

Influência do campo magnético na estrutura e estabilidade de clusters de água (H₂O)_n n = 2-15

Evelyn Jeniffer de Lima Toledo (IC), Zuy Maria Magriotis* (PQ), Teodorico de Castro Ramalho (PQ)

Departamento de Química/Universidade Federal de Lavras
zuy@ufla.br

Palavras Chave: clusters, campo magnético, cálculo teórico.

Magnitude do Campo (u.a.)	ΔE (kcal.mol ⁻¹)
Experimental ²	11,3
0	10,6
0,001	10,6
0,010	10,5
0,020	11,4
0,050	15,7

Introdução

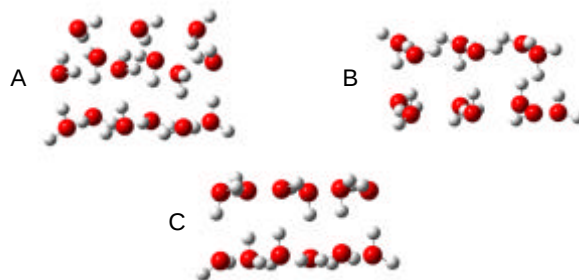
O

Na era industrial diante do problema dos sais que se depositavam nas paredes internas dos canos, observou-se que a água submetida a um campo magnético não permitia depósitos e os cristais já incrustados nos canos dissolviam-se. Atualmente, apesar de se encontrar muitas evidências experimentais e relatos de alterações do comportamento da água tratada magneticamente, não há embasamento conceitual ou qualquer explicação para tais efeitos. Em seus trabalhos, Zhou¹ propõe o enfraquecimento e quebra das ligações de hidrogênio da água quando submetida à ação de campos magnéticos. Entretanto, ainda não há trabalhos teóricos capazes de prever a distribuição e o tamanho de clusters em líquidos submetidos a campos magnéticos. Assim, o objetivo deste trabalho é estudar os efeitos do campo magnético na estrutura e estabilidade de clusters de água utilizando-se coordenadas iniciais obtidas na literatura^{2,3}. Foram feitos cálculos single-point destas estruturas em nível DFT, com funcional de densidade B3LYP e a função de base cc-pvtz. Todos os cálculos foram feitos utilizando o programa Gaussian 03. O campo magnético foi simulado utilizando-se o comando "Field" que adiciona um campo finito em certa direção⁴. A magnitude do campo variou de 0,001 a 0,05 u.a..

Observa-se que, na ausência de campo magnético, o valor de energia de interação encontrado teve uma diferença de 6% do valor experimental, demonstrando que a metodologia e as geometrias utilizadas reproduziram de forma confiável os dados experimentais.

A tabela 1 mostra, também, que à medida que se aumenta a magnitude do campo, cresce a energia de interação intermolecular dos clusters de água, concordando com os resultados da literatura.^{1,2}

Observou-se uma mudança da estabilidade relativa dos clusters em função do campo magnético. Em campo nulo e no campo 0,001 u.a. a estrutura mais estável foi o cluster de 15 (figura 1A); já para os campos de 0,010 e 0,020 u.a. foi o de 13 (figura 1B), e para o campo de 0,050 o cluster de 12 (figura 1C). Nas condições estudadas observou-se, também, que à medida que a magnitude do campo aumenta há uma



diminuição do tamanho do cluster estável.

Figura 1. Geometria dos clusters mais estáveis.

Resultados e Discussão

A energia de interação molecular foi calculada utilizando a equação 1:

$$\Delta E = [E(\text{cluster}) - nE(\text{monômero})]/n \quad (1)$$

onde ΔE é a energia de interação por molécula de água do cluster, n é o número de moléculas de água do cluster e $E(\text{monômero})$ é a energia do monômero nas mesmas condições dos clusters.⁵ Os resultados para $n \geq 8$ estão na tabela 1:

Tabela 1. Energia de Interação Molecular

29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Conclusões

Os resultados encontrados demonstraram que a metodologia utilizada foi adequada concordando com os resultados experimentais.

A magnitude do campo magnético influenciou fortemente a estabilidade dos clusters.

Agradecimentos

Ao prof. C. Taft (CBPF) pelos recursos computacionais.

¹ Zhou, K. X.; Lu, G. W.; Zhou, Q.C. ; Song, J. H.; Jiang, S. T. e Xia, H.R. *J. Ap. Phys.* 2000, 88, 1802.

² Maheshwary, S.; Patel, N.; Sathyamurthy, N.; Kulkarni, A.D.; Gadre, S.R. *J. Phys. Chem. A.* 2001, 105, 10525.

³ <http://www-wales.ch.cam.ac.uk/~wales/ccd/anantwatd.html>

⁴ Zyubina, T.S.; Dyakov, Y.A.; Lin, S.H.; Bandrauk, A.D.; Mebel, A.M. *J. Chem. Phys.* 2005, 123, 134320.

⁵ Porto, M. E. G. *Dissertação de doutorado*, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2004.