

Modelagem computacional de Sais Hidratados: construção de um modelo de potenciais interatômicos por derivação empírica.

Maria José Xavier¹(IC), Nivan Bezerra da costa Jr.¹, (PQ), Marcelo Leite dos Santos¹ (PG), Ledjane Silva Barreto¹ (PQ), Iara de Fátima Gimenez¹(PQ)
 gimenez@ufs.br.

¹Departamento de Química. Universidade Federal de Sergipe. Rosa Elze. São Cristóvão. Sergipe. CEP: 49500-000.

Palavras Chave: Simulação, Cristais, Cálculos *ab initio* e semi-empíricos.

Introdução

Os materiais iônico-moleculares são sistemas de estruturas complexas, visto que as interações iônicas e covalentes são importantes. O balanço das interações átomo-átomo é responsável pelas posições de equilíbrio de todo o sólido. Para modelar as forças atuantes entre os átomos, as interações são representadas satisfatoriamente utilizando-se parâmetros potenciais, cujo ajuste leva à otimização da estrutura. Muitos métodos aplicados conseguem potenciais bastante realistas que descrevem com boa precisão várias propriedades dos sólidos em questão. Os experimentos computacionais são ferramentas valiosas e ocupam uma posição única entre os regimes tradicionais da teoria e dos experimentos em laboratório. O objetivo do presente trabalho foi a modelagem computacional da estrutura cristalina da bischofita (MgCl₂.6H₂O) utilizando-se o programa GULP (*General Utility Lattice Program*).

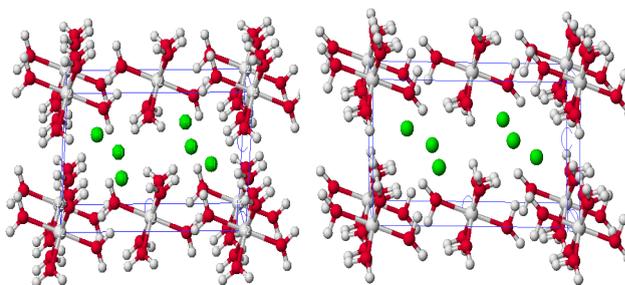
Resultados e Discussão

Normalmente, o ponto de partida deste tipo de trabalho é a obtenção de potenciais já descritos para sistemas semelhantes, procedendo-se um ajuste empírico para cada caso. Contudo, dado não haverem parâmetros potenciais adequados para serem transferidos ao sistema mediante pequenos ajustes, a estratégia adotada foi a determinação de potenciais interatômicos baseados em cálculos *ab initio* e semi-empírico. Os parâmetros potenciais calculados estão mostrados na tabela 1.

Através do uso dos potenciais mostrados na tabela 1, após ajustes, foi possível obter uma otimização da estrutura do mineral em questão, com uma diferença em termos percentuais de 8% no volume da cela unitária, em relação à estrutura cristalográfica descrita por Busing e Agron, determinada experimentalmente por difração de nêutrons.¹ A diferença apresentada entre a estrutura experimental e a simulada é considerada satisfatória para este tipo de estudo, visto que, os valores obtidos de parâmetros cristalográficos reproduzem com bom acordo o arranjo estrutural para o sistema bischofita.

Tabela 1. Parâmetros potenciais derivados para o sistema bischofita (MgCl₂.6H₂O).

i	j	A _{ij} (eV)	B _{ij} (Å)	C _{ij} (eVÅ ⁶)
Mg core	O shel	36271,00	0.2410	676.500
Mg core	Cl shel	458383,0	0.2740	7692.70
O shel	O shel	12533,60	0,2130	12.0900
Cl shel	Cl shel	1096.9989	0.3892	0.00000
O shel	Cl shel	12000180.07	0.1930	0.00000



H core	Cl shel	131.6028	0.3094	2.10320
--------	---------	----------	--------	---------

* Parâmetros Potenciais derivados neste trabalho: forma potencial de Buckingham: $V_{ij} = A_{ij} \exp(-B_{ij}/r_{ij}) - C_{ij}/r_{ij}^6$.

Figura 1. Representação das estruturas simulada e experimental.

Conclusões

Os estudos de simulação desenvolvidos neste trabalho permitiram a modelagem da estrutura cristalina da bischofita, com satisfatória concordância em relação à estrutura experimental, pela utilização de potenciais calculados por métodos *ab initio* e semi-empírico, utilizados posteriormente no programa GULP.

Agradecimentos

CNPq/PIBIC

1. P. A. Agron, W. R. Busing, Acta Cryst. C41(1985) 8