703, cn=RICHACAMA CHOCA, cn=RICHARD WILLIANS PACHACAMA CHOCA, s.1.1.4.1.31421.1.4-0601021703, email=rpachacama@espol.edu.ec, ou=REGISTRACION, ou=SECRETARIA In-CRIBESERVICES, por-Sistema de Certificación de Clave P. del Ecuador País=EC (FIRMA) Versión del Algoritmo: Anshul Beaudin: 2021.001: 20140	2021-03-02
Biof. Miguel Ángel Sáez Paguay <b>MIEMBRO DEL TRIBUNAL</b>	<b>MIGUEL ANGEL SAEZ PAGUAY</b>  Firmado digitalmente por MIGUEL ANGEL SAEZ PAGUAY Nombre de reconocimiento (DN): c=EC, ou=SECURITY DATA S.A., ou=ENTIDAD DE CERTIFICACION DE INFORMACION, serialNumber=030720160103, cn=MIGUEL ANGEL SAEZ PAGUAY Fecha: 2021.03.19 09:56:12 -05'00'	2021-03-02

## **DEDICATORIA**

Dedico este logro a Dios por guiarme en el camino hacia el éxito y a mi amada Madre Santa por interceder por mí en todo momento. En especial, consagro todo mi esfuerzo, dedicación y cariño a mi amado tío Vicente Olivo Amaguaña Guevara, quien me enseñó que la victoria no es fácil de conseguir, por estar conmigo siempre, ser mi padre y que ahora desde el cielo está orgulloso de mi por verme realizada como él deseaba. Volaré tan alto como soñabas. A mi hermosa madre Pilar por apoyarme siempre y ayudarme a alcanzar cada uno de los objetivos que me he propuesto. A mis tíos Patricio, Lucía, Bolívar, Rodrigo, Rosa, Laura, Soledad, Margarita y Ana María por brindarme su apoyo incondicional, sus consejos y su jovialidad, a mi hermosa Fatney que con su inocencia de infante me ha llenado de alegría, a mis seres queridos que ya no están pero que dejaron su huella en mi corazón y a toda de mi familia por creer en mi desde el principio.

María Belén.

## **AGRADECIMIENTO**

A Dios y la Virgen Santa por la vida que me han regalado para llegar a cumplir esta meta.

A mi querido Tío en el cielo y a mi madre por apoyarme siempre, tener paciencia y ser el mejor ejemplo para mí.

A mi abuelita, mis tíos, primos, familia y amigos por el cariño brindado en este proceso de formación.

Un especial agradecimiento al Msc. José Luis Burgos, ex docente de la institución por brindarme su asesoría durante todo el proceso de investigación. Al personal docente, administrativo y de apoyo de la carrera de Biofísica por su empeño y dedicación al trabajar en la ESPOCH con el fin de formar profesionales de calidad.

María Belén.

## TABLA DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	ix
ÍNDICE DE FIGURAS.....	x
ÍNDICE DE GRÁFICOS.....	xi
ÍNDICE DE ANEXOS .....	xii
RESUMEN.....	xiii
ABSTRACT .....	xiv
INTRODUCCIÓN .....	1
CAPÍTULO I .....	2
1 MARCO TEÓRICO REFERENCIAL .....	2
1.1 Antecedentes .....	2
1.2 Planteamiento del problema.....	3
1.3 Justificación .....	4
1.4 Objetivos .....	5
1.4.1 <i>Objetivo general</i> .....	5
1.4.2 <i>Objetivos específicos</i> .....	5
1.5 Marco teórico.....	5
1.5.1 <i>Gases nobles</i> .....	5
1.5.2 <i>Fuerzas Intermoleculares</i> .....	8
1.5.2.1 <i>Interacciones de Van der Waals (VdW)</i> .....	8
1.5.2.2 <i>Potencial de Lennard-Jones (L-J)</i> .....	12
1.5.3 <i>Estructura Cristalina</i> .....	14
1.5.3.1 <i>Redes cristalinas</i> .....	15
1.5.3.2 <i>Redes tridimensionales cúbicas</i> .....	15
1.5.3.3 <i>Cristales de gases inertes</i> .....	17
1.5.4 <i>Método Montecarlo</i> .....	18
1.5.4.1 <i>Método Metrópoli</i> .....	18

1.5.5	<i>Dinámica Molecular (DM)</i> .....	18
<b>CAPÍTULO II</b>		
2	<b>MARCO METODOLÓGICO</b> .....	21
2.1	<b>Tipo de investigación.</b> .....	21
2.2	<b>Diseño de la investigación.</b> .....	22
2.2.1	<i>Teórico Computacional</i> .....	22
2.2.1.1	<i>Identificación de variables</i> .....	22
2.2.1.2	<i>Planteamiento de hipótesis</i> .....	23
2.2.1.3	<i>Matriz de consistencia</i> .....	23
2.2.1.4	<i>Operacionalización de variables</i> .....	24
2.2.1.5	<i>Localización del estudio</i> .....	25
2.2.1.6	<i>Población de estudio</i> .....	25
2.2.1.7	<i>Tamaño de muestra</i> .....	25
2.2.1.8	<i>Método de muestreo</i> .....	25
2.2.1.9	<i>Técnicas de recolección de datos</i> .....	25
2.2.1.10	<i>Análisis estadístico</i> .....	26
<b>CAPÍTULO III</b>		
3	<b>MARCO DE RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS</b> .....	27
3.1	<b>Desarrollo de la propuesta</b> .....	27
3.1.1	<i>Algoritmo en Materials Studio</i> .....	27
3.1.2	<i>Algoritmo en PSI4</i> .....	28
3.2	<b>Resultados</b> .....	28
<b>CONCLUSIONES</b> .....		39
<b>RECOMENDACIONES</b> .....		40
<b>GLOSARIO</b>		
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>		
<b>ANEXOS</b>		

## ÍNDICE DE TABLAS

<b>Tabla 1-1:</b> Propiedades físicas de los gases nobles.....	7
<b>Tabla 2-1:</b> Tipos de redes cristalinas según su dimensión.....	15
<b>Tabla 3-1:</b> Propiedades de los cristales de gases raros, datos extrapolados a presión nula y 0 K. .....	17
<b>Tabla 1-2:</b> Matriz de consistencia.....	22
<b>Tabla 2-2:</b> Operacionalización de variables .....	23
<b>Tabla 1-3:</b> Comparación entre los datos de la Distancia entre los vecinos más cercanos. ....	27
<b>Tabla 2-3:</b> Valores de Optimización geométrica molecular y del sistema en eV.....	28
<b>Tabla 3-3:</b> Resultados de Energía cohesiva propio de cada elemento.....	28
<b>Tabla 4-3:</b> Valores de Dinámica molecular a 450K para los distintos sistemas moleculares.....	30
<b>Tabla 5-3:</b> Valores de Dinámica molecular a 450K para los distintos sistemas moleculares.....	30
<b>Tabla 6-3:</b> Valores de Dinámica molecular a 600K para los distintos sistemas moleculares.....	31
<b>Tabla 7-3:</b> Valores de Dinámica molecular a 600K para los distintos sistemas moleculares.....	32

## ÍNDICE DE FIGURAS

<b>Figura 1-1:</b> Colores característicos que presentan los elementos del grupo 0. ....	5
<b>Figura 2-1:</b> Distribución de cargas de átomos no rígidos. ....	8
<b>Figura 3-1:</b> Osciladores armónicos acoplados separados por una distancia $R-x_2$ . ....	10
<b>Figura 4-1:</b> Potencial de Lennard Jones. ....	13
<b>Figura 5-1:</b> Estructura cristalina del diamante. ....	14
<b>Figura 6-1:</b> Estructura de la red cúbica simple (SC). ....	16
<b>Figura 7-1:</b> Estructura de una red cúbica centrada en el cuerpo (BCC). ....	16
<b>Figura 8-1:</b> Estructura de una red cúbica centrada en las caras (FCC). ....	17

## ÍNDICE DE GRÁFICOS

<b>Gráfico 1-2:</b>	Diseño de investigación en Materials Studio.....	22
<b>Gráfico 2-2:</b>	Diseño de investigación en Psi4.....	22
<b>Gráfico 1-3:</b>	Forma del potencial de L-J que describe la interacción de dos átomos de gas inerte.....	33
<b>Gráfico 2-3:</b>	PES de Helio.....	34
<b>Gráfico 3-3:</b>	Gráfica de PES en eV de Helio, el punto mínimo se muestra en $R=3.18 \text{ \AA}$ , dando un valor potencial de $-0,00050549 \text{ eV}$ .....	34
<b>Gráfico 4-3:</b>	PES de Neón.....	35
<b>Gráfico 5-3:</b>	Gráfica de PES en eV de Neón, el punto mínimo se muestra en $R=3.41 \text{ \AA}$ , dando un valor potencial de $-0,001235 \text{ eV}$ .....	35
<b>Gráfico 6-3:</b>	PES de Argón.....	36
<b>Gráfico 7-3:</b>	Gráfica de PES en eV de Argón, el punto mínimo se muestra en $R=4.06 \text{ \AA}$ , dando un valor potencial de $-0,0053978 \text{ eV}$ .....	36
<b>Gráfico 8-3:</b>	PES de Kriptón.....	37
<b>Gráfico 9-3:</b>	Gráfica de PES en eV de Kriptón, el punto mínimo se muestra en $R=4.39 \text{ \AA}$ , dando un valor potencial de $-0,00657 \text{ eV}$ .....	37

## ÍNDICE DE ANEXOS

**Anexo A:** Input file Psi4.

**Anexo B:** Output file Psi4.

**Anexo C:** Output file Materials Studio.

**Anexo D:** Valores de energía obtenidos mediante el código de Psi4.

## RESUMEN

Este proyecto investigativo consiste en simular interacciones de tipo Van der Waals en sistemas moleculares de gases nobles: He, Ne, Ar, Kr, y Xe para corroborar propiedades físicas como distancia entre los vecinos más cercanos y el comportamiento energético de los sistemas, para ello, se realizó una revisión de literatura de los modelos matemáticos de las interacciones de Van der Waals que gobiernan estos elementos y por ende el potencial de Lennard Jones debido a que este contiene a las interacciones de VdW. El trabajo tiene como base una metodología mixta, debido al uso de datos cualitativos y cuantitativos que son el cimiento para el modelado computacional, es por lo que se usaron dos programas, el primero siendo Materials Studio en el que se simuló, optimizó y se realizó dinámica molecular cada uno de los sistemas moleculares, para después mediante un código abierto de Psi4 se obtuvieron datos de energía interna de moléculas diatómicas mostrando la presencia del Potencial de Lennard-Jones en los sistemas. Por tanto, las simulaciones proveen resultados numéricos y gráficos fiables respecto a los sistemas moleculares de gases nobles.

**Palabras clave:** <BIOFÍSICA>, < GASES NOBLES>, <DINÁMICA MOLECULAR>, <VAN DER WAALS>, <POTENCIAL DE LENNARD-JONES>, <PSI4(SOFTWARE)>, <MATERIALS STUDIO (SOFTWARE)>.



Firmado electrónicamente por:  
**ELIZABETH  
FERNANDA AREVALO  
MEDINA**



0757-DBRAI-UPT-2021

## ABSTRACT

This research project consists of simulating Van der Waals-type interactions in noble gas molecular systems: He, Ne, Ar, Kr, and Xe, to corroborate physical properties such as distance between the closest neighbors and the energy behaviour of the systems, a literature review of the mathematical models of the Van der Waals interactions that govern these elements and therefore the Lennard Jones potential because it contains the VdW interactions. The work is based on a mixed methodology, due to the use of qualitative and quantitative data that are the foundation for computational modeling, that is why two programs were used, the first being Materials Studio in which it was simulated, optimized, and carried out Molecular dynamics of each of the molecular systems, then using an open-source code of Psi4, internal energy data of diatomic molecules were obtained showing the presence of the Lennard-Jones Potential in the systems. Therefore, the simulations provide reliable numerical and graphical results for noble gas molecular systems.

**Keywords:** <BIOPHYSICS>, <NOBLE GASES>, <VAN DER WAALS>, <POTENTIAL OF LENNARD JONES>, <PSI4 SOFTWARE>, <MATERIALS STUDIO SOFTWARE>, <MOLECULAR DYNAMICS>.

## INTRODUCCIÓN

En el mundo científico la simulación ha tomado gran relevancia actualmente por ser una herramienta factible y económica en comparación con la experimentación, además que los resultados que arroja son aproximadamente realistas por lo que pueden ser usados en proyectos investigativos. Por otro lado, los gases nobles son elementos a los que desde su descubrimiento no se les ha dado completa importancia por sus propiedades inertes, su falta de reactividad y lo costoso que es realizar experimentos para estudiar estos elementos, pero, con el avance de la tecnología del siglo XXI se han retomado estudios de los gases nobles como sus propiedades mecánicas y electrónicas, así como las interacciones que los gobiernan y su evolución sistémica en el tiempo, siendo un estudio semiempírico.

Dicho esto, en el presente proyecto investigativo se realiza un estudio teórico computacional con el fin de simular sistemas moleculares de los gases nobles, mismo que es de carácter mixto, y que posee en su estructura un triplete de capítulos que se describen a continuación:

En el capítulo I se encuentra la descripción del marco referencial, antecedentes, justificación del proyecto, los objetivos a los cuales se desea llegar, así como una síntesis de las bases teóricas necesarias para comprender los Gases inertes, su estructura cristalina y los modelos de simulación importantes para este estudio.

En el capítulo II se presenta el marco metodológico, donde se detalla el tipo y diseño de la investigación, así como un proceso general a seguir, hipótesis, matriz de consistencia, operacionalización de variables, localización y población de estudio, tamaño de muestra, tipo de muestreo y el análisis estadístico a ser utilizado.

El capítulo III contiene los resultados obtenidos mediante los softwares Materials Studio y Psi4, mostrados en tablas y gráficas, así como la interpretación de estos.

Por último, las conclusiones de la investigación, las cuales están íntimamente relacionadas con los objetivos, así como las recomendaciones, bibliografía utilizada y los anexos en donde se encuentran los archivos de entrada y salida de Psi4, además de datos adicionales.

## CAPÍTULO I

### 1 MARCO TEÓRICO REFERENCIAL

#### 1.1 Antecedentes

Este proyecto de investigación tomó como referencia trabajos de distinta naturaleza los cuales se puntualizan a continuación:

(Saeteaw, Sawang y Sutthibutpong, 2019) en el artículo denominado “*van der Waals parameters of inert, polar and non-polar gas molecules obtained from atomistic molecular dynamics simulations*”, proponen el desarrollo de simulaciones de sistemas moleculares gaseosos, mediante dinámica molecular atomística, controlando parámetros como el volumen, temperatura y número de moléculas. En este trabajo se determinó que tanto los resultados de la simulación como el análisis de regresión de la relación presión-temperatura mostró que los parámetros de Van der Waals como la fuerza de interacción y el tamaño molecular efectivo dependen del tamaño, la forma y polaridad de las moléculas. Por lo que se concluye en que los valores de punto de ebullición y fusión se aproximan con gran precisión a los valores reales cerrando la brecha en la información de valores macroscópicos con los microscópicos y además los autores sugirieron que se realicen estudios posteriores para obtener trayectorias mejor equilibradas y que optimicen los tiempos de cómputo.

Por otro lado, (Hopkins, 2016) presenta en su tesis doctoral llamada “*Morphological and material effects in van der Waals interactions*” una serie de resultados usando la formulación de Lifshitz para crear un código abierto en el que se pueda calcular con precisión las interacciones de van der Waals en donde se demuestra como estas interacciones funcionan para controlar una serie de fenómenos como el autoensamblaje, la adhesión a la superficie, la fricción y la estabilidad coloides. Así como una mayor comprensión del papel de las propiedades del sistema a mesoescala. Los estudios proporcionan nuevos conocimientos sobre la fuerza y los tipos de mecanismos que son importantes en los sistemas moleculares, por lo que se abren posibilidades para la construcción de sistemas con propiedades o funcionalidades controladas, así también proporcionan información sobre interacciones a escala molecular como la dependencia de la interacción ADN-ADN las cuales en años previos eran inaccesibles.

En tanto que, (Fonseca, 2010, pp. 22-26) presenta el artículo “*Configuración óptima por Montecarlo para un clúster de 13 átomos y aproximación a sus propiedades térmicas*” en el que se usó un algoritmo annealing que es una simulación de tipo Montecarlo, a fin de solucionar la optimización global de la molécula. En este estudio se logra desarrollar un algoritmo sumamente sensible al cambio de parámetros debido a la naturaleza de la simulación, para obtener un valor de energía estable que se considera el mínimo global de la energía potencial del sistema, que desemboca en la configuración más estable del mismo, consiguiendo valores similares a los ya reportados en la literatura, además de encontrar que la estructura más sólida para el clúster era un icosaedro.

## **1.2 Planteamiento del problema**

La importancia que tiene la comprensión de los sistemas moleculares para áreas como física, química e incluso la industria, ha hecho de esto una necesidad por las complicaciones que se presentan al tratar de estudiarlos de manera experimental. Los sistemas moleculares poseen interacciones que rigen su comportamiento diferentes escalas: Cristal, nanoscópico y molecular; una interacción de fase es la de Van der Waals, que es muy débil en comparación con otros enlaces, pero su importancia radica en que posee dos propiedades únicas: la universalidad debido a que todos los átomos y moléculas que presentan atracción la tienen lo que explica fenómenos como cohesión y adsorción, y por otra parte, lo significativa que sigue siendo la fuerza cuando las moléculas se separan mínimamente por lo que es aditiva ya que puede alcanzar magnitudes perceptibles a escala macroscópica (Winterton, 1970, pp. 559-574).

Los gases nobles son conocidos por su falta de reactividad química y las fuerzas que los gobiernan son las de Van der Waals, por lo tanto, crean medios inertes que evitan reacciones químicas no deseadas durante un procedimiento y se los utiliza en diversas áreas como metalurgia, tecnología, química, etc. Debido a que las interacciones de Van der Waals son las que gobiernan los sistemas moleculares de los gases nobles, es acertado que se realicen investigaciones enfocadas en los mismos, pero siendo complicado llevar a cabo estudios experimentales, estos se basan en métodos computacionales y que se pueden realizar debido a la accesibilidad a los recursos, obteniendo resultados aproximados de sistemas reales. Existen varias simulaciones de las interacciones de tipo Van der Waals, pero están centradas en sistemas moleculares como metales, agua, hidrocarburos, entre otras; siendo importante realizar una simulación de los gases nobles encaminada en las interacciones a las que están sometidos, con el fin de conocer las propiedades físicas que presentan.

### 1.3 Justificación

Las transiciones de fase o también conocidas como, cambios de estado, son la demostración de la existencia de las fuerzas intermoleculares, y estas, son las que determinan la formación de moléculas con características microscópicas concretas como: energía de enlace, propiedades electrónicas, entre otras. Por ende, responsables de las propiedades macroscópicas como punto de fusión, punto de ebullición, etc. Entre las fuerzas intermoleculares están las de tipo Van der Waals, que son relativamente débiles, pero cumplen un papel fundamental en áreas como nanotecnología, biofísica, ciencia de polímeros, física de materia condensada, entre otras. A pesar de ser débiles, incluyen atracciones entre átomos, moléculas o superficies y pueden ser de corto o largo alcance dependiendo del sistema molecular. Estas fuerzas permiten exponer el comportamiento de los compuestos con enlaces covalentes en su mayoría. Así también, la existencia de estas interacciones no puede dudarse debido a que explican las transiciones de fase debido a que hasta los gases nobles pueden condensarse o solidificarse (Vázquez-Contreras, 2003, p. 1).

Los gases inertes como He, Ar, Ne, Xe y Kr, son utilizados en áreas como medicina, industria, investigación, tecnología, etc., por lo que, el estudio detallado de los sistemas moleculares de los gases inertes mediante simulaciones permitirá conocer el comportamiento electrónico de cada uno mediante el potencial de Lennard-Jones. Esto permitirá, no solo conocer las propiedades microscópicas de estos gases, sino también hacer una comparación de estas con el fin de obtener puntos de vista tanto clásicos como cuánticos de dichos sistemas.

Durante los últimos años, las investigaciones computacionales han sido ampliamente aceptadas para prevenir, explicar y ayudar a identificar soluciones a problemas que son difíciles de replicar mediante un trabajo experimental. La dinámica computacional tiene como principal interés el de entender el comportamiento de dichos sistemas, obteniendo datos mediante diversos métodos de simulación, a través de la idealización del problema, que, posteriormente, pueden ser usados para nuevas aplicaciones. Un método de simulación estadístico es el método Montecarlo que se basa en el muestreo sistemático de variables al azar, es usado en dinámica de fluidos para modelar un gas a partir de miles a millones de moléculas simuladas (Ungson et al., 2016, pp. 2-3; Unknown, 2005, pp. 1-13).

De acuerdo con lo antes mencionado, el proyecto de investigación es factible debido a que mediante el potencial de Lennard-Jones es posible realizar la simulación de interacciones de tipo Van der Waals, representa una herramienta económica y factible debido a que los recursos están disponibles en la institución, lo que permitiría obtener datos teóricos que pueden ayudar en estudios posteriores que se desarrollen en la ESPOCH.

## 1.4 Objetivos

### 1.4.1 Objetivo general

Simular las interacciones de tipo Van der Waals en gases nobles: He, Ar, Ne, Kr y Xe.

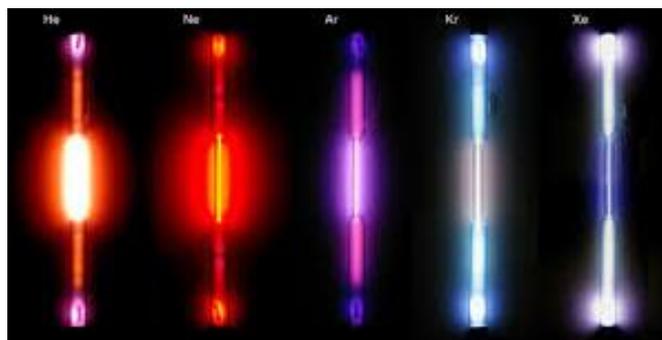
### 1.4.2 Objetivos específicos

- Modelar el sistema molecular de cada gas noble He, Ar, Ne, Kr y Xe.
- Emplear dinámica molecular mediante simulación de tipo Montecarlo.
- Realizar un cuadro comparativo de parámetros físicos como energía de enlace y propiedades electrónicas de He, Ar, Ne, Kr y Xe.

## 1.5 Marco teórico

### 1.5.1 Gases nobles

Los gases nobles son elementos no metálicos que conforman el grupo 18 de la tabla periódica además que, a temperatura y presión estándares son gases monoatómicos. Los gases inertes o raros son: Helio (He), Neón (Ne), Argón (Ar), Kriptón (Kr), Xenón (Xe) y Radón (Rn). Se los llama gases nobles por su relativa falta de reactividad química y esto se debe a que las capas de valencia están llenas (*s* y *p*), así como la ausencia de interacciones mutuas excepto por las fuerzas de London, por lo que, sus puntos de fusión y ebullición son bajos (Dove 2011; Brown et al. 2009). Todos los miembros de esta familia son incoloros, inodoros e insípidos pero cada uno emite un color característico en un tubo de descarga de gas (véase figura 1-1).



**Figura 1-1:** Colores característicos que presentan los elementos del grupo 0.

**Fuente:** (Travers, Travers y Travers, 1962, pp. 36-37).

Las propiedades de estos elementos dependen del número atómico (*Z*), las más importantes se presentan en la tabla 1-1. Se puede notar que la configuración electrónica de estos elementos a excepción del Helio es  $ns^2np^6$ , debido a que las elevadas cargas nucleares efectivas a los que

los electrones de valencia están sometidos, las energías de ionización son excesivamente altas, pero, a medida que aumenta el número atómico, esta energía va disminuyendo. De todos los gases nobles solo Neón y Kriptón pueden ser parte de componentes químicos, pero solo al enlazarse con los elementos más electronegativos como Flúor y Oxígeno, debido a que los gases inertes livianos tienen altos potenciales de ionización.

La principal fuente de los gases nobles a excepción del Helio es la atmósfera por lo que se pueden obtener mediante destilación fraccionada de aire líquido. Así también se cree que estos elementos surgieron como subproductos de decaimiento radiactivo de la corteza terrestre, debido a su bajo peso el Helio escapa de la corteza terrestre al espacio exterior, siendo este el segundo elemento más abundante en el universo (Tatlock, 1982, pp. 87-96).

**Tabla 1-1:** Propiedades físicas de los gases nobles.

	Helio	Neón	Argón	Kriptón	Xenón	Radón
<b>Número atómico (Z)</b>	2	10	18	36	54	86
<b>Configuración electrónica</b>	<i>He: 1s<sup>2</sup></i>	<i>Ne: 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup></i>	<i>Ar: [Ne]3s<sup>2</sup>3p<sup>6</sup></i>	<i>Kr: [Ar]4s<sup>2</sup>3d<sup>10</sup>4p<sup>6</sup></i>	<i>Xe: [Kr]4d<sup>10</sup>5s<sup>2</sup>5p<sup>6</sup></i>	<i>Rn: 4f<sup>14</sup>5d<sup>10</sup>6s<sup>2</sup>6p<sup>6</sup></i>
<b>Punto de Fusión (K)</b>	2	24	84	116	161	202
<b>Punto de Ebullición (K)</b>	4,2	27,1	87,3	120,3	166,1	208,2
<b>Energía de ionización (kJ/mol)</b>	2372	2081	1521	1351	1170	1037
<b>Afinidad electrónica estimada (kJ/mol)</b>	21	29	35	39	40	-
<b>Radio de Van der Waals (pm)</b>	150	160	190	200	220	-
<b>Masa atómica (<math>\frac{g}{mol}</math>)</b>	4,0026	20,179	39,948	83,80	131,3	222
<b>Radio covalente Å</b>	0,93	1,31	1,74	1,89	2,09	2,14
<b>Densidad (<math>\frac{g}{cm^3}</math>)</b>	0,126	1,20	1,40	2,6	3,06	-
<b>Primer potencial de ionización (eV)</b>	24,73	21,68	15,80	14,09	12,21	10,82

Fuente: (Brown et al., 2009, p. 1240; Alcañiz, 2019; Butt, Gole y Dyck, 2000, pp. 303-352)

Realizado por: Amaguaña, 2021.

### 1.5.2 Fuerzas Intermoleculares

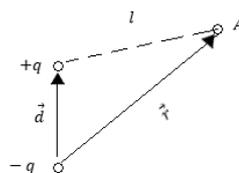
Las fuerzas intermoleculares son aquellas fuerzas que mantienen unidos a los átomos de una molécula, y generalmente son más débiles que los enlaces iónicos y covalentes, por lo que se requiere un menor importe de energía para evaporar un líquido o fundir un sólido. Las fuerzas intermoleculares que provienen de fuerzas electromagnéticas (interacciones atractivas o repulsivas), definen las propiedades macroscópicas del sistema molecular (Brown et al. 2009; Ruiz 2015).

#### 1.5.2.1 Interacciones de Van der Waals (VdW)

Las interacciones de Van der Waals se originan cuando átomos vecinos logran un balance entre fuerzas atractivas y repulsivas, es decir las nubes electrónicas apenas se tocan, lo que permite que se generen fluctuaciones de carga dando como resultado una atracción no específica y no direccionada. La energía de interacción que se produce depende de la distancia entre ambos átomos. Este tipo de interacción es relativamente débil en comparación con el resto de los enlaces interatómicos por lo que en circunstancias óptimas logran llegar a energías de 40kJ/mol (Pollard et al., 2017, p. 53-62; Bueren-Calabuig, 2014, pp. 1-17).

Dentro de las llamadas interacciones de VdW, se encuentran las fuerzas de dispersión de London que son fuerzas intermoleculares débiles que surgen de interacciones entre dipolos inducidos (momento dipolar temporal), que provocan una atracción intermolecular. Este tipo de fuerzas se muestran en moléculas no polares ya que la densidad electrónica se mueve de manera estocástica. Sin las fuerzas de dispersión de London, no habría fuerzas atractivas entre átomos de un gas noble y no podrían existir de forma líquida (Campos Suarez, 2011; Ges y Montecinos, 2019).

Una vez mencionado lo anterior, podemos tratar de responder la siguiente pregunta: ¿qué tipo de interacciones existirían entre dos átomos de gases inertes separados por una distancia ( $r$ ) que es mucho mayor que el radio atómico? Debido a que las distribuciones de carga de los átomos no son rígidas, inducen momentos dipolares entre sí, originando una interacción de tipo atractiva. Entonces, clásicamente tenemos el siguiente esquema:



**Figura 2-1:** Distribución de cargas de átomos no rígidos.

**Fuente:** (Kittel y McEuen, 1976)

De donde tenemos la expresión:

$$\frac{q(\vec{r}-\vec{d})}{|\vec{r}-\vec{d}|^3} \quad [1]$$

Si tomamos en cuenta que:

$$|\vec{r}-\vec{d}|^3 = |\vec{r}-\vec{d}|^2 |\vec{r}-\vec{d}| \quad [2]$$

$$|\vec{r}-\vec{d}|^{-3} = (\vec{r}^2 + \vec{d}^2 - 2\vec{r}\vec{d})^{-\frac{3}{2}} \quad [3]$$

Considerando el caso en que  $d \ll r$

$$|\vec{r}-\vec{d}|^{-3} = (\vec{r}^2 - 2\vec{r}\vec{d})^{-\frac{3}{2}} = r^{-3} \left[1 - \frac{2\vec{r}\vec{d}}{r^2}\right]^{-\frac{3}{2}} : r^2 \ll 1 \quad [4]$$

Hay que recordar que:  $(1 \pm x)^n = 1 \pm nx + \frac{n(n-1)}{2}x^2 + \dots$

$$|\vec{r}-\vec{d}|^{-3} = \frac{1}{r^3} \left(1 + \frac{3}{2} \frac{2\vec{r}\vec{d}}{r^2}\right) \approx \frac{1}{r^3} + \frac{3\vec{r}\vec{d}}{r^5} \quad [5]$$

$$\vec{E} = \frac{q\vec{r}}{r^3} + q(\vec{r}-\vec{d}) \left(\frac{1}{r^3} + \frac{3\vec{r}\vec{d}}{r^5}\right) \approx -\frac{q\vec{r}}{r^3} + \frac{q\vec{r}}{r^3} + 3q\vec{r} \frac{(\vec{r}-\vec{d})}{r^5} - \frac{q\vec{d}}{r^3} - \frac{3q\vec{d}(\vec{r}-\vec{d})}{r^5} \quad [6]$$

$$\vec{E} \approx 3q\vec{r} \frac{(\vec{r}-\vec{d})}{r^5} - \frac{q\vec{d}}{r^3} \quad [6.1]$$

Por otra parte, la energía potencial:  $U(R) = -\vec{p}\vec{E}, \vec{p} = q\vec{d}$

Si los dipolos están paralelos se tiene:

$$U(R) = -\vec{E}_1 \vec{p}_2, \quad \text{con } \vec{p}_2 = \alpha \vec{E}_1 \quad [7]$$

$$\vec{p}_2 = \frac{\alpha \vec{p}_1}{R^3}$$

El campo polariza al segundo átomo, induciendo un dipolo  $\alpha$  es la polarizabilidad electrónica del átomo mencionado.

Entonces, la energía potencial del sistema:

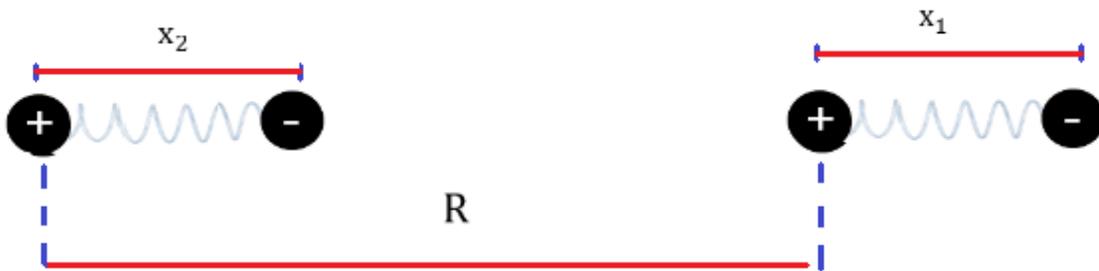
$$U(R) = -\frac{\vec{p}_1}{R^3} \propto \frac{\vec{p}_1}{R^3} = -\frac{\alpha \vec{p}_1}{R^6}, \quad [8]$$

Como  $\alpha \propto a_0^3$  y  $p_1 = qa = ze n a_0$

$$U(R) = -\frac{z^2 e^2 a_0^5 n^2}{R^6} = -\frac{B}{R^6} \quad [9]$$

Interacción de Van der Waals es la causa de la interacción entre los cristales de gases inertes y la atracción es dipolar.

Así también, se puede obtener un resultado cuántico, considerando dos osciladores acoplados como lo muestra el esquema siguiente.



**Figura 3-1:** Osciladores armónicos acoplados separados por una distancia R-x<sub>2</sub>.

Fuente: (Kittel y McEuen, 1976)

Sea  $\vec{p}_1$  &  $\vec{p}_2$  las cantidades de movimiento de cada oscilador.

La energía total de cada sistema (sin tomar en cuenta la interacción entre los osciladores) es:

$$E_1 = H_0 = \frac{p_1^2}{m} + \frac{1}{2} C x_1^2 + \frac{p_2^2}{m} + \frac{1}{2} C x_2^2 \quad [10]$$

Cada oscilador tiene una constante  $C = m\omega_0^2$

Así el hamiltoniano del sistema se expresa en la ecuación 12, considerando la interacción.

$$H_s = H_0 + H_i \quad [11]$$

Reescribimos el Hamiltoniano para simplificar la solución de la Ecuación de Schrödinger (para dos osciladores acoplados) haciendo:

$$X_s \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2), \quad X_a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2) \quad [12]$$

$$\Rightarrow P_1 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(P_s + P_a); \quad P_2 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(P_s - P_a) \quad [13]$$

Lo que nos permite obtener

$$H = \left[ \frac{P_s^2}{2m} + \frac{1}{2} \left( C - 2 \frac{e^2}{R^3} \right) X_s^2 \right] + \left[ \frac{P_a^2}{2m} + \frac{1}{2} \left( C + 2 \frac{e^2}{R^3} \right) X_a^2 \right] \quad [14]$$

Analicemos el término  $2 \frac{e^2}{R^3}$ , de la ecuación anterior se tiene que:

$$H_i = \frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{R+x_1} - \frac{e^2}{R-x_2} + \frac{e^2}{R+x_1-x_2} \quad [15]$$

$$H_i = \frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{R(1+\frac{x_1}{R})} - \frac{e^2}{R(1-\frac{x_2}{R})} + \frac{e^2}{R(1+\frac{x_1-x_2}{R})} \quad [15.1]$$

Usando  $(1 \pm x)^{-1} = 1 \pm x + x^2 + \dots$

$$H_i \approx \frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{R} \left( 1 - \frac{X_1}{R} + \frac{X_1^2}{R^2} \right) - \frac{e^2}{R} \left[ 1 - \left( -\frac{X_2}{R} \right) + \left( -\frac{X_2}{R} \right)^2 \right] + \frac{e^2}{R} \left[ 1 - \left( \frac{X_1-X_2}{R} \right) + \left( \frac{X_1-X_2}{R} \right)^2 \right] \quad [16]$$

$$H_i \approx \frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{R} \left( 1 \pm \frac{X_1}{R} \right)^{-1} - \frac{e^2}{R} \left[ 1 \pm \left( -\frac{X_2}{R} \right) \right]^{-1} + \frac{e^2}{R} \left[ 1 \pm \left( \frac{X_1-X_2}{R} \right)^{-1} \right] \quad [16.1]$$

$$H_i \approx -\frac{2e^2}{R^3} X_1 X_2 \quad [16.2]$$

Definiendo  $\omega$ :

$$\omega \equiv \left[ \frac{\left( C \pm \frac{2e^2}{R^3} \right)}{m} \right]^{\frac{1}{2}} \approx \omega_0 \left[ 1 \pm \frac{1}{2} \left( \frac{2e^2}{CR^3} \right) - \frac{1}{8} \left( \frac{2e^2}{CR^3} \right)^2 \right] \quad [17]$$

$$\omega_s \cong \omega_0 \left[ 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{2e^2}{CR^3} \right) - \frac{1}{8} \left( \frac{2e^2}{CR^3} \right)^2 \dots \right] \quad [17.1]$$

$$\omega_a \cong \omega_0 \left[ 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{2e^2}{CR^3} \right) - \frac{1}{8} \left( \frac{2e^2}{CR^3} \right)^2 \dots \right] \quad [17.2]$$

La energía de punto cero para estos dos modos de vibración:

$$U = \frac{1}{2} \hbar \omega_s + \frac{1}{2} \hbar \omega_a \quad [18]$$

$$U = \hbar \omega_0 - \hbar \omega_0 \frac{1}{8} \left( \frac{2e^2}{CR^3} \right)^2 \quad [18.1]$$

$$\Delta U = -\hbar\omega_0 \frac{1}{8} \left( \frac{2e^2}{cR^3} \right)^2 = -\frac{A}{R^6} \quad [19]$$

Como resultado obtenemos una expresión de energía de atracción, que es un efecto cuántico, esta energía mantiene a los gases inertes en interacción. Podemos observar que tanto el resultado clásico, ecuación 9; como el cuántico, ecuación 19, son semejantes y además que cuando R tiende a 0, la energía potencial decrecería al infinito, lo cual es falso porque esta debe crecer debido al principio de exclusión de Pauli y a la misma repulsión nuclear, es por lo que, a esta expresión se debe agregar un término de repulsión que dará lugar al Potencial de Lennard Jones.

#### 1.5.2.2 Potencial de Lennard-Jones (L-J)

Como se menciona en la sección anterior, la expresión de atracción que se obtuvo en la ecuación 26, estaría incompleta ya que no se cumplirían una serie de principios físicos debido a que al acercarse los átomos la función de onda de los electrones más externos que empiezan a solaparse por lo que los electrones no pueden ocupar esos estados porque ya están ocupados y solo cabrían en estado de energía superior, lo que aumentaría la energía potencial del sistema, así que se genera una fuerte repulsión cuántica.

Ajustando valores experimentales se añade el siguiente término repulsivo  $\frac{B}{R^{12}}$ , dando lugar a la ecuación 20, conocida como Potencial de Lennard Jones, véase la figura 4-1.

$$U(R) = \frac{B}{R^{12}} - \frac{A}{R^6} \quad [20]$$

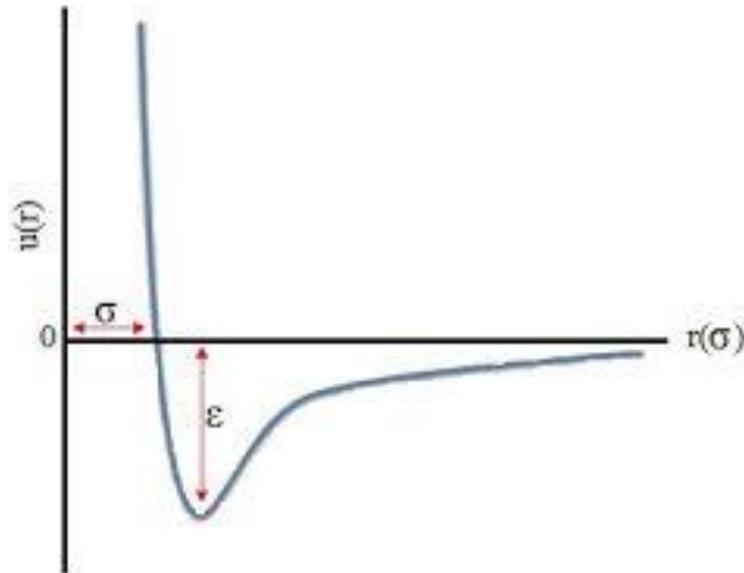
Los parámetros A y B son empíricos y mide la energía potencial de dos átomos inerte separados a una distancia R. Una expresión más general y adimensional de dicho potencial es la ecuación 21, y se utiliza para explicar las interacciones moleculares.

$$U(R) = 4\epsilon \left( \frac{\sigma}{R} \right)^{12} - 4\epsilon \left( \frac{\sigma}{R} \right)^6 \quad [21]$$

Donde  $\sigma$  es la distancia a la cual el potencial es nulo y  $\epsilon$  es el mínimo valor de energía (Campos, 2014). Este potencial tiene:

Un término repulsivo,  $(1/R)^{12}$  que se produce a distancias cortas, debido al intercambio electrónico por el solapamiento de las capas electrónicas externas y en gran parte la repulsión se debe al principio de exclusión de Pauli.

Un término atractivo de largo alcance,  $-(1/R)^6$  debido a las interacciones de Van der Waals, a distancias intermedias se da un balance entre las fuerzas atractivas y repulsivas (Delgado Tellez, 2012).



**Figura 4-1:** Potencial de Lennard Jones.

Fuente: (Sztrajman, 2018)

A partir de esta información, se puede realizar un análisis cualitativo de la energía potencial del cristal.

En el caso más sencillo,  $N = 2$  representa una molécula diatómica en donde se debe cumplir lo siguiente:

- La referencia del caso se toma cuando las moléculas están separadas al infinito, es decir, no hay interacción entre ellos.
- La energía potencia del sistema cristalizado debe ser menor que la energía potencial del sistema aislado.  $U(R_0) < U(R \rightarrow \infty)$

El punto de equilibrio debe ser mínimo, esto debido a que no se acercan indefinidamente. La siguiente expresión se cumple si se fija un átomo en el origen y el otro átomo se acerca al infinito

$$\begin{aligned} U(R > R_0) > U(R_0) \\ U(R < R_0) > U(R_0) \end{aligned} \Rightarrow U(R_0); \text{mínimo}$$

En el caso de existir  $N$  átomos en el cristal la energía potencial total es:

$$U_{total} = \frac{1}{2}N(4\epsilon) \left[ \sum_j \left( \frac{\sigma}{p_{ij}R} \right)^{12} - \sum_j \left( \frac{\sigma}{p_{ij}R} \right)^6 \right] \quad [22]$$

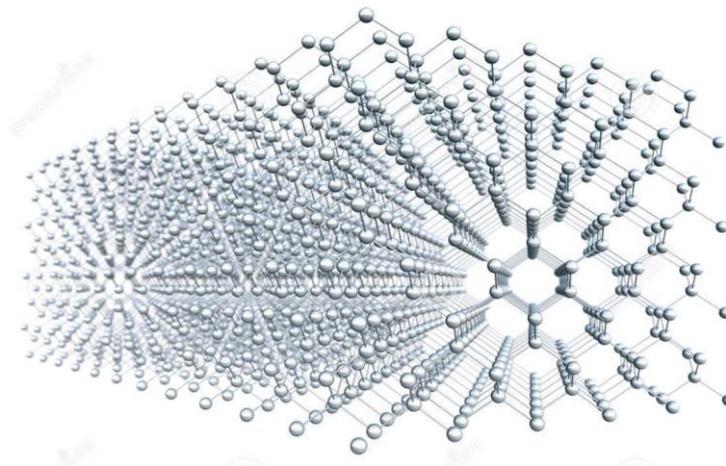
Donde  $p_{ij}R$  es la distancia entre el átomo de referencia  $i$  y cualquier átomo  $j$  expresada en términos de la distancia  $R$  entre los vecinos más cercanos.

Los valores de las sumatorias hallados de manera experimental para estructuras FCC son:  $\sum_j p_{ij}^{-12} = 12,13188$  y  $\sum_j p_{ij}^{-6} = 14,45392$ .

Para obtener este potencial en los gases inertes se realiza un Barrido de energía potencial o PES.

### 1.5.3 Estructura Cristalina

Se define como cristal a un arreglo de átomos que se caracteriza por ser *periódico*, es decir que una estructura se itera constantemente teniendo simetría y traslación definida, en estructuras los átomos o moléculas se disponen en puntos de equilibrio conformando una red espacial geométrica y tridimensional (véase figura 2-2).



**Figura 5-1:** Estructura cristalina del diamante.

Fuente: (Vizcont, 2018)

La organización de todos los cristales converge en que la unidad que se repite en todas las direcciones obedece a la relación vectorial de traslación (Pane, Fikri y Ritonga, 2018, pp. 1689-1699), dada por la ecuación 23:

$$\vec{R} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \quad [23]$$

Siendo:

$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ : Vectores fundamentales de traslación

$n_1, n_2, n_3$ : Números enteros arbitrarios positivos, negativos o cero.

En consecuencia, por la relación de traslación, al existir un desplazamiento, actúa sobre un nuevo vector ( $\vec{r}$ ), el vector resultante ( $\vec{r}'$ ) se define por la ecuación 2:

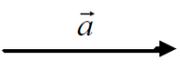
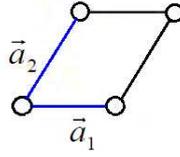
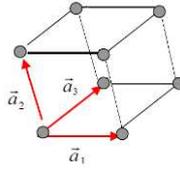
$$\vec{r}' = \vec{R} + \vec{r} = \vec{r} + n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \quad [24]$$

Y este debe ser idéntico al punto caracterizado por el vector  $\vec{r}$ , si esto no ocurriera el cristal sería amorfo, es decir que no sería periódico ni simétrico (Pane, Fikri y Ritonga, 2018, pp. 1689-1699; Kittel y McEuen, 1976).

### 1.5.3.1 Redes cristalinas

Una red cristalina es un arreglo de puntos periódico, se puede obtener a partir de vectores en un espacio discreto, la tabla 2-1 muestra los diferentes tipos de redes con sus propiedades.

**Tabla 2-1:** Tipos de redes cristalinas según su dimensión.

Esquema de red	Tipo de celda	Dimensión	Vector base	Vector de traslación	Volumen de celda
	Segmento	1D	$\vec{a}$	$n\vec{a}; n \in \mathbb{Z}$	$\Omega_0 = a$
	Paralelogramo	2D	$\vec{a}_1, \vec{a}_2$	$n_1\vec{a}_1, n_2\vec{a}_2;$ $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$	$\Omega_0 = (a_1 \times a_2)$
	Paralelepípedo	3D	$\vec{a}_1, \vec{a}_2,$ $\vec{a}_3$	$n_1\vec{a}_1, n_2\vec{a}_2,$ $n_3\vec{a}_3;$ $n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$	$\Omega_0 =$ $(a_1 \times a_2) \cdot a_3$

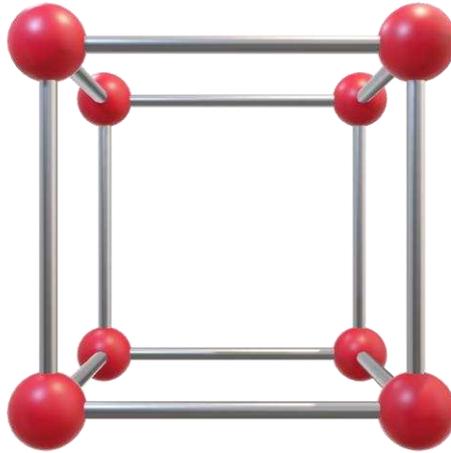
**Fuente:** (Pane, Fikri y Ritonga, 2018).

**Realizado por:** Amaguaña, 2021.

Así también, existe una variedad de redes tridimensionales, pero es importante tener en cuenta las de tipo cúbica debido a que son importantes para el estudio de los cristales de gases inertes.

### 1.5.3.2 Redes tridimensionales cúbicas

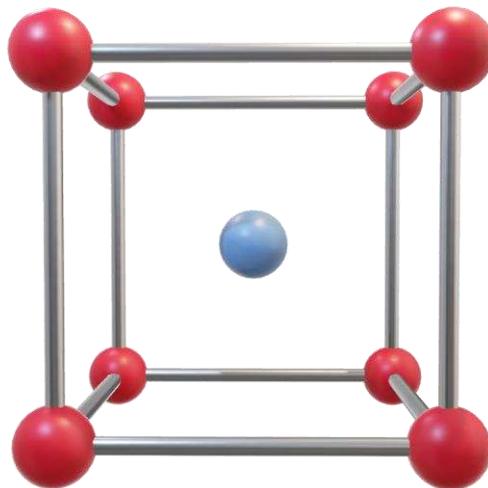
La red cúbica simple (SC), figura 6-1, no se presenta en la naturaleza, pero es importante porque da origen a estructuras de interés.



**Figura 6-1:** Estructura de la red cúbica simple (SC)

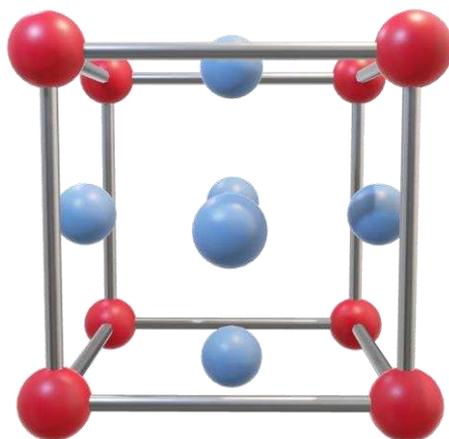
**Fuente:** elaboración propia.

Por ejemplo, si se introduce un átomo en el centro de la estructura simple o primitiva, se obtiene la red cúbica centrada en el cuerpo (BCC) como se muestra en la figura 7-1, los elementos que cristalizan de esta forma son por ejemplo el Hierro, Cromo, Titanio y Molibdeno. Por otra parte, al introducir átomos en el centro de cada cara se da lugar a la red cúbica centrada en las caras (FCC), los gases nobles cristalizan de esta manera, véase la figura 8-1.



**Figura 7-1:** Estructura de una red cúbica centrada en el cuerpo (BCC).

**Fuente:** elaboración propia.



**Figura 8-1:** Estructura de una red cúbica centrada en las caras (FCC).

**Fuente:** elaboración propia.

### 1.5.3.3 Cristales de gases inertes

Los cristales de los gases inertes están caracterizados por enlaces de tipo van der Waals, por lo que forman los cristales más sencillos y la distribución electrónica de los átomos en el cristal se asemeja a la de los átomos libres. Estos cristales son aislantes, transparentes y por la capa de valencia llena que poseen los átomos, tienen puntos de fusión bajos; Todos los elementos de este grupo, con excepción del Helio, se empaquetan formando una estructura cristalina de tipo FCC (Kittel y McEuen, 1976). En la tabla 3-1 se muestran algunas propiedades de los cristales de estos elementos evidenciando el comportamiento de estos.

**Tabla 3-1:** Propiedades de los cristales de gases raros, datos extrapolados a presión nula y 0 K.

Elemento	Distancia entre los vecinos más cercanos $\text{\AA}$	Energía de Cohesión		Parámetros del potencial de L-J	
		$\text{kJ/mol}$	$\text{eV/átom}$	$\epsilon, 10^{-16} \text{erg}$	$\sigma, \text{en } \text{\AA}$
Helio	A presión nula es líquido			14	2,56
Neón	3,13	1,88	0,02	50	2,74
Argón	3,76	7,74	0,080	167	3,40
Kriptón	4,01	11,2	0,116	225	3,65
Xenón	4,35	16,0	0,17	320	3,98

**Fuente:** (Kittel y McEuen, 1976).

**Realizado por:** Amaguaña, 2021.

#### **1.5.4 Método Montecarlo**

El método Montecarlo, simulación Montecarlo o simplemente MC, es un conjunto de técnicas por las cuales se obtienen soluciones de problemas matemáticos o físicos a través de repetidas pruebas aleatorias. Así también da solución a problemas matemáticos (estocásticos o deterministas) con muestreos estadísticos por computadora (Simulación método Montecarlo, 2005, pp. 1-13).

En dinámica de fluidos se modela un gas real a partir de miles de millones de partículas simuladas que se generan en grupos o celdas que en conjunto conformarán el sistema, las partículas se generan de acuerdo a parámetros como densidad, temperatura, entre otros (Ungson et al., 2016, pp. 2-3). Es importante decir que todos los factores externos o internos como la presión, volumen o el número de moléculas del sistema pueden ser controlados por el usuario, creando así entornos más realistas y específicos.

##### **1.5.4.1 Método Metrópoli**

El método metrópoli es el algoritmo más popular entre las técnicas de MC, genera una cadena de Markov creando configuraciones aleatorias cuya función límite tiene una función determinada dependiendo del sistema en el que se desarrolla la simulación. Una cadena de Markov se define como un proceso estocástico en el que la probabilidad condicional de pasar de un estado determinado a otro depende únicamente del valor de la variable en un instante anterior cualquiera. Esta generalización permite que el método metrópoli pueda ser aplicado a dimensiones múltiples o distribuciones que no están estandarizadas (Villar, 2013).

#### **1.5.5 Dinámica Molecular (DM)**

La dinámica molecular es un tipo de simulación molecular computacional que se utiliza con el fin de analizar un sistema (físico, químico o biológico), a través del tiempo. Este método permite calcular las fuerzas interatómicas, energía libre, entropía, temperaturas de cambio de fase, así como describir el comportamiento de macromoléculas, entre otras, mediante el uso de ecuaciones de movimiento de Newton (Lozano Aponte y Scior, 2014, pp. 86-88).

Para utilizar este método se necesitan la configuración inicial del sistema a analizar, como las posiciones iniciales de cada átomo que conforman el mismo y sirve para generar las trayectorias de los N elementos a través de la integración numérica directa de las ecuaciones de movimiento. Esta técnica computacional se utiliza en los llamados fluidos de Lennard-Jones, como lo son los Gases Nobles, ya que este sistema está constituido esencialmente por átomos esféricos que no llegan a establecer enlaces más fuertes como los covalentes, por lo que presentan interacciones

débiles de carácter repulsivo. Por lo tanto, un fluido con estas características se puede considerar como un arreglo de partículas esféricas y sus características como el tamaño o la masa dependen exclusivamente del gas noble a analizar además que las condiciones iniciales pueden ser consideradas al azar. DM permite observar la evolución del sistema a través del tiempo que se mide en picosegundos (ps), en contraste con otros métodos de simulación molecular que solo toleran una etapa o un estado del sistema. Otra de las ventajas de la dinámica molecular es que, al considerar las velocidades de los átomos, también se pueden calcular las energías del sistema como cinética, potencial o libre. Cabe destacar que el tiempo de simulación va a depender de la complejidad química del sistema (Ungson et al., 2016, pp. 2-3; Lozano Aponte y Scior, 2014, pp. 86-88).

La Dinámica molecular consta de distintas etapas como sigue:

- 1) Etapa preliminar: en esta primera etapa se procede a preparar la muestra, establecer la configuración inicial constituida por un  $n$  número de átomos, además de las condiciones de equilibrio.
- 2) Etapa de equilibrio: consecuentemente se lleva al sistema al equilibrio donde la energía permanece casi constante mediante esquemas o ensambles de simulación como (canónico, microcanónico, isotérmico, isobárico).
- 3) Etapa de simulación: tiempo de ejecución, paso que requiere mayor tiempo de ejecución al pasar de ps a horas o días donde se calculan energías, fuerzas o propiedades físicas y químicas que se deseen.
- 4) Etapa final: para concluir se obtienen los resultados en algunos casos mediante una interfaz gráfica (Lozano Aponte y Scior, 2014, pp. 86-88).

#### 1.5.5.1 *Materials Studio*

Materials Studio es un entorno completo desarrollado por BIOVIA, para un modelado y simulación que sirve para presagiar y entender el comportamiento de estructuras atómicas y moleculares de un material. Este programa permite a los investigadores realizar modelos de optimización de materiales en un entorno con un costo mínimo previo a realizar pruebas físicas. Por otro lado, esta interfaz ofrece una variedad de módulos en los que pueden ser adaptados los sistemas, entre estos tenemos:

- Herramientas cuánticas: Materials Studio brinda aplicaciones de mecánica cuántica validadas, eficientes y factibles de usar basadas en la teoría funcional de la densidad (DFT), QM / MM híbridos y métodos semi-empíricos. Las técnicas de mecánica cuántica producen resultados termodinámicos, cinéticos y estructurales precisos, lo que proporciona un complemento eficiente para la experimentación. Así también, los métodos ofrecen

información sobre los procesos a nivel atómico, lo que le permite comprender la naturaleza de un proceso (por qué y cómo). Las aplicaciones incluyen materiales de energía alternativa, catálisis, sensores y semiconductores.

- Herramientas de simulación clásica: Materials Studio ofrece una variedad de métodos basados en las interacciones clásicas entre átomos y moléculas, esto incluye Dinámica Molecular, Lattice Dinámica y varios métodos basados en Montecarlo, así como la provisión de campos de fuerza.
- Herramientas de simulación a mesoescala: Los métodos de microescala en Materials Studio se basan en un enfoque de grano grueso, mediante el cual los grupos de átomos se reemplazan por esferas. Debido a las limitaciones de las herramientas clásicas en cuanto a las escalas de tiempo y longitud, estas herramientas permiten modelar el comportamiento atómico sin inconvenientes.
- Herramientas estadísticas: ideales para seleccionar compuestos rápidamente al relacionar faces moleculares directamente con cantidades observadas experimentalmente.
- Herramientas analíticas y de cristalización: sirven para investigar, predecir y modificar la estructura y el crecimiento de los cristales (Studio, 2017).

#### 1.5.5.2 *Psi4*

Psi4 es un programa de estructura electrónica ab initio que proporciona métodos como Hartree-Fock, teoría de densidad funcional, interacción de configuración y teoría de clústeres acoplados. La conversión del código de grado mayor a un módulo de Python por lo que Psi4 ahora se puede usar en flujos de trabajo complicados junto con otras herramientas de Python. Así también se han añadido algunas propiedades novedosas mediante bibliotecas que brindan un simple ingreso a técnicas como el ajuste de densidad, la descomposición de Cholesky y los denominadores de Laplace. El sistema de compilación se ha reescrito por completo para simplificar la interoperabilidad con elementos de programa independientes y reutilizables para la química cuántica (Parrish et al., 2017, pp. 3185-3197).

## CAPÍTULO II

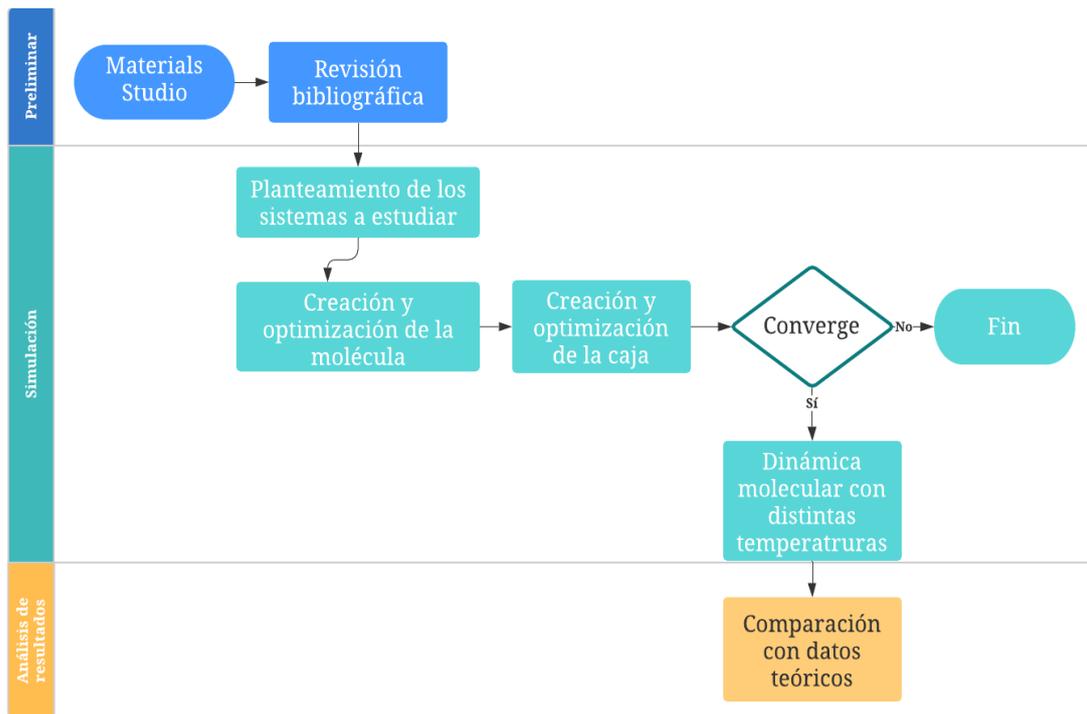
### 2 MARCO METODOLÓGICO

#### 2.1 Tipo de investigación.

El presente proyecto de investigación muestra una metodología de investigación mixta debido a que se obtienen gráficos y datos numéricos, usando el objetivo teórico, con un nivel de profundización en el objeto de estudio descriptivo y explicativo.

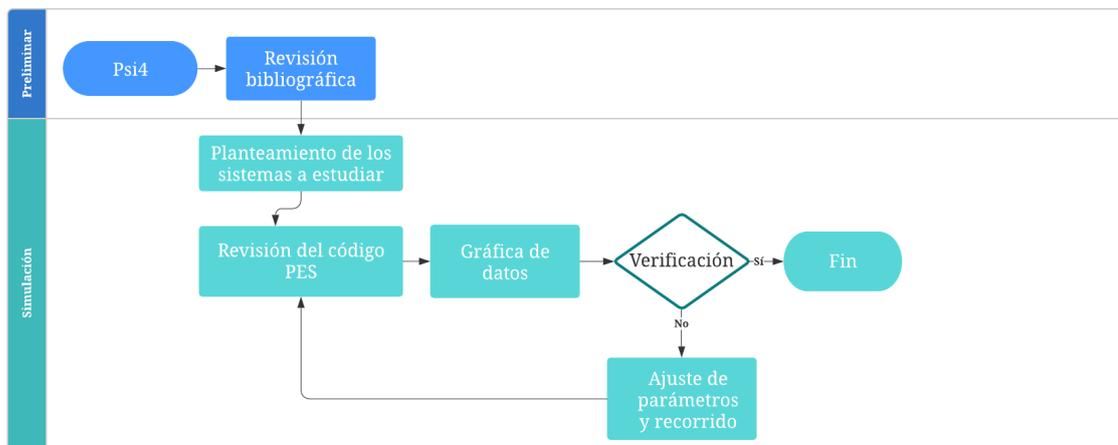
El proyecto es de carácter teórico computacional ya que a través de la manipulación de variables no experimental y mediante el uso de los programas Materials Studio y Psi4, se pretende obtener datos teóricos de los gases nobles, estudiando interacciones de tipo Van der Waals, con una inferencia inductiva que permite la obtención de los parámetros físicos de los sistemas, en un periodo temporal longitudinal, ya que una actividad depende de otra.

## 2.2 Diseño de la investigación.



**Gráfico 1-2:** Diseño de investigación en Materials Studio.

Realizado por: Amaguaña, 2021



**Gráfico 2-2:** Diseño de investigación en Psi4.

Realizado por: Amaguaña, 2021.

### 2.2.1 Teórico Computacional

#### 2.2.1.1 Identificación de variables

- Variable independiente: herramientas computacionales y simulación Monte Carlo.
- Variables dependientes: propiedades físicas de los sistemas de He, Ar, Ne, Kr y Xe.

### 2.2.1.2 Planteamiento de hipótesis

La utilización de herramientas computacionales y simulación Monte Carlo, permitirá a nivel molecular conocer las propiedades físicas de los sistemas de He, Ar, Ne, Kr y Xe tales como: optimización geométrica, propiedades electrónicas, dinámica molecular y PES.

### 2.2.1.3 Matriz de consistencia

**Tabla 1-2:** Matriz de consistencia.

<b>PROBLEMA</b>	<b>OBJETIVOS</b>	<b>HIPÓTESIS</b>	<b>VARIABLES</b>
<b>Problema general:</b> Sistemas moleculares de gases nobles: He, Ne, Ar, Kr y Xe.	<b>Objetivo general:</b> Simular las interacciones de tipo Van der Waals en gases nobles: He, Ne, Ar, Xe y Kr.	<b>Hipótesis general:</b> La utilización de herramientas computacionales y simulación Monte Carlo, permitirá a nivel molecular conocer las propiedades físicas de los sistemas de He, Ar, Ne, Kr y Xe tales como: optimización geométrica, energía de enlace, dinámica molecular y PES.	<b>Variable independiente:</b> Sistemas moleculares de los gases nobles: He, Ne, Ar, Xe y Kr.
Problemas específicos: Modelado de sistema. Simulación de datos. Análisis teórico.	Objetivos específicos: Modelar el sistema molecular de cada gas noble He, Ar, Ne, Xe y Kr. Emplear dinámica molecular mediante simulación de tipo Montecarlo.	Hipótesis específicas: Recrear un escenario computacional de cada gas noble: He, Ne, Ar, Xe y Kr. Utilizando la dinámica molecular obtener propiedades físicas de los sistemas de gases nobles.	Indicadores: Modelado del sistema. Simulación de datos. Comparación teórica. Variables dependientes: Propiedades físicas de los sistemas de He, Ar, Ne, Xe y Kr.

	Realizar un cuadro comparativo de parámetros físicos como energía de enlace y propiedades electrónicas de He, Ar, Ne, Xe y Kr.	Comparar los datos obtenidos con los reportados en la literatura.	Obtención de datos: optimización geométrica, energía de enlace y dinámica molecular de los sistemas de los gases nobles.
--	--	---	--

Realizado por: Amaguaña, 2021.

#### 2.2.1.4 Operacionalización de variables

**Tabla 2-2:** Operacionalización de variables.

VARIABLE	CONCEPTO	INDICADOR	INSTRUMENTO
<b>Variable independiente:</b> Herramientas computacionales y simulación Monte Carlo.	Modelar el sistema se define como el diseño del conjunto molecular que va a ser estudiado, en este caso de cada gas noble.	Construcción del sistema molecular y minimización de energía.	Simulación en Materials Studio para describir simulaciones de Montecarlo y Dinámica molecular

Variable dependiente: Propiedades físicas de los sistemas de He, Ar, Ne, Kr y Xe.	El proyecto de investigación se asocia con los sistemas moleculares de los gases nobles, para obtener propiedades físicas de los mismos como optimización geométrica, energía de enlace y su dinámica molecular, para posteriormente realizar una comparación de los datos obtenidos con	Comparación de los datos obtenidos con los de literatura, comprobando la funcionalidad del código.	Utilización de la herramienta Psi4, para complementar la parte computacional y la visualización de gráficas del potencial de Lennard Jones
--	--	--	--

	los reportados en la literatura.		
--	----------------------------------	--	--

**Realizado por:** Amaguaña, 2021.

#### *2.2.1.5 Localización del estudio*

Se plantea que este proyecto de investigación se realizará en la ciudad de Riobamba, bajo la dirección del docente tutor, con reuniones virtuales o presenciales en la Facultad de Ciencias de la ESPOCH.

#### *2.2.1.6 Población de estudio*

La población de estudio serán los sistemas moleculares de moléculas diatómicas, triatómicas, tetatómicas y pentatómicas de los gases nobles como: He, Ar, Ne, Xe y Kr.

#### *2.2.1.7 Tamaño de muestra*

Dadas las características del estudio, el tamaño de muestra coincide con la población.

#### *2.2.1.8 Método de muestreo*

El método de muestreo estuvo bajo la responsabilidad del investigador tomando en cuenta la universalidad de las interacciones de Van der Waals.

#### *2.2.1.9 Técnicas de recolección de datos*

La técnica utilizada para recolección de datos consiste en hojas electrónicas con extensión .out y .stp.

#### *2.2.1.10 Análisis estadístico*

El análisis estadístico se realizó en base a la comparación de los valores de los vecinos más cercanos obtenidos en la literatura especializada.

## CAPÍTULO III

### 3 MARCO DE RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS

En este apartado, se analizan y discuten los resultados obtenidos en la investigación, primero se analizarán los valores obtenidos con el Software Materials Studio, para posteriormente revisar e interpretar las gráficas obtenidas mediante el código abierto de Psi4.

#### 3.1 Desarrollo de la propuesta

Como se mencionó, para la investigación se usaron dos entornos computacionales distintos que proporcionan datos cualitativos y cuantitativos, en esta sección se presentan los procedimientos a seguir con cada entorno.

##### 3.1.1 Algoritmo en Materials Studio

La primera parte del presente proyecto se realizó en Materials Studio, el proceso específico se detalla a continuación.

Como etapa preliminar se decidió los sistemas moleculares a estudiar, de cada gas noble se realizó una simulación completa de moléculas diatómicas, triatómicas, tetratómicas y pentatómicas.

- Construcción de la molécula con la herramienta Sketch Atom.
- Optimización de la molécula mediante el módulo Forcite, con la herramienta Calculation, donde se escoge la función Geometry Optimization. El número de pasos a trabajar es de 1000000 para obtener resultados más aproximados.
- Creación de la caja con Amorphous Cell Tools, con la herramienta Calculation, donde se incluirán distintos números de moléculas: 10, 100, 1000, 5000 y 10000 en diferentes procesos.
- Segunda optimización geométrica con el mismo módulo especificando la distancia de corte para evitar los fenómenos de borde.
- Etapa de dinámica molecular en donde mediante la función Dynamics de la herramienta Calculation del módulo Forcite, obtenemos los resultados para la caja a distintas temperaturas como 300, 450, 600 y 750K.
- Finalmente, como paso adicional se calculan los vecinos más cercanos con la herramienta Close Contacts y la Densidad de Energía de Cohesión en el sistema obtenido mediante optimización geométrica.

### 3.1.2 Algoritmo en PSI4.

La segunda parte del proyecto se centra en hallar un PES para cada molécula diatómica, este proceso se lo realiza con el software libre PSI4 complemento de Phyton en el sistema operativo LINUX. La ventaja de este programa es que PSI4 posee un repositorio de códigos que pueden ser modificados para el uso del operador. El proceso es sencillo y se particulariza en las líneas siguientes:

- Una vez encontrado el código en el repositorio, se lo copia y modifica en un editor de texto, para ser guardado con extensión *.dat*. En el Anexo A se encuentra el archivo de entrada o input file para realizar un PES en Psi4.
- Posteriormente se llama al archivo por el terminal de UBUNTU, y finalmente mostrarán los resultados.

Cabe destacar que en la ubicación donde se encuentra el archivo de entrada se creará otro documento con el mismo nombre, pero terminando en la extensión *.out*, un ejemplo del output file se encuentra en el Anexo B.

## 3.2 Resultados

Tras haber realizado las simulaciones en el software Materials Studio, se obtienen valores como resultados que pueden ser comparados con los datos existentes en libros y que se sintetizan en las tablas presentadas en la parte posterior.

**Tabla 1-3:** Comparación entre los datos de la Distancia entre los vecinos más cercanos.

Distancia entre los vecinos más cercanos (CC)					
	He	Ne	Ar	Xe	Kr
Software (Å)	Líquido	3,08	3,76	4,04	4,32
Literatura (Å)	Líquido	3,13	3,76	4,01	4,35

Realizado por: Amaguaña, 2021.

La tabla 1-3 muestra la comparación de los CC, entre los resultados que arroja el software y los datos de la literatura (Kittel y McEuen, 1976), se puede observar que los datos son relativamente similares y presentan un error menor al 1%.

La optimización geométrica (OG) es uno de los datos más importantes dentro de una simulación ya que halla la configuración espacial del sistema con la energía mínima, dato que se necesita para los diversos procesos como DM, se debe hacer una OG tanto en la molécula como en el

sistema ya que mediante este proceso se conoce si el sistema converge o no. La siguiente tabla muestra los datos de OG para cada molécula y sistema de 100 moléculas descritos.

**Tabla 2-3:** Valores de Optimización geométrica molecular y del sistema en eV.

	Optimización geométrica de la molécula (eV)				Optimización geométrica del sistema (eV)			
	2	3	4	5	2	3	4	5
He	-0,00087	-0,00178	-0,00203	-0,00272	-1,1542	-1,4680	-2,3690	-3,0763
Ne	-0,00305	-0,00915	-0,00942	-0,02207	-4,8700	-7,4243	-9,6905	-12,5351
Ar	-0,01056	-0,02163	-0,03259	-0,04385	-18,7084	-28,0374	-37,4534	-47,0596
Kr	-0,01732	-0,04066	-0,05354	-0,07167	-26,7411	-40,9310	-54,9807	-69,1974
Xe	-0,01957	-0,05869	-0,06474	-0,08097	-28,6622	-43,9721	-59,8317	-74,4735

**Realizado por:** Amaguaña, 2021.

Así también en la tabla 3-4 se muestran los datos de DCE que es característico de cada elemento y está íntimamente relacionada con la energía de cohesión que se muestra en el capítulo 1.

La optimización geométrica proporciona datos energéticos en los que se toma en cuenta todas las energías presentes en el sistema molecular, entre ellas se encuentra la energía de enlace que en este caso es cero ya que la interacción predominante que muestra el software es la de Van der Waals y es la única energía presente tanto en la molécula como en el sistema, el Anexo C muestra uno de los archivos de salida de estos sistemas en los que claramente se puede observar que la energía no enlazante es igual a la de Van der Waals y esta a su vez corresponde con la energía total o fundamental de la molécula o sistema.

**Tabla 3-3:** Resultados de Energía cohesiva propio de cada elemento.

	Densidad de Energía Cohesiva (J/m <sup>3</sup> )			
	2	3	4	5
He	1,7E+07	1,2E+07	1,6E+07	1,7E+07
Ne	1,5E+08	1,4E+08	1,4E+08	1,4E+08
Ar	3,8E+08	3,8E+08	3,7E+08	3,7E+08
Kr	2,8E+08	2,8E+08	2,8E+08	2,9E+08
Xe	2,1E+08	2,0E+08	1,8E+08	2,0E+08

**Realizado por:** Amaguaña, 2021.

Por otro lado, la dinámica molecular realizada con sistemas moleculares de 100 elementos se presenta en las tablas de abajo.

**Tabla 4-3:** Valores de Dinámica molecular a 450K para los distintos sistemas moleculares.

<b>Dinámica molecular a 300K</b>								
	<b>E. total (eV)</b>		<b>E. cinética (eV)</b>		<b>E. potencial(eV)</b>		<b>Volumen (Å)</b>	
	<b>I</b>	<b>F</b>	<b>I</b>	<b>F</b>	<b>I</b>	<b>F</b>	<b>I</b>	<b>F</b>
He2	6,51747	7,81714	7,65202	7,82041	-1,1346	-0,0033	10551	2884360
He3	10,0293	11,1445	11,4973	11,1467	-1,468	-0,0022	15826,5	4334375
He4	12,9735	15,4349	15,3425	15,4374	-2,369	-0,0025	21102	5783116
He5	16,1114	21,4908	19,1878	19,3435	-3,0763	-0,0027	26377,5	7231900
Ne2	2,78201	7,46059	7,65202	7,46846	-4,87	-0,0079	5115,73	2877914
Ne3	4,07292	11,6696	11,4973	11,6838	-7,4243	-0,0142	7673,59	4324770
Ne4	5,65205	15,0094	15,3425	15,0265	-9,6905	-0,0241	10231,5	5770744
Ne5	6,64049	18,4198	19,1878	18,4186	-12,547	0,00116	12789,3	7217382
Ar2	-11,056	7,19614	7,65202	7,26416	-18,708	-0,068	7624,74	2799421
Ar3	-16,532	11,2748	11,4973	11,3236	-28,029	-48,762	11437,1	4209568
Ar4	-22,111	14,912	15,3425	14,9575	-37,453	-0,0885	15249,5	5620330
Ar5	-27,872	18,7293	19,1878	18,8369	-47,06	-0,1075	19061,8	7037886
Kr2	-19	-8,5113	7,65202	7,23398	-27,171	-15,747	14725,2	18991,8
Kr3	-29,497	-11,329	11,4973	11,0651	-40,994	-22,394	22087,8	28959,8
Kr4	-39,638	-14,06	15,3425	15,345	-54,981	-29,405	29450,4	39718,6
Kr5	-50,01	17,5488	19,1878	18,4466	-69,197	-0,8978	36813	2546115
Xe2	-21,01	-13,905	7,65202	7,56022	-28,662	-21,466	20864	18514,2
Xe3	-32,951	-20,663	11,4973	11,2885	-43,972	-31,951	31296	27906,5
Xe4	-44,489	-25,714	15,3425	15,6867	-59,875	-41,401	41728	38449
Xe5	-41,806	-32,231	19,1878	19,1185	-60,994	-51,35	52160	48106,3

Realizado por: Amaguaña, 2021.

**Tabla 5-3:** Valores de Dinámica molecular a 450K para los distintos sistemas moleculares.

<b>Dinámica molecular a 450K</b>								
	<b>E. total (eV)</b>		<b>E. cinética (eV)</b>		<b>E. potencial (eV)</b>		<b>Volumen (Å)</b>	
	<b>I</b>	<b>F</b>	<b>I</b>	<b>F</b>	<b>I</b>	<b>F</b>	<b>I</b>	<b>F</b>
He2	10,3435	11,6106	11,478	11,6068	-1,1346	0,00378	10551	4313367
He3	15,7779	16,4188	17,2459	16,4182	-1,468	0,00056	15826,5	6480557
He4	20,6447	22,9486	23,0138	22,9503	-2369	-0,0017	21102	8,7E+08
He5	25,7053	28,8651	28,7816	28,8668	-3,0763	-0,0017	26377,5	1,1E+07
Ne2	6,60803	11,3835	11,478	11,3852	-4,87	-0,0016	5115,73	4312490

Ne3	9,82154	17,0651	17,2459	17,0285	-7,4243	-0,0064	7673,59	6479954
Ne4	13,3233	22,5641	22,9708	22,555	-9,6905	0,0095	10231,5	8645906
Ne5	16,2344	30,8547	28,7816	30,8568	-12547	-0,0021	12789,3	1,1E+07
Ar2	-7,2304	11,0208	11,478	11,0599	-18,708	-0,039	7624,74	4279336
Ar3	-10,783	15,8065	17,2459	15,8716	-28,029	-0,0651	11437,1	6428380
Ar4	-14,44	23,5204	23,0138	23,5698	-37,453	-0,0495	15249,5	8578313
Ar5	18,278	28,1124	28,7816	28,1657	-47,06	-0,0532	19061,8	1,1E+07
Kr2	-15,263	10,2475	11,478	10,3493	-22,441	-0,1017	14725,2	4186918
Kr3	-23,748	17,4073	17,2459	17,5445	-40,994	-0,1373	22087,8	6297597
Kr4	-31,967	23,6933	23,0138	23,8647	-54,981	-0,1714	29450,4	8403892
Kr5	-40,416	29,0781	28,7816	29,2128	-69,197	-0,1347	3613,01	1,1E+07
Xe2	-17,184	10,4298	11,478	10,5058	-28,662	-0,076	20864	4127052
Xe3	-26,726	16,6122	17,2472	16,727	-43,972	-0,1148	31296	6205388
Xe4	-36,818	23,2713	23,0138	23,4533	-59,832	-0,1821	41728	8283274
Xe5	-32,212	29,4264	28,7816	29,6111	-60,994	-0,1847	52160	1E+07

Realizado por: Amaguaña, 2021.

**Tabla 6-3:** Valores de Dinámica molecular a 600K para los distintos sistemas moleculares.

Dinámica molecular 600K								
	E. total (eV)		E. cinética (eV)		E. potencial(eV)		Volumen (Å)	
	I	F	I	F	I	F	I	F
He2	14,1695	16,3773	15,304	16,3781	-1,1346	-0,0008	10551	5742150
He3	21,5265	21,6609	22,9946	21,662	-1,468	-0,0011	15826,5	8627206
He4	28,316	35,8727	30,685	35,8743	-2,369	-0,0017	21102	1,2E+07
He5	35,2991	35,7226	38,3755	35,7255	-3,0763	-0,0029	26377,5	1,4E+07
Ne2	10,434	16,2734	15,304	16,2775	-4,87	-0,0041	5115,73	5742471
Ne3	15,5702	24,0722	22,9946	24,0778	-7,4243	-0,0055	7673,59	8628753
Ne4	20,9945	30,5043	30,685	30,509	-10,98	-0,0047	10231,5	1,2E+07
Ne5	25,8283	38,1392	38,3755	38,1468	-12,547	-0,0075	12789,3	1,4E+07
Ar2	-3,4044	14,1192	15,304	14,1284	-18,708	-0,0092	7624,74	5727331
Ar3	-5,0344	23030,4	22,9946	23,0731	-28,029	-0,0427	11437,1	8607427
Ar4	-6,7684	31,602	30,685	31,6403	-37,453	-0,0384	15249,5	1,1E+07
Ar5	-8,6841	38,5111	38,3755	38,5535	-47,06	-0,0425	19061,8	1,4E+07
Kr2	11,4371	15,7772	15,304	15,7628	-26,741	0,01436	14725,2	5666007
Kr3	-18	21,2498	22,9946	21,3081	-40,994	-0,0583	22087,8	8534728

Kr4	-24,296	29,8387	30,685	29,9449	-54,981	-0,1062	29450,4	1,1E+07
Kr5	-30,822	39,5491	38,3755	39,7053	-69,197	-0,1562	36813	1,4E+07
Xe2	-13,358	15,0363	15,304	15,087	-28,662	-0,0507	20864	562886
Xe3	-20,978	22,4105	22,9946	22,5257	-43,972	-0,1152	31296	8492799
Xe4	-29,147	30,3972	30,685	30,4866	-59,832	-0,0894	41728	1,1E+07
Xe5	22,6185	37,8135	38,3755	38	-60,994	-0,1865	52160	1,4E+07

Realizado por: Amaguaña, 2021.

**Tabla 7-3:** Valores de Dinámica molecular a 600K para los distintos sistemas moleculares.

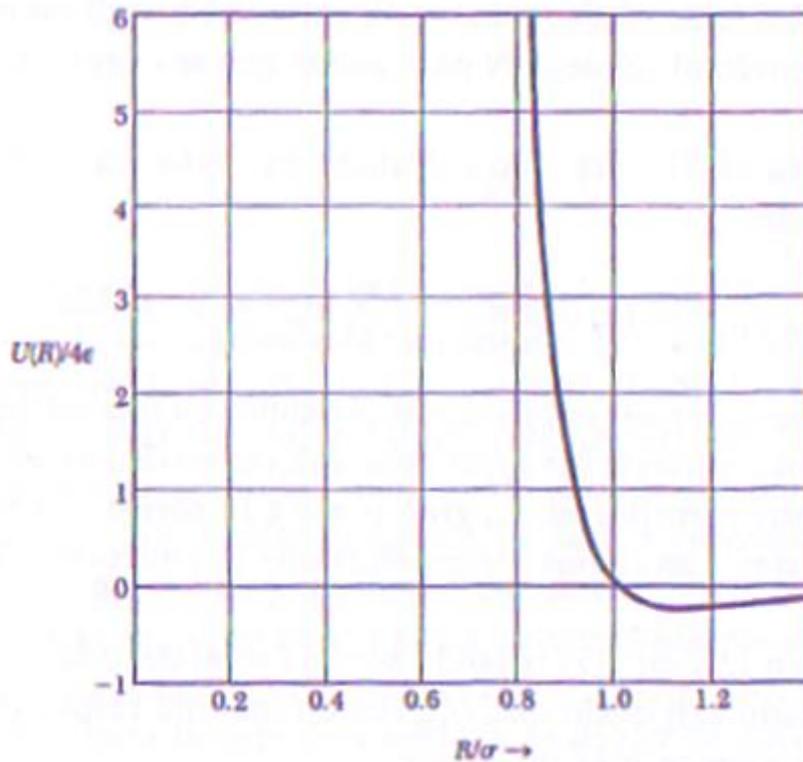
<b>Dinámica molecular 750K</b>								
	<b>E. total (eV)</b>		<b>E. cinética (eV)</b>		<b>E. potencial (eV)</b>		<b>Volumen (Å)</b>	
	<b>I</b>	<b>F</b>	<b>I</b>	<b>F</b>	<b>I</b>	<b>F</b>	<b>I</b>	<b>F</b>
He2	17,9955	18,0809	19,1301	18,0812	-1,1346	-0,0003	10551	7170260
He3	27,2752	26,8841	28,7432	26,8846	-1,468	-0,0006	15826,5	1,1E+07
He4	36,1163	39,5784	38,3563	39,5791	-2,369	-0,0007	21102	1,4E+07
He5	44,893	41,4256	47,9694	41,4206	-3,0763	0,00503	26377,5	1,8E+07
Ne2	14,2601	19,7279	19,1301	19,7285	-4,87	-0,0006	5115,73	7172830
Ne3	21,3188	28,389	28,7432	28,3911	-7,4243	-0,0021	7673,59	1,1E+08
Ne4	28,6658	38,3881	38,3563	38,3938	-9,6905	0,00568	10231,5	1,4E+07
Ne5	35,4221	45,1138	47,9694	45,119	-12,547	-0,0052	12789,3	1,8E+07
Ar2	0,42162	18,4356	19,1301	18,4609	-18,708	-0,0252	7624,74	7168550
Ar3	0,71419	26,443	28,7432	26,4882	-28,029	-0,0452	11437,1	1,1E+07
Ar4	0,90283	39,7516	38,3563	-37,453	-37,453	-0,0498	15249,5	1,4E+07
Ar5	0,90975	48,0162	47,9694	48,0584	-47,06	-0,0422	19061,8	1,8E+07
Kr2	-7,611	19,2559	19,1301	19,281	-26,741	-0,0252	14725,2	7138444
Kr3	-12,251	27,8163	28,7432	27,9311	-40,994	-0,1149	22087,8	1,1E+07
Kr4	-16,624	36,7032	38,3563	36,7781	-54,981	-0,0749	29450,4	1,4E+07
Kr5	-21,228	478,354	47,9694	48,435	-69,197	-0,0806	36813	1,8E+07
Xe2	-9,5321	19,575	19,1301	19,6398	-28,662	-0,0652	20864	7122062
Xe3	-14,842	26,9171	28,7432	27,0152	-43,972	-0,0982	31296	1,1E+07
Xe4	-21,002	40,0087	38,3563	40,1119	-59,832	-0,0601	41728	1,4E+07
Xe5	-13,025	49,3325	47,9694	49,4817	-60,994	-0,1493	52160	1,8E+07

Realizado por: Amaguaña, 2021.

Las tablas anteriores muestran en síntesis los datos obtenidos con dinámica molecular, se observa que a medida que el átomo crece las energías y volúmenes crecen y el sistema muestra un

comportamiento adecuado a las condiciones de temperatura. Se escoge trabajar con la caja de 100 moléculas debido a que en todos los casos este converge junto con el de 10 moléculas, los sistemas más grandes no convergen debido al hardware con el que se trabaja ya que para sistemas con mayor complejidad es necesario tener un ordenador adecuado, para así obtener resultados más realistas, estos resultados son útiles en modelos previo a experimentación o en estudios teóricos.

Por otra parte, el gráfico 1-3 muestra la forma característica del potencial de Lennard-Jones cuando dos átomos de gas inerte interactúan, esta es una forma general en la que no se expresan los valores de  $R$ , nótese lo abrupta que es la curva en el mínimo y lo suave que es en el exterior. Podemos observar que los resultados obtenidos mediante Psi4 nos permiten graficar el potencial de L-J con una forma muy similar a la del gráfico 1-3, corroborando la presencia del potencial en los gases nobles ya que están regidos por las interacciones de tipo Van der Waals.

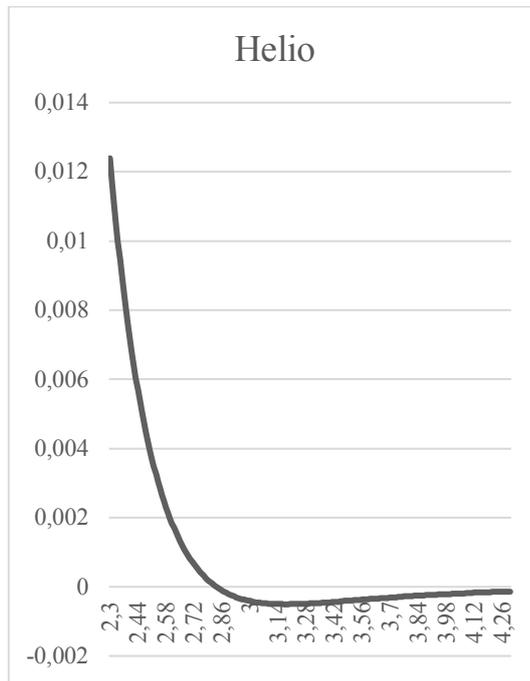


**Gráfico 1-3:** Forma del potencial de L-J que describe la interacción de dos átomos de gas inerte.

**Fuente:** (Kittel y McEuen, 1976)

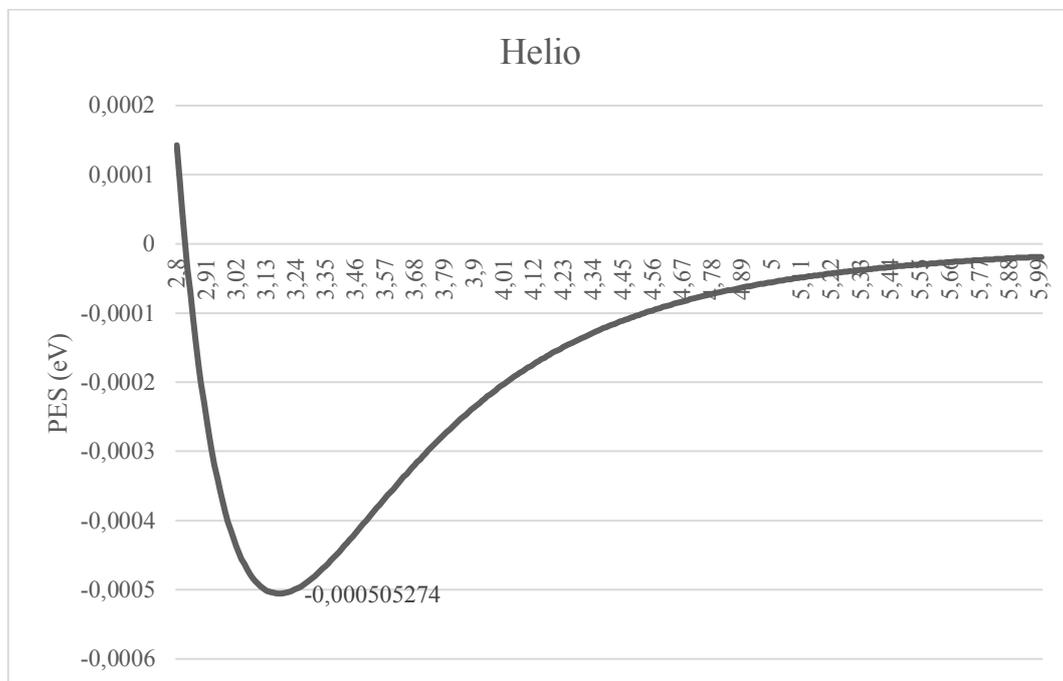
A continuación, se muestran una serie de gráficos realizados con los datos obtenidos mediante PES de la interacción de dos átomos de los distintos gases inertes estudiados, el primero de cada

par se asemeja al gráfico 1-3 y el siguiente es un acercamiento al R mínimo observándose de manera más clara la forma del potencial de L-J.



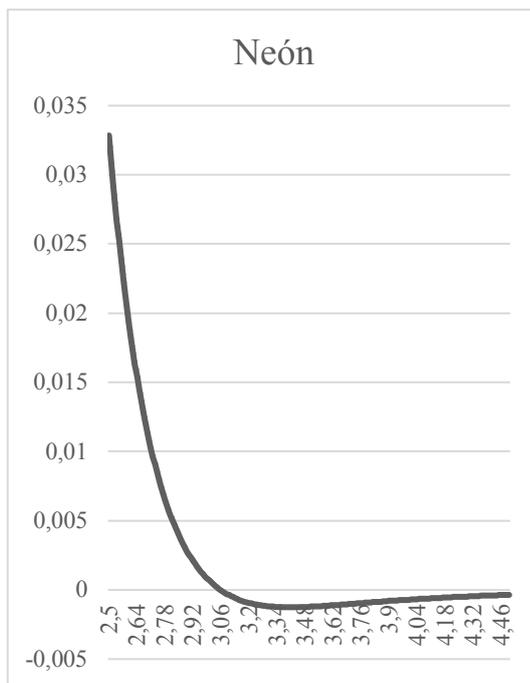
**Gráfico 2-3:** PES de Helio.

**Realizado por:** Amaguaña, 2020.



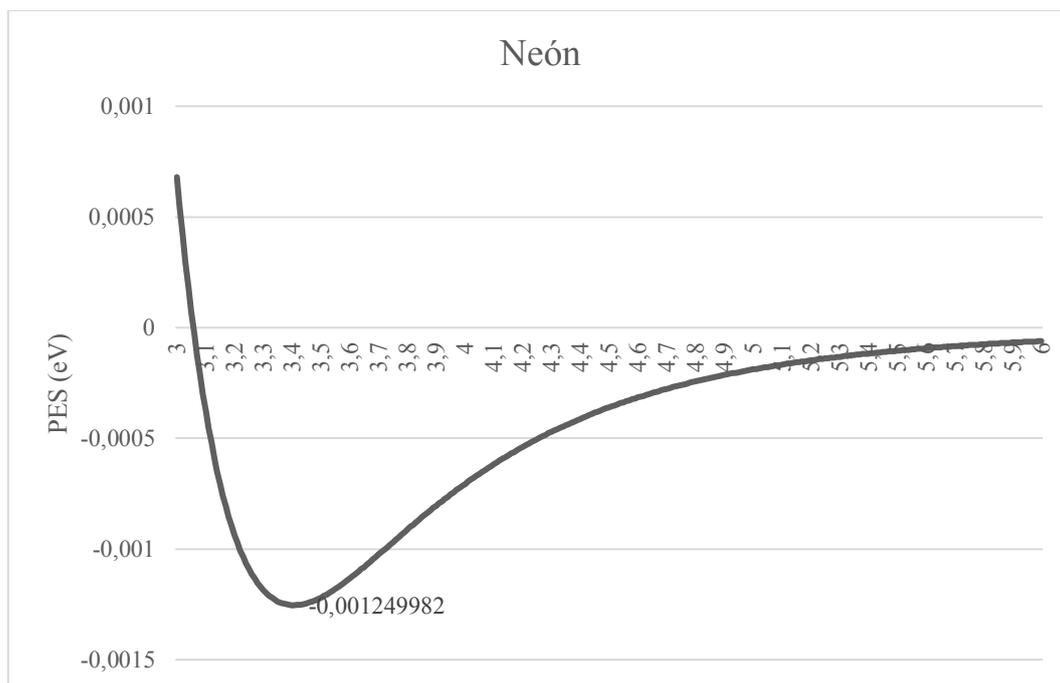
**Gráfico 3-3:** Gráfica de PES en eV de Helio, el punto mínimo se muestra en  $R=3.18 \text{ \AA}$ , dando un valor potencial de  $-0,00050549 \text{ eV}$ .

**Realizado por:** Amaguaña, 2021.



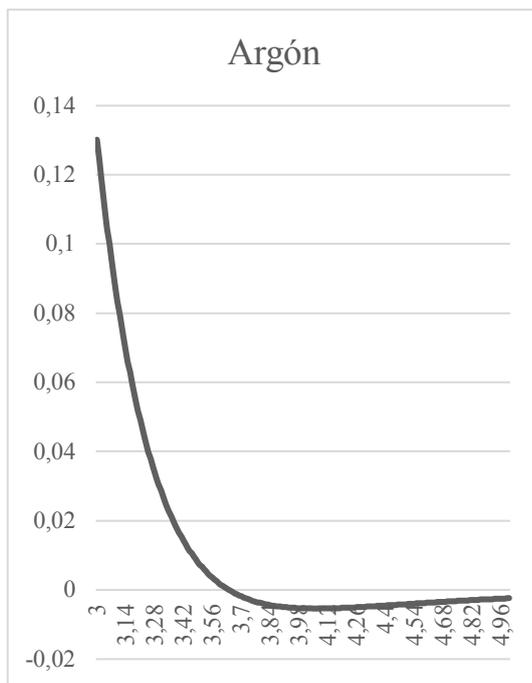
**Gráfico 4-3:** PES de Neón.

**Realizado por:** Amaguaña, 2021.



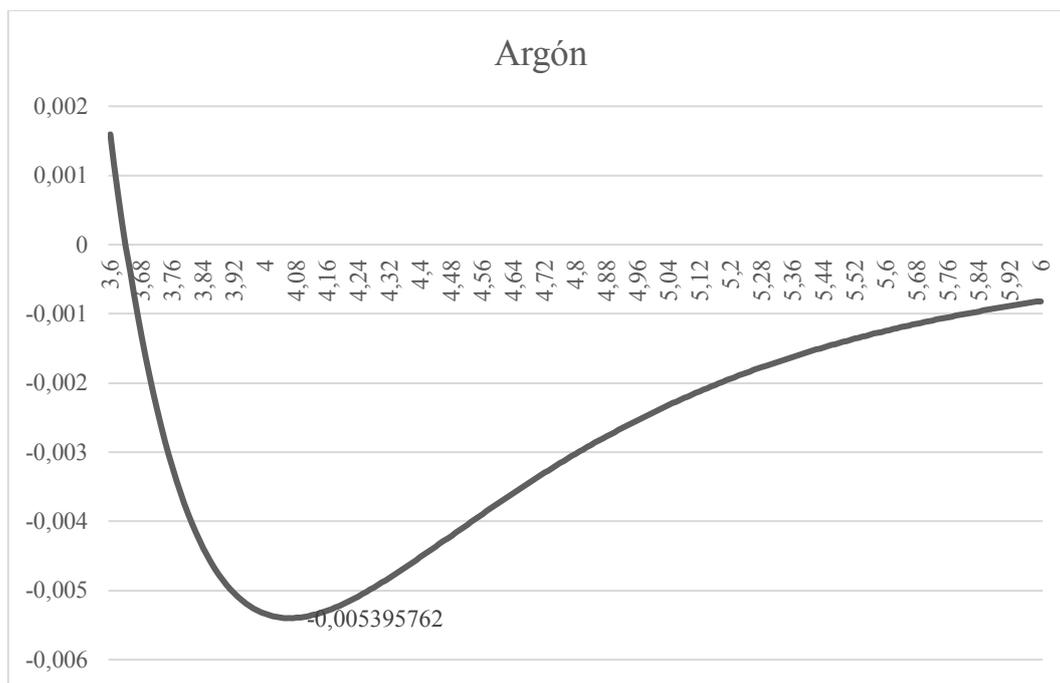
**Gráfico 5-3:** Gráfica de PES en eV de Neón, el punto mínimo se muestra en  $R=3.41 \text{ \AA}$ , dando un valor potencial de  $-0,001235 \text{ eV}$ .

**Realizado por:** Amaguaña, 2021.



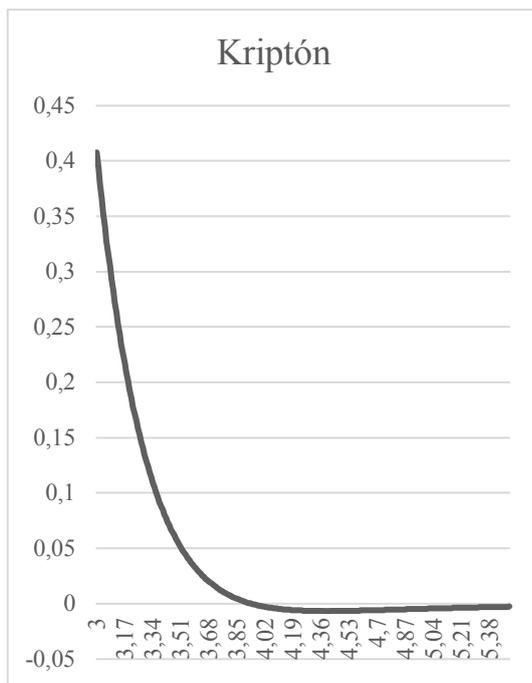
**Gráfico 6-3:** PES de Argón.

**Realizado por:** Amaguaña, 2021.



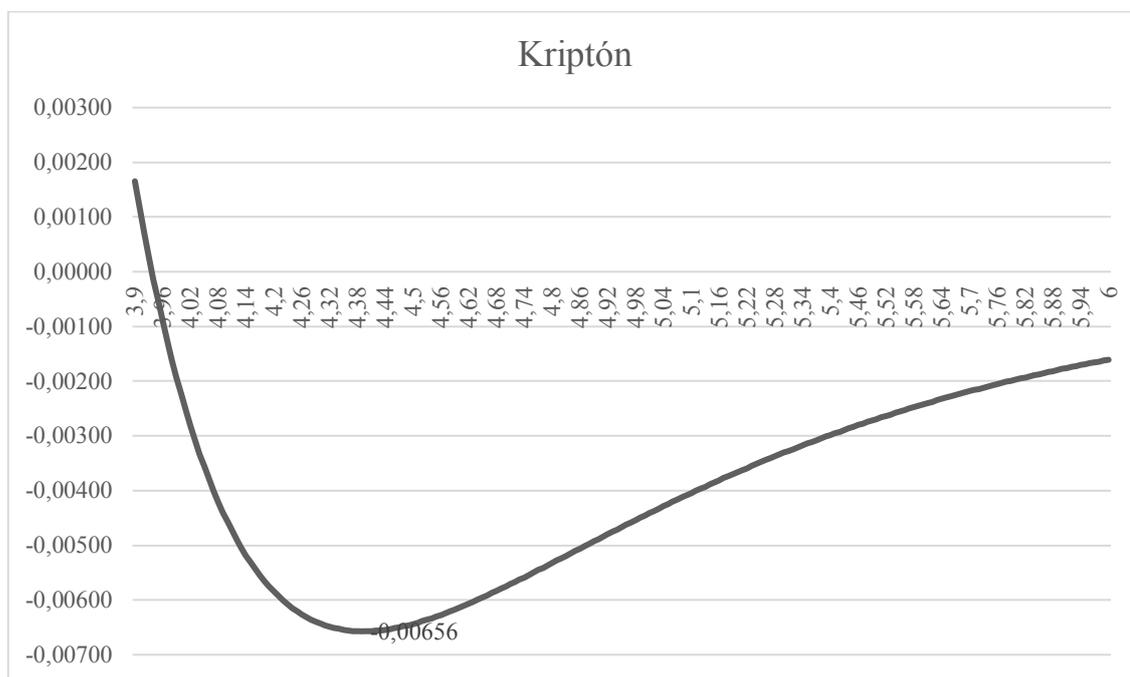
**Gráfico 7-3:** Gráfica de PES en eV de Argón, el punto mínimo se muestra en  $R=4.06 \text{ \AA}$ , dando un valor potencial de  $-0,0053978 \text{ eV}$ .

**Realizado por:** Amaguaña, 2021.



**Gráfico 8-3:** PES de Kriptón.

**Realizado por:** Amaguaña, 2021.



**Gráfico 9-3:** Gráfica de PES en eV de Kriptón, el punto mínimo se muestra en  $R=4.39$  Å, dando un valor potencial de  $-0,00657$  eV.

**Realizado por:** Amaguaña, 2021.

Las gráficas mostradas, exponen que los valores de energía se reducen a medida que el átomo crece y esto concuerda con la ecuación 21 además que a medida que el radio atómico crece la curva se ensancha por lo que su amplitud va creciendo, esto sucede porque depende netamente del valor de  $R$ . En el Anexo D se encuentra la tabla con los valores de Energía para el PES con escalas de color para cada molécula diatómica. Cabe destacar que mediante este proceso no se pudo determinar el PES de Xenón ya que el código de Psi4 no tiene en su biblioteca la molécula, pero permite crearla, este sería un estudio posterior interesante.

## CONCLUSIONES

- Los modelos matemáticos presentes en los programas Materials Studio y Psi4 tienen la capacidad de obtener resultados aproximados en comparación con la literatura de sistemas moleculares de gases nobles: He, Ne, Ar, Kr y Xe.
- Mediante el uso de Materials Studio se optimizó geoméricamente los sistemas mostrando el estado de mínima energía de cada uno y la dinámica molecular obtenida demuestra la evolución temporal de los mismo al ser sometidos a una temperatura específica, las tablas presentan claramente una síntesis de los valores.
- Los datos de superficie de energía potencial (PES) obtenidos con Psi4 permiten obtener gráficas del comportamiento energético de las interacciones entre dos átomos de gases nobles congruentes con la teoría.
- Tanto Materials Studio como Psi4 arrojan datos equivalentes a los reportados en la bibliografía demostrando que los gases nobles están regidos por interacciones de tipo Van der Waals y por ende por el potencial Lennard Jones.

## RECOMENDACIONES

- Las simulaciones son una herramienta económica y eficaz en cuanto a procesos que están fuera del alcance económico o experimental, pero para el uso de estos es indispensable contar con un ordenador con mejor capacidad para el proceso de convergencia de los sistemas moleculares.
- Por la estrecha relación de este tipo de simulaciones con la química cuántica es indispensable contar con la colaboración de profesionales afines en el área.
- Indagar en los programas utilizados en esta investigación ya que son herramientas muy sofisticadas ya que pueden ahorrar tiempo de codificación y simulación con sistemas moleculares más complejos debido a su sofisticado entorno y herramientas, por lo que pueden ser usados en investigaciones futuras combinando los gases nobles con otros elementos de la tabla periódica.

## GLOSARIO

Afinidad electrónica: energía intercambiada cuando un átomo gaseoso neutro atrapa un electrón y se convierte en un anión. Los elementos con esta característica se encuentran a la derecha de la tabla periódica, aunque ciertos metales también tienen esta propiedad.

Cadena de Markov: modelo probabilístico que establece la dependencia de un suceso con el anterior a este, lo que permite predecir la evolución de un fenómeno a corto plazo.

Cristalografía: ciencia que estudia a los cristales, forma y propiedades.

Densidad de energía cohesiva: energía cohesiva por unidad de volumen.

Dinámica molecular: tipo de simulación que permite observar la evolución de las interacciones de átomos o moléculas en un período de tiempo.

Dipolo molecular: se genera cuando existe una distribución no simétrica de los electrones debido a que la molécula tiene como componentes átomos con distinta electronegatividad.

Distancia entre los vecinos más cercanos: distancia entre cada centroide y la ubicación del centroide más cercano.

Energía cohesiva: aumento de energía interna por mol de sustancia si se eliminan todas las fuerzas intermoleculares.

Energía de enlace: mínima energía necesaria para disociar una molécula o para formar enlaces químicos.

Formulación de Lifshitz: también llamada como la teoría macroscópica de las fuerzas de VdW, en donde no supone aditividad por parte de las fuerzas intermoleculares individuales.

Mesoescala: escala de longitud en la que se pueden observar y estudiar las propiedades de un fenómeno sin tomar en cuenta el comportamiento atómico.

Optimización geométrica: procedimiento mediante el cual se trata de hallar la configuración espacial de los núcleos en donde se alcance el estado fundamental o de mínima energía.

Radio de Van der Waals: radio de una esfera compacta imaginaria que representa a un átomo y representa la distancia viable más cercana entre dos átomos en una interacción no enlazante.

Semi-empírico: método usado en química cuántica que se basa en el formalismo de Hartree-Fock, con la diferencia que se realizan muchas aproximaciones y se obtienen algunos datos de experimentos.

Sistema molecular: modelos moleculares que describen como cargas puntuales con una masa asociada. Las interacciones entre los átomos son descritas por interacciones tipo oscilador armónico y Fuerzas de van der Waals.

Superficie de energía potencial (PES): relación, matemática o gráfica, entre la energía de una molécula y su geometría, describe entonces la energía potencial de un sistema en términos de parámetros como la posición.

## BIBLIOGRAFÍA

**ABASCAL, J. et al.** "Dinámica Molecular". En: J. BUEREN-CALABUIG (ed.), *Bioinformática con ñ* [en línea]. 2014. 1. España: Coordinators and Editors, pp. 1-17. Disponible en: <https://zenodo.org/record/1066360#.XuEEhEVKjIU>.

**ALCAÑIZ, E. D. J.** "Los elementos". *Química Inorgánica* [en línea]. 2019. Alcalá: Universidad de Alcalá, pp. 32. Disponible en: [http://www3.uah.es/edejesus/resumenes/QI/Tema\\_4.pdf](http://www3.uah.es/edejesus/resumenes/QI/Tema_4.pdf).

**BROWN, T. L. et al.**, *Química La ciencia central Brown 11a Edición [en línea]* 12 edition. Mexico: Pearson Education, 2009. Disponible en: <https://academia.utp.edu.co/quimica2/files/2018/09/quc3admica-la-ciencia-central-brown.pdf>.

**BUTT, C. R. M. GOLE, M. J. y DYCK, W.** "Helium". *Handbook of Exploration Geochemistry*. 2000, vol, 7, pp. 303-352. ISSN 01686275.

**CAMPOS, C.**, *Adsorción Física de Moléculas Diatómicas* [en línea]. (Trabajo de titulación) (Licenciatura). Universidad Autónoma del Estado de México. S.l.: 2014. Disponible en: <http://hdl.handle.net/20.500.11799/65550>.

**DELGADO TELLEZ, L. de C.**, *Estudios Teoréticos De Interacciones Débiles Moleculares* [en línea]. (Trabajo de titulación) (Doctoral). Universidad Computense de Madrid. S.l.: 2012. Disponible en: <http://eprints.ucm.es/16535/1/T33965.pdf>.

**FONSECA, F.** "Configuración óptima por Montecarlo para un cluster de 13 átomos y aproximación a sus propiedades térmicas". *Revista Colombiana de Física*. 2010, vol, 42, pp. 22-26.

**HOPKINS, J. C.**, *Morphological and Material Effects in Van Der Waals Interactions* [en línea]. (Trabajo de titulación) (Doctoral). University of Massachusetts. S.l.: 2016. Disponible en: [https://scholarworks.umass.edu/dissertations\\_2/696/](https://scholarworks.umass.edu/dissertations_2/696/).

**KITTEL, C. y MCEUEN, P.**, *Introducción a la Física del Estado Sólido [en línea]* 3º Edición. Barcelona: Editorial Reverté, S. A., 1976. Disponible en: [http://neel.fis.puc.cl/cncm/Fisica\\_del\\_Solido/Apuntes\\_files/introduccion.pdf](http://neel.fis.puc.cl/cncm/Fisica_del_Solido/Apuntes_files/introduccion.pdf).

**LOZANO APONTE, J. y SCIOR, T.** "¿Qué sabe usted acerca de Dinámica Molecular?". *Revista Mexicana de Ciencias Farmacéuticas* [en línea]. 2014, vol, 1, pp. 86-88. Disponible en: <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=57932293010>.

**PANE, D. N. FIKRI, M. EL y RITONGA, H. M.** "Redes Cristalinas". *Journal of Chemical Information and Modeling*. 2018, vol, 53, pp. 1689-1699. ISSN 1098-6596.

**PARRISH, R. M. et al.** "Psi4 1.1: An Open-Source Electronic Structure Program Emphasizing Automation, Advanced Libraries, and Interoperability". *Journal of Chemical Theory and Computation*. 2017, vol, 13, pp. 3185-3197. ISSN 15499626.

**POLLARD, T. D. et al.** "Biophysical Principles". *Cell Biology* [en línea]. 2017. Third Edit. Estados Unidos: Elsevier, pp. 53-62. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780323341264000049>.

**SAETEAU, A. SAWANG, N. y SUTTHIBUTPONG, T.** "Van der Waals parameters of inert, polar and non-polar gas molecules obtained from atomistic molecular dynamics simulations". *Journal of Physics: Conference Series*. 2019, vol, 1380. ISSN 17426596.

**STUDIO, M.**, *Modules Tutoriales* S.l.: s.n., 2017.

**SZTRAJMAN, A.** "Simulación MD de un fluido de Lennard-Jones". [en línea]. 2018. Londres: Disponible en: <http://www0.cs.ucl.ac.uk/staff/A.Sztrajman/webpage/projects/moldyn/moldyn-report.pdf>.

**TATLOCK, G. J.** "Solid gases". *Ultramicroscopy*. 1982, vol, 10, pp. 87-96. ISSN 03043991.

**TRAVERS, M. TRAVERS, M. y TRAVERS, M.** "Group 8A : Noble Gases". 1962, pp. 36-37.

**UNGSON, Y. et al.** "Dinámica Molecular vs . Simulación Directa Monte Carlo : Generación de Trayectorias y Análisis de Propiedades". *II Simposio de Nanociencias y Nanomateriales* [en línea]. 2016. Mexico: Disponible en: [https://www.researchgate.net/publication/308309841\\_Dinamica\\_Molecular\\_vs\\_Simulacion\\_Directa\\_Monte\\_Carlo\\_Generacion\\_de\\_Trayectorias\\_y\\_Analisis\\_de\\_Propiedades](https://www.researchgate.net/publication/308309841_Dinamica_Molecular_vs_Simulacion_Directa_Monte_Carlo_Generacion_de_Trayectorias_y_Analisis_de_Propiedades).

"Simulación método monte carlo". [en línea]. 2005, pp. 1-13. Disponible en: <https://jaimesotou.files.wordpress.com/2011/05/metodo-montecarlo-03.pdf>.

**VÁZQUEZ-CONTRERAS, E.** "Las fuerzas de van der Waals". *Universidad Nacional Autónoma de México* [en línea]. 2003, pp. 1. Disponible en: [http://laguna.fmedic.unam.mx/~evazquez/0403/van\\_der\\_waals.html](http://laguna.fmedic.unam.mx/~evazquez/0403/van_der_waals.html).

**VIZCONT.** "Estructura cristalina del diamante". *Ilustración 109836433* © Vizcont - *Dreamstime.com* [en línea]. 2018. [Consulta: 6 octubre 2020]. Disponible en: <https://es.dreamstime.com/estructura-cristalina-del-diamante-image109836433>.

**WINTERTON, R.** "Van der Waals forces". *Contemporary Physics*. 1970, vol, 11, pp. 559-574.  
ISSN 00280836.

## ANEXOS

### Anexo A

Input file Psi4.

```
ne2_geometry = ""
```

```
Ne
```

```
--
```

```
Ne 1 {0}
```

```
""
```

```
Rvals = [2, 3, 4, 5, 6]
```

```
psi4.set_options({'freeze_core': 'true'})
```

```
# Initialize a blank dictionary of counterpoise corrected energies
```

```
# (Need this for the syntax below to work)
```

```
ecp = {}
```

```
for R in Rvals:
```

```
    ne2 = psi4.geometry(ne2_geometry.format(R))
```

```
    ecp[R] = psi4.energy('ccsd(t)/aug-cc-pvdz', bsse_type='cp', molecule=ne2)
```

```
# Prints to screen
```

```
print("CP-corrected CCSD(T)/aug-cc-pVDZ Interaction Energies\n\n")
```

```
print("      R [Ang]          E_int [kcal/mol]      ")
```

```
print("-----")
```

```
for R in Rvals:
```

```
    e = ecp[R] * psi4.constants.hartree2kcalmol
```

```
    print("      {:3.1f}          {:1.6f}".format(R, e))
```

```

# Prints to output.dat

psi4.core.print_out("CP-corrected CCSD(T)/aug-cc-pVDZ Interaction Energies\n\n")

psi4.core.print_out("      R [Ang]          E_int [kcal/mol]   \n")

psi4.core.print_out("-----\n")

for R in Rvals:

    e = ecp[R] * psi4.constants.hartree2kcalmol

    psi4.core.print_out("      {:3.1f}          {:1.6f}\n".format(R, e))

```

## Anexo B

Output file Psi4.

\*\*\* tstart() called on MABE

\*\*\* at Tue Jan 5 09:50:46 2021

Wave function = CCSD\_T

Reference wfn = RHF

Nuclear Rep. energy (wfn) = 8.819620143166663

SCF energy (wfn) = -256.992699511475507

Reference energy (file100) = -256.992699511475621

CCSD energy (file100) = -0.420311019725379

Total CCSD energy (file100) = -257.413010531200996

Number of ijk index combinations: 120

Memory available in words : 65536000

~Words needed per explicit thread: 2048

Number of threads for explicit ijk threading: 1

MKL num\_threads set to 1 for explicit threading.

(T) energy = -0.005581199726144

\* CCSD(T) total energy = -257.418591730927119

\*\*\* tstop() called on MABE at Tue Jan 5 09:50:47 2021

Module time:

user time = 0.06 seconds = 0.00 minutes

system time = 0.01 seconds = 0.00 minutes

total time = 1 seconds = 0.02 minutes

Total time:

user time = 655.30 seconds = 10.92 minutes

system time = 308.02 seconds = 5.13 minutes

total time = 2781 seconds = 46.35 minutes

N-Body: Complex Energy (fragments = (1, 2), basis = (1, 2): -257.41859173092712)

==> N-Body: Counterpoise Corrected (CP) energies <==

n-Body	Total Energy [Eh]	I.E. [kcal/mol]	Delta [kcal/mol]
1	-257.418589490262	0.000000000000	0.000000000000
2	-257.418591730927	-0.001406038376	-0.001406038376

=> Loading Basis Set <=

Name: STO-3G

Role: ORBITAL

Keyword: BASIS

atoms 1-2 entry NE line 100 file /home/mabe/psi4conda/share/psi4/basis/sto-3g.gbs

There are an even number of electrons - assuming singlet.

Specify the multiplicity in the molecule input block.

CP-corrected CCSD(T)/aug-cc-pVDZ Interaction Energies

R [Ang]	E_int [kcal/mol]
2.0	8.867971
3.0	0.034286
4.0	-0.017378
5.0	-0.004635
6.0	-0.001406

\*\*\* Psi4 exiting successfully. Buy a developer a beer!

## Anexo C

Output file Materials Studio.

Module: Amorphous Cell
Version: 2017
Build date: May 5 2016
Host: DESKTOP-K1RPKPT
Operating system: Windows
Task started: Tue Nov 10 15:34:09 2020
Random number seed: 92757401
---- Amorphous Cell calculation ----
Task: Construction
Density: 1.740 g/cc
Number of frames: 3
Optimize geometry: yes
Loading steps: 1000
Check ring spearing: yes
Check close contacts: no
Check energies: yes
Bias temperature: 298.000 K



2	Yes	-621,673	-621,673	0	-621,673	0
3	Yes	-623,937	-623,937	0	-623,937	0
Task terminated: Tue Nov 10 15:34:35 2020						
Total CPU time used: 7 seconds						
Termination status: Normal						

## Anexo D

Valores de energía obtenidos mediante el código de Psi4, los datos se presentan con escalas de color para observar las diferencias entre cada elemento y como las energías dependen del tamaño del átomo.

	Helio	Neón	Argón	Kriptón
<b>R (Å)</b>	E_int (eV)	E_int (eV)	E_int (eV)	E_int (eV)
2	0,05531	0,38452	5,18209	9,96041
2,01	0,05274	0,36663	5,01476	9,67642
2,02	0,05028	0,34957	4,85251	9,40008
2,03	0,04793	0,33328	4,69521	9,13121
2,04	0,04569	0,31773	4,54270	8,86961
2,05	0,04354	0,30290	4,39487	8,61510
2,06	0,04149	0,28874	4,25157	8,36748
2,07	0,03953	0,27523	4,11267	8,12658
2,08	0,03766	0,26234	3,97806	7,89223
2,09	0,03587	0,25004	3,84760	7,66426
2,1	0,03417	0,23830	3,72117	7,44250
2,11	0,03253	0,22711	3,59867	7,22679
2,12	0,03098	0,21642	3,47997	7,01698
2,13	0,02949	0,20624	3,36497	6,81290
2,14	0,02807	0,19651	3,25356	6,61442
2,15	0,02671	0,18724	3,14563	6,42138
2,16	0,02541	0,17840	3,04108	6,23365
2,17	0,02417	0,16996	2,93981	6,05108
2,18	0,02299	0,16192	2,84173	5,87355
2,19	0,02187	0,15425	2,74674	5,70092

2,2	0,02079	0,14693	2,65475	5,53306
2,21	0,01976	0,13995	2,56566	5,36985
2,22	0,01878	0,13330	2,47940	5,21116
2,23	0,01784	0,12695	2,39588	5,05689
2,24	0,01695	0,12090	2,31501	4,90690
2,25	0,01610	0,11513	2,23673	4,76110
2,26	0,01529	0,10963	2,16094	4,61936
2,27	0,01451	0,10438	2,08757	4,48159
2,28	0,01377	0,09938	2,01656	4,34768
2,29	0,01306	0,09461	1,94782	4,21752
2,3	0,01239	0,09006	1,88130	4,09102
2,31	0,01175	0,08573	1,81692	3,96809
2,32	0,01114	0,08159	1,75461	3,84861
2,33	0,01055	0,07765	1,69432	3,73252
2,34	0,00999	0,07390	1,63598	3,61971
2,35	0,00946	0,07031	1,57954	3,51010
2,36	0,00896	0,06690	1,52493	3,40360
2,37	0,00848	0,06364	1,47209	3,30013
2,38	0,00802	0,06054	1,42099	3,19961
2,39	0,00758	0,05758	1,37155	3,10196
2,4	0,00716	0,05476	1,32372	3,00710
2,41	0,00676	0,05207	1,27747	2,91496
2,42	0,00639	0,04950	1,23274	2,82546
2,43	0,00602	0,04706	1,18948	2,73854
2,44	0,00568	0,04473	1,14764	2,65413
2,45	0,00535	0,04251	1,10719	2,57215
2,46	0,00504	0,04039	1,06807	2,49254
2,47	0,00475	0,03837	1,03026	2,41524
2,48	0,00446	0,03644	0,99369	2,34019
2,49	0,00420	0,03460	0,95835	2,26731
2,5	0,00394	0,03285	0,92418	2,19656
2,51	0,00370	0,03119	0,89115	2,12788
2,52	0,00347	0,02960	0,85923	2,06121
2,53	0,00325	0,02808	0,82838	1,99648
2,54	0,00304	0,02663	0,79856	1,93366

2,55	0,00284	0,02525	0,76975	1,87269
2,56	0,00265	0,02394	0,74191	1,81352
2,57	0,00247	0,02269	0,71501	1,75609
2,58	0,00230	0,02149	0,68902	1,70036
2,59	0,00214	0,02036	0,66391	1,64629
2,6	0,00198	0,01927	0,63965	1,59382
2,61	0,00184	0,01824	0,61622	1,54291
2,62	0,00170	0,01725	0,59359	1,49352
2,63	0,00157	0,01631	0,57173	1,44560
2,64	0,00144	0,01542	0,55062	1,39912
2,65	0,00132	0,01456	0,53023	1,35404
2,66	0,00121	0,01375	0,51054	1,31030
2,67	0,00110	0,01297	0,49154	1,26789
2,68	0,00100	0,01224	0,47318	1,22675
2,69	0,00091	0,01153	0,45547	1,18686
2,7	0,00082	0,01086	0,43836	1,14818
2,71	0,00073	0,01022	0,42185	1,11067
2,72	0,00065	0,00961	0,40592	1,07430
2,73	0,00057	0,00904	0,39054	1,03903
2,74	0,00050	0,00848	0,37569	1,00485
2,75	0,00043	0,00796	0,36137	0,97171
2,76	0,00037	0,00746	0,34755	0,93958
2,77	0,00031	0,00698	0,33421	0,90844
2,78	0,00025	0,00653	0,32134	0,87826
2,79	0,00019	0,00610	0,30893	0,84901
2,8	0,00014	0,00569	0,29696	0,82066
2,81	0,00009	0,00530	0,28541	0,79319
2,82	0,00005	0,00492	0,27427	0,76657
2,83	0,00001	0,00457	0,26353	0,74077
2,84	-0,00003	0,00424	0,25317	0,71578
2,85	-0,00007	0,00392	0,24318	0,69157
2,86	-0,00011	0,00361	0,23354	0,66812
2,87	-0,00014	0,00332	0,22426	0,64540
2,88	-0,00017	0,00305	0,21531	0,62339
2,89	-0,00020	0,00279	0,20668	0,60207

2,9	-0,00023	0,00254	0,19836	0,58143
2,91	-0,00025	0,00231	0,19034	0,56143
2,92	-0,00028	0,00209	0,18262	0,54207
2,93	-0,00030	0,00188	0,17517	0,52332
2,94	-0,00032	0,00168	0,16800	0,50517
2,95	-0,00034	0,00149	0,16109	0,48759
2,96	-0,00036	0,00131	0,15443	0,47058
2,97	-0,00037	0,00114	0,14802	0,45411
2,98	-0,00039	0,00098	0,14184	0,43816
2,99	-0,00040	0,00082	0,13589	0,42273
3	-0,00041	0,00068	0,13016	0,40779
3,01	-0,00043	0,00054	0,12465	0,39333
3,02	-0,00044	0,00042	0,11933	0,37934
3,03	-0,00045	0,00029	0,11422	0,36581
3,04	-0,00046	0,00018	0,10930	0,35271
3,05	-0,00046	0,00007	0,10456	0,34003
3,06	-0,00047	-0,00003	0,10000	0,32777
3,07	-0,00048	-0,00013	0,09561	0,31591
3,08	-0,00048	-0,00022	0,09138	0,30444
3,09	-0,00049	-0,00030	0,08732	0,29334
3,1	-0,00049	-0,00038	0,08341	0,28261
3,11	-0,00049	-0,00045	0,07965	0,27222
3,12	-0,00050	-0,00052	0,07603	0,26219
3,13	-0,00050	-0,00059	0,07256	0,25248
3,14	-0,00050	-0,00065	0,06921	0,24309
3,15	-0,00050	-0,00071	0,06599	0,23402
3,16	-0,00050	-0,00076	0,06290	0,22525
3,17	-0,00051	-0,00081	0,05993	0,21677
3,18	-0,00051	-0,00085	0,05707	0,20857
3,19	-0,00051	-0,00090	0,05433	0,20065
3,2	-0,00050	-0,00094	0,05169	0,19300
3,21	-0,00050	-0,00097	0,04916	0,18560
3,22	-0,00050	-0,00101	0,04672	0,17845
3,23	-0,00050	-0,00104	0,04438	0,17155
3,24	-0,00050	-0,00106	0,04214	0,16488

3,25	-0,00050	-0,00109	0,03998	0,15843
3,26	-0,00049	-0,00111	0,03791	0,15221
3,27	-0,00049	-0,00113	0,03593	0,14620
3,28	-0,00049	-0,00115	0,03402	0,14039
3,29	-0,00049	-0,00117	0,03219	0,13478
3,3	-0,00048	-0,00119	0,03043	0,12937
3,31	-0,00048	-0,00120	0,02875	0,12414
3,32	-0,00048	-0,00121	0,02713	0,11910
3,33	-0,00047	-0,00122	0,02558	0,11423
3,34	-0,00047	-0,00123	0,02410	0,10953
3,35	-0,00047	-0,00124	0,02268	0,10499
3,36	-0,00046	-0,00124	0,02131	0,10062
3,37	-0,00046	-0,00125	0,02000	0,09639
3,38	-0,00045	-0,00125	0,01875	0,09232
3,39	-0,00045	-0,00125	0,01755	0,08839
3,4	-0,00045	-0,00125	0,01640	0,08460
3,41	-0,00044	-0,00125	0,01530	0,08094
3,42	-0,00044	-0,00125	0,01425	0,07742
3,43	-0,00043	-0,00125	0,01324	0,07402
3,44	-0,00043	-0,00125	0,01228	0,07074
3,45	-0,00042	-0,00125	0,01136	0,06758
3,46	-0,00042	-0,00124	0,01047	0,06454
3,47	-0,00041	-0,00124	0,00963	0,06160
3,48	-0,00041	-0,00123	0,00883	0,05878
3,49	-0,00041	-0,00123	0,00806	0,05605
3,5	-0,00040	-0,00122	0,00732	0,05343
3,51	-0,00040	-0,00121	0,00662	0,05090
3,52	-0,00039	-0,00120	0,00595	0,04847
3,53	-0,00039	-0,00120	0,00531	0,04613
3,54	-0,00038	-0,00119	0,00470	0,04387
3,55	-0,00038	-0,00118	0,00412	0,04170
3,56	-0,00037	-0,00117	0,00356	0,03961
3,57	-0,00037	-0,00116	0,00303	0,03760
3,58	-0,00036	-0,00115	0,00253	0,03566
3,59	-0,00036	-0,00114	0,00205	0,03380

3,6	-0,00035	-0,00113	0,00159	0,03201
3,61	-0,00035	-0,00112	0,00116	0,03029
3,62	-0,00035	-0,00111	0,00075	0,02863
3,63	-0,00034	-0,00110	0,00035	0,02704
3,64	-0,00034	-0,00109	-0,00002	0,02551
3,65	-0,00033	-0,00108	-0,00037	0,02404
3,66	-0,00033	-0,00107	-0,00071	0,02262
3,67	-0,00032	-0,00106	-0,00103	0,02127
3,68	-0,00032	-0,00105	-0,00133	0,01996
3,69	-0,00032	-0,00104	-0,00162	0,01871
3,7	-0,00031	-0,00102	-0,00189	0,01751
3,71	-0,00031	-0,00101	-0,00214	0,01636
3,72	-0,00030	-0,00100	-0,00238	0,01525
3,73	-0,00030	-0,00099	-0,00261	0,01419
3,74	-0,00029	-0,00098	-0,00283	0,01317
3,75	-0,00029	-0,00097	-0,00303	0,01219
3,76	-0,00029	-0,00096	-0,00322	0,01126
3,77	-0,00028	-0,00095	-0,00341	0,01036
3,78	-0,00028	-0,00093	-0,00357	0,00950
3,79	-0,00028	-0,00092	-0,00373	0,00868
3,8	-0,00027	-0,00091	-0,00388	0,00789
3,81	-0,00027	-0,00090	-0,00402	0,00713
3,82	-0,00026	-0,00089	-0,00415	0,00641
3,83	-0,00026	-0,00088	-0,00428	0,00572
3,84	-0,00026	-0,00087	-0,00439	0,00505
3,85	-0,00025	-0,00086	-0,00450	0,00442
3,86	-0,00025	-0,00085	-0,00459	0,00382
3,87	-0,00025	-0,00084	-0,00469	0,00324
3,88	-0,00024	-0,00083	-0,00477	0,00269
3,89	-0,00024	-0,00081	-0,00485	0,00216
3,9	-0,00024	-0,00080	-0,00492	0,00165
3,91	-0,00023	-0,00079	-0,00498	0,00117
3,92	-0,00023	-0,00078	-0,00504	0,00071
3,93	-0,00023	-0,00077	-0,00510	0,00028
3,94	-0,00022	-0,00076	-0,00514	-0,00014

3,95	-0,00022	-0,00075	-0,00519	-0,00054
3,96	-0,00022	-0,00074	-0,00523	-0,00091
3,97	-0,00021	-0,00073	-0,00526	-0,00127
3,98	-0,00021	-0,00072	-0,00529	-0,00162
3,99	-0,00021	-0,00071	-0,00532	-0,00194
4	-0,00021	-0,00071	-0,00534	-0,00225
4,01	-0,00020	-0,00070	-0,00536	-0,00254
4,02	-0,00020	-0,00069	-0,00537	-0,00282
4,03	-0,00020	-0,00068	-0,00538	-0,00309
4,04	-0,00019	-0,00067	-0,00539	-0,00334
4,05	-0,00019	-0,00066	-0,00540	-0,00357
4,06	-0,00019	-0,00065	-0,00540	-0,00380
4,07	-0,00019	-0,00064	-0,00540	-0,00401
4,08	-0,00018	-0,00063	-0,00539	-0,00421
4,09	-0,00018	-0,00063	-0,00539	-0,00440
4,1	-0,00018	-0,00062	-0,00538	-0,00457
4,11	-0,00018	-0,00061	-0,00537	-0,00474
4,12	-0,00017	-0,00060	-0,00536	-0,00490
4,13	-0,00017	-0,00059	-0,00534	-0,00505
4,14	-0,00017	-0,00058	-0,00533	-0,00519
4,15	-0,00017	-0,00058	-0,00531	-0,00532
4,16	-0,00016	-0,00057	-0,00529	-0,00544
4,17	-0,00016	-0,00056	-0,00527	-0,00555
4,18	-0,00016	-0,00055	-0,00525	-0,00566
4,19	-0,00016	-0,00055	-0,00522	-0,00576
4,2	-0,00016	-0,00054	-0,00520	-0,00585
4,21	-0,00015	-0,00053	-0,00517	-0,00593
4,22	-0,00015	-0,00052	-0,00514	-0,00601
4,23	-0,00015	-0,00052	-0,00511	-0,00608
4,24	-0,00015	-0,00051	-0,00508	-0,00615
4,25	-0,00015	-0,00050	-0,00505	-0,00621
4,26	-0,00014	-0,00050	-0,00502	-0,00626
4,27	-0,00014	-0,00049	-0,00499	-0,00631
4,28	-0,00014	-0,00048	-0,00496	-0,00636
4,29	-0,00014	-0,00048	-0,00492	-0,00639

4,3	-0,00014	-0,00047	-0,00489	-0,00643
4,31	-0,00013	-0,00046	-0,00485	-0,00646
4,32	-0,00013	-0,00046	-0,00482	-0,00649
4,33	-0,00013	-0,00045	-0,00478	-0,00651
4,34	-0,00013	-0,00045	-0,00474	-0,00653
4,35	-0,00013	-0,00044	-0,00471	-0,00654
4,36	-0,00013	-0,00043	-0,00467	-0,00656
4,37	-0,00012	-0,00043	-0,00463	-0,00656
4,38	-0,00012	-0,00042	-0,00459	-0,00657
4,39	-0,00012	-0,00042	-0,00456	-0,00657
4,4	-0,00012	-0,00041	-0,00452	-0,00657
4,41	-0,00012	-0,00041	-0,00448	-0,00657
4,42	-0,00012	-0,00040	-0,00444	-0,00656
4,43	-0,00011	-0,00040	-0,00440	-0,00655
4,44	-0,00011	-0,00039	-0,00436	-0,00654
4,45	-0,00011	-0,00038	-0,00432	-0,00653
4,46	-0,00011	-0,00038	-0,00428	-0,00651
4,47	-0,00011	-0,00037	-0,00424	-0,00650
4,48	-0,00011	-0,00037	-0,00420	-0,00648
4,49	-0,00011	-0,00036	-0,00417	-0,00646
4,5	-0,00010	-0,00036	-0,00413	-0,00644
4,51	-0,00010	-0,00036	-0,00409	-0,00641
4,52	-0,00010	-0,00035	-0,00405	-0,00639
4,53	-0,00010	-0,00035	-0,00401	-0,00636
4,54	-0,00010	-0,00034	-0,00397	-0,00633
4,55	-0,00010	-0,00034	-0,00393	-0,00630
4,56	-0,00010	-0,00033	-0,00389	-0,00627
4,57	-0,00009	-0,00033	-0,00385	-0,00624
4,58	-0,00009	-0,00032	-0,00382	-0,00621
4,59	-0,00009	-0,00032	-0,00378	-0,00617
4,6	-0,00009	-0,00032	-0,00374	-0,00614
4,61	-0,00009	-0,00031	-0,00370	-0,00610
4,62	-0,00009	-0,00031	-0,00366	-0,00607
4,63	-0,00009	-0,00030	-0,00363	-0,00603
4,64	-0,00009	-0,00030	-0,00359	-0,00599

4,65	-0,00009	-0,00030	-0,00355	-0,00595
4,66	-0,00008	-0,00029	-0,00351	-0,00591
4,67	-0,00008	-0,00029	-0,00348	-0,00587
4,68	-0,00008	-0,00028	-0,00344	-0,00583
4,69	-0,00008	-0,00028	-0,00341	-0,00579
4,7	-0,00008	-0,00028	-0,00337	-0,00575
4,71	-0,00008	-0,00027	-0,00333	-0,00571
4,72	-0,00008	-0,00027	-0,00330	-0,00567
4,73	-0,00008	-0,00027	-0,00326	-0,00563
4,74	-0,00008	-0,00026	-0,00323	-0,00558
4,75	-0,00008	-0,00026	-0,00319	-0,00554
4,76	-0,00007	-0,00026	-0,00316	-0,00550
4,77	-0,00007	-0,00025	-0,00313	-0,00545
4,78	-0,00007	-0,00025	-0,00309	-0,00541
4,79	-0,00007	-0,00025	-0,00306	-0,00537
4,8	-0,00007	-0,00024	-0,00303	-0,00532
4,81	-0,00007	-0,00024	-0,00299	-0,00528
4,82	-0,00007	-0,00024	-0,00296	-0,00524
4,83	-0,00007	-0,00023	-0,00293	-0,00519
4,84	-0,00007	-0,00023	-0,00290	-0,00515
4,85	-0,00007	-0,00023	-0,00286	-0,00510
4,86	-0,00007	-0,00023	-0,00283	-0,00506
4,87	-0,00006	-0,00022	-0,00280	-0,00502
4,88	-0,00006	-0,00022	-0,00277	-0,00497
4,89	-0,00006	-0,00022	-0,00274	-0,00493
4,9	-0,00006	-0,00021	-0,00271	-0,00488
4,91	-0,00006	-0,00021	-0,00268	-0,00484
4,92	-0,00006	-0,00021	-0,00265	-0,00480
4,93	-0,00006	-0,00021	-0,00262	-0,00475
4,94	-0,00006	-0,00020	-0,00259	-0,00471
4,95	-0,00006	-0,00020	-0,00256	-0,00467
4,96	-0,00006	-0,00020	-0,00254	-0,00462
4,97	-0,00006	-0,00020	-0,00251	-0,00458
4,98	-0,00006	-0,00019	-0,00248	-0,00454
4,99	-0,00006	-0,00019	-0,00245	-0,00450

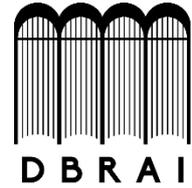
5	-0,00006	-0,00019	-0,00242	-0,00445
5,01	-0,00005	-0,00019	-0,00240	-0,00441
5,02	-0,00005	-0,00018	-0,00237	-0,00437
5,03	-0,00005	-0,00018	-0,00234	-0,00433
5,04	-0,00005	-0,00018	-0,00232	-0,00429
5,05	-0,00005	-0,00018	-0,00229	-0,00425
5,06	-0,00005	-0,00018	-0,00227	-0,00421
5,07	-0,00005	-0,00017	-0,00224	-0,00416
5,08	-0,00005	-0,00017	-0,00222	-0,00412
5,09	-0,00005	-0,00017	-0,00219	-0,00408
5,1	-0,00005	-0,00017	-0,00217	-0,00404
5,11	-0,00005	-0,00016	-0,00214	-0,00400
5,12	-0,00005	-0,00016	-0,00212	-0,00397
5,13	-0,00005	-0,00016	-0,00210	-0,00393
5,14	-0,00005	-0,00016	-0,00207	-0,00389
5,15	-0,00005	-0,00016	-0,00205	-0,00385
5,16	-0,00005	-0,00016	-0,00203	-0,00381
5,17	-0,00005	-0,00015	-0,00200	-0,00377
5,18	-0,00004	-0,00015	-0,00198	-0,00374
5,19	-0,00004	-0,00015	-0,00196	-0,00370
5,2	-0,00004	-0,00015	-0,00194	-0,00366
5,21	-0,00004	-0,00015	-0,00192	-0,00362
5,22	-0,00004	-0,00014	-0,00190	-0,00359
5,23	-0,00004	-0,00014	-0,00187	-0,00355
5,24	-0,00004	-0,00014	-0,00185	-0,00352
5,25	-0,00004	-0,00014	-0,00183	-0,00348
5,26	-0,00004	-0,00014	-0,00181	-0,00345
5,27	-0,00004	-0,00014	-0,00179	-0,00341
5,28	-0,00004	-0,00013	-0,00177	-0,00338
5,29	-0,00004	-0,00013	-0,00175	-0,00334
5,3	-0,00004	-0,00013	-0,00173	-0,00331
5,31	-0,00004	-0,00013	-0,00171	-0,00327
5,32	-0,00004	-0,00013	-0,00170	-0,00324
5,33	-0,00004	-0,00013	-0,00168	-0,00321
5,34	-0,00004	-0,00013	-0,00166	-0,00317

5,35	-0,00004	-0,00012	-0,00164	-0,00314
5,36	-0,00004	-0,00012	-0,00162	-0,00311
5,37	-0,00004	-0,00012	-0,00160	-0,00308
5,38	-0,00004	-0,00012	-0,00159	-0,00305
5,39	-0,00004	-0,00012	-0,00157	-0,00301
5,4	-0,00003	-0,00012	-0,00155	-0,00298
5,41	-0,00003	-0,00012	-0,00153	-0,00295
5,42	-0,00003	-0,00011	-0,00152	-0,00292
5,43	-0,00003	-0,00011	-0,00150	-0,00289
5,44	-0,00003	-0,00011	-0,00148	-0,00286
5,45	-0,00003	-0,00011	-0,00147	-0,00283
5,46	-0,00003	-0,00011	-0,00145	-0,00280
5,47	-0,00003	-0,00011	-0,00144	-0,00278
5,48	-0,00003	-0,00011	-0,00142	-0,00275
5,49	-0,00003	-0,00011	-0,00141	-0,00272
5,5	-0,00003	-0,00010	-0,00139	-0,00269
5,51	-0,00003	-0,00010	-0,00137	-0,00266
5,52	-0,00003	-0,00010	-0,00136	-0,00263
5,53	-0,00003	-0,00010	-0,00134	-0,00261
5,54	-0,00003	-0,00010	-0,00133	-0,00258
5,55	-0,00003	-0,00010	-0,00132	-0,00255
5,56	-0,00003	-0,00010	-0,00130	-0,00253
5,57	-0,00003	-0,00010	-0,00129	-0,00250
5,58	-0,00003	-0,00010	-0,00127	-0,00248
5,59	-0,00003	-0,00009	-0,00126	-0,00245
5,6	-0,00003	-0,00009	-0,00125	-0,00242
5,61	-0,00003	-0,00009	-0,00123	-0,00240
5,62	-0,00003	-0,00009	-0,00122	-0,00237
5,63	-0,00003	-0,00009	-0,00121	-0,00235
5,64	-0,00003	-0,00009	-0,00119	-0,00233
5,65	-0,00003	-0,00009	-0,00118	-0,00230
5,66	-0,00003	-0,00009	-0,00117	-0,00228
5,67	-0,00003	-0,00009	-0,00116	-0,00225
5,68	-0,00003	-0,00009	-0,00114	-0,00223
5,69	-0,00003	-0,00008	-0,00113	-0,00221

5,7	-0,00003	-0,00008	-0,00112	-0,00219
5,71	-0,00003	-0,00008	-0,00111	-0,00216
5,72	-0,00002	-0,00008	-0,00110	-0,00214
5,73	-0,00002	-0,00008	-0,00108	-0,00212
5,74	-0,00002	-0,00008	-0,00107	-0,00210
5,75	-0,00002	-0,00008	-0,00106	-0,00208
5,76	-0,00002	-0,00008	-0,00105	-0,00205
5,77	-0,00002	-0,00008	-0,00104	-0,00203
5,78	-0,00002	-0,00008	-0,00103	-0,00201
5,79	-0,00002	-0,00008	-0,00102	-0,00199
5,8	-0,00002	-0,00008	-0,00101	-0,00197
5,81	-0,00002	-0,00007	-0,00100	-0,00195
5,82	-0,00002	-0,00007	-0,00099	-0,00193
5,83	-0,00002	-0,00007	-0,00097	-0,00191
5,84	-0,00002	-0,00007	-0,00096	-0,00189
5,85	-0,00002	-0,00007	-0,00095	-0,00187
5,86	-0,00002	-0,00007	-0,00094	-0,00185
5,87	-0,00002	-0,00007	-0,00093	-0,00183
5,88	-0,00002	-0,00007	-0,00093	-0,00182
5,89	-0,00002	-0,00007	-0,00092	-0,00180
5,9	-0,00002	-0,00007	-0,00091	-0,00178
5,91	-0,00002	-0,00007	-0,00090	-0,00176
5,92	-0,00002	-0,00007	-0,00089	-0,00174
5,93	-0,00002	-0,00007	-0,00088	-0,00172
5,94	-0,00002	-0,00006	-0,00087	-0,00171
5,95	-0,00002	-0,00006	-0,00086	-0,00169
5,96	-0,00002	-0,00006	-0,00085	-0,00167
5,97	-0,00002	-0,00006	-0,00084	-0,00166
5,98	-0,00002	-0,00006	-0,00083	-0,00164
5,99	-0,00002	-0,00006	-0,00083	-0,00162
6	-0,00002	-0,00006	-0,00082	-0,00161



**ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE  
CHIMBORAZO**



**DIRECCIÓN DE BIBLIOTECAS Y RECURSOS  
PARA EL APRENDIZAJE Y LA INVESTIGACIÓN**

**UNIDAD DE PROCESOS TÉCNICOS  
REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA**

**Fecha de entrega:** 19 / 03 / 2021

<b>INFORMACIÓN DE LA AUTORA</b>	
<b>Nombres – Apellidos:</b> MARÍA BELÉN AMAGUAÑA GUEVARA	
<b>INFORMACIÓN INSTITUCIONAL</b>	
<b>Facultad:</b> CIENCIAS	
<b>Carrera:</b> BIOFÍSICA	
<b>Título a optar:</b> BIOFÍSICA	
<b>f. Analista de Biblioteca responsable:</b>	 Firmado electrónicamente por: ELIZABETH FERNANDA AREVALO MEDINA

