

Propiedades topológicas de redes para el agua en diferentes fases termodinámicas.

Benjamín V. Ramírez^{1, 2}, Rosa M. Benito², Ana L. Benavides¹

¹División de Ciencias e Ingenierías, Universidad de Guanajuato, León, Gto. 37150, México

²Grupo de Sistemas Complejos, E.T.S.I.A.A.B. Universidad Politécnica de Madrid. Madrid 28040, España

El estudio del agua ha sido siempre un área de investigación muy activa dentro de la comunidad científica debido a su fundamental importancia para la vida y por presentar propiedades muy interesantes, como la de ser un buen solvente o contar con un diagrama de fases muy variado [1]. A pesar de poseer una estructura molecular muy simple presenta un comportamiento anómalo que no aparece en otros líquidos. Estas anomalías están relacionadas con los enlaces de puente de hidrógeno [2] y por esa razón es importante comprender el comportamiento asociado a dichas redes.

Mediante la técnica de dinámica molecular hemos realizado simulaciones para generar la configuración molecular empleando diferentes modelos de agua, como el TIP5P [3], TIP4P/2005 [4] y TIP4P/Ice [5] a distintas condiciones de presión y temperatura. A partir de los datos de simulación hemos construido redes para la estructura del agua teniendo en cuenta las interacciones intermoleculares por enlaces de puente de hidrógeno, para ello hemos utilizado distintos criterios geométricos. En la Figura 1 se muestra una de las redes para el modelo TIP4P/2005. Una vez establecidas las correspondientes redes se calcularon algunas propiedades topológicas como el grado medio ($\langle k \rangle$), el coeficiente de clustering (C), la longitud de camino medio (L) y las distribuciones de grado.

Propiedad	TIP5P	TIP4P/2005		
	C1	C2	C3	C4
$\langle k \rangle$	3.26	3.40	3.08	3.79
C	0.029	0.038	0.004	0.009
L	22.7	17.15	9.02	8.17

Table 1: Resultados de las propiedades topológicas para los modelos de agua TIP5P y TIP4P/2005 en fase líquida a una temperatura de 298 K y una presión de 1 bar, empleando distintos criterios geométricos de enlace.

Se construyeron redes con el propósito de analizar el comportamiento de las propiedades topológicas en diferentes fases y su transición entre ellas. Por este motivo se realizaron diversas simulaciones variando la temperatura (manteniendo la presión constante) para las regiones cercanas a la transición de estado del diagrama de fase correspondiente.

En general se observó que las propiedades topológicas de las redes generadas son sensibles tanto al cambio de modelo de agua como al criterio de puente de hidrógeno, como puede verse en la Tabla 1 donde se aprecian resultados muy distintos en algunas cantidades incluso para el mismo modelo. También se han detectado cambios en el comportamiento de algunas propiedades cuando tiene lugar la transición de estado para algunos modelos de agua.

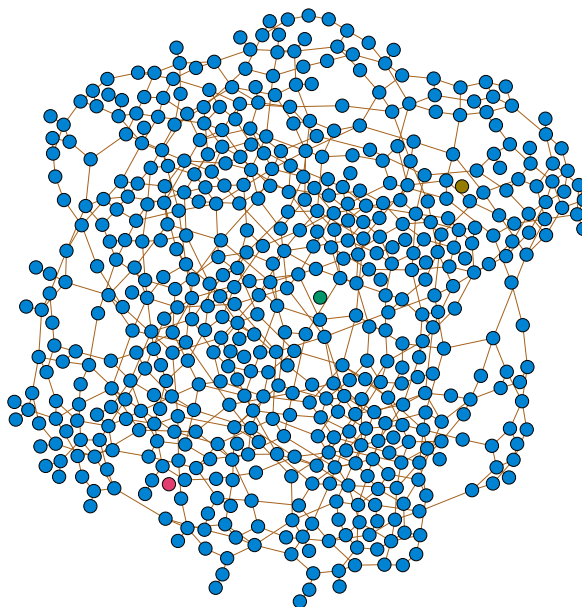


Figure 1: Representación de una red en condiciones ambientales de presión y temperatura para el modelo TIP4P/2005. Los nodos representan las moléculas de agua, mientras que los enlaces corresponden a las interacciones por puente de hidrógeno entre distintas moléculas.

- [1] J. L. Aragones and C. Vega, *J. Chem. Phys.*, 2009, **130**, 244504.
- [2] F. Mallamace, C. Branca, M. Broccio, C. Corsaro, C.-Y. Mou and S.-H. Chen, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, 2007, **104**, 18387.
- [3] M. W. Mahoney, W. L. Jorgensen, *J. Chem. Phys.*, 2000, **112** 8910.
- [4] J. L. F. Abascal and C. Vega, *J. Chem. Phys.*, 2005, **123**, 234505.
- [5] J. L. F. Abascal, E. Sanz, R. García Fernández and C. Vega, *J. Chem. Phys.*, 2005, **122**, 234511.