

Dependência da estrutura da interface Au/H₂O com o modelo do solvente em simulações de Monte Carlo

Tatiana P. L. de Souza* (PG), Rodrigo de Santis Neves (PQ), Artur de Jesus Motheo(PQ).

Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, SP - CEP13560-970, Brasil.
*tsouza@iqsc.sc.usp.br

Palavras Chave: água, Monte Carlo, ouro

Introdução

A estrutura do solvente em interfaces eletroquímicas é continuamente objeto de estudo estratégico das simulações computacionais. O sucesso dessas investigações depende criticamente da disposição de funções de potencial intermolecular adequadas para a descrição das interações entre as espécies envolvidas.

O trabalho a ser apresentado refere-se ao estudo de diferentes modelos da água em contato com uma superfície lisa de ouro, sem a aplicação de um campo externo. Deseja-se investigar a influência da natureza do modelo sobre as características da estrutura da interface. Foram testados os modelos desenvolvidos por Jorgensen para a água: TIP3P¹, TIPS2¹, TIP4P¹ e TIP5P². Os três primeiros são modelos planares enquanto o modelo TIP5P é tetraédrico.

Experimental

As simulações de Monte Carlo foram realizadas sob as seguintes condições:

- Sistema: 250 moléculas de água entre dois eletrodos planos de ouro na direção **z**;
- Caixa de Simulação: Geometria ortorrômbica, com condições de fronteira periódicas aplicadas nas direções **x** e **y**;
- Aplicação do método da soma de Ewald bidimensional;
- Equilíbrio: 5.000 ciclos de Monte Carlo;
- Produção: 10.000 ciclos de Monte Carlo.

Resultados e Discussão

Os Perfis de Densidade do Solvente em relação à Distância ao Eletrodo, mostrados na Figura 1, mostram semelhanças nas características gerais para todos os modelos, porém para o modelo TIP5P a camada de hidratação do eletrodo (região I) é menos densa, e a formação de ligações de hidrogênio, entre a primeira e a segunda camadas de hidratação (região II), é mais homogênea.

A Figura 2 mostra os Perfis de Densidade do Solvente em relação ao Eletrodo. Observa-se uma clara influência da geometria do modelo, pois o modelo tetraédrico, diferentemente dos outros, exibe uma distribuição homogênea dos momentos de dipolo, o que indica um grau de desordem mais acentuado nesta região da interface.

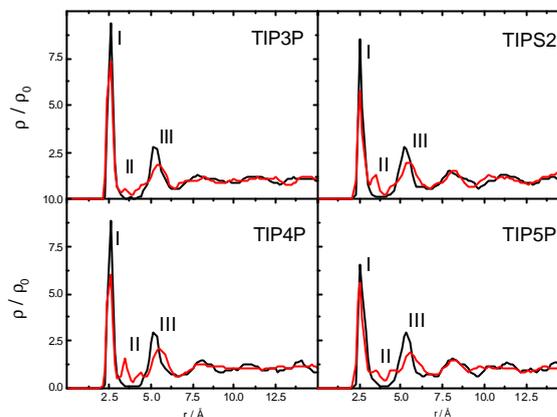


Figura 1. Perfis de densidade normalizados dos átomos de H e do átomo de O em função das distância ao eletrodo de Au. — (O); — (H).

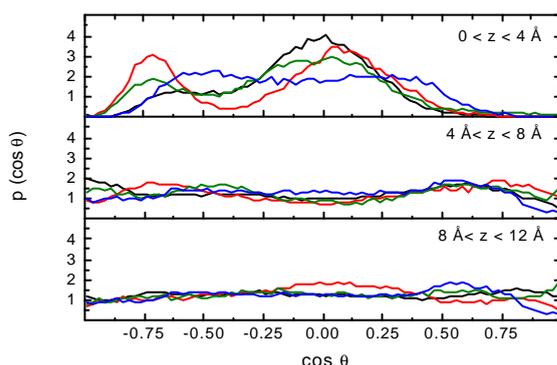


Figura 2. Distribuição dos momentos de dipolo das moléculas de água em relação ao eixo normal à superfície do eletrodo para os modelos de solvente estudados. — (TIP3P); — (TIPS2); — (TIP4P); — (TIP5P).

Conclusões

Os resultados fortalecem a idéia de que a geometria do modelo da água influencia as características do sistema interfacial simulado, sendo que o modelo tetraédrico leva a estrutura da região interfacial a um patamar menos ordenado.

Agradecimentos

Ao CNPQ.

¹W. L. Jorgensen, J. Chandrasekhar, and J. D. Madura, *Journal of Chemical Physics* **1983** 79 926

²M. W. Mahoney and W. L. Jorgensen, *Journal of Chemical Physics* **2000** 112 8910.