

## Dinámica y estructura de la cristalización del agua: simulaciones con TIP4P y TIP4P2005

- Carlos Gaston Ferrara,<sup>1,2</sup> Tomas Grigera,<sup>1</sup> Valentin Attarantato,<sup>3</sup> Pedro Jose Didone<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, CONICET-UNLP*

<sup>2</sup>*Instituto de Ingeniería y Agronomía, Universidad Nacional Arturo Jauretche*

<sup>3</sup>*Facultad de Ciencias Exactas - Universidad Nacional de La Plata*

En el presente trabajo realizamos un estudio de los cambios que se producen en la dinámica y estructura del agua líquida en su transición hacia la formación de cristales de hielo en presencia de semillas de cristalización. Para estudiar este problema a partir de simulaciones por Dinámica Molecular (MD) se utilizaron dos modelos de agua diferentes, TIP4P y TIP4P2005, ambos modelos de cuatro puntos y en todos los casos se colocó una semilla de cristalización de iguales características. Se analizó y caracterizó el comportamiento dinámico y estructural del agua en diferentes condiciones termodinámicas, a partir de diferentes variables, como son la distribución de puentes de hidrógeno, perfil de densidad, coeficiente de autodifusión, desplazamiento cuadrático medio o parámetros de orden. Todas las simulaciones se realizaron utilizando la técnica de dinámica molecular (MD), implementada con el paquete de GROMACS (GROningen MACHine for Chemical Simulations).