



XVI congresso interno de iniciação científica

Ginásio Multidisciplinar da Unicamp  
24 a 25 de setembro de 2008



E0573

### **INTRODUÇÃO À DINÂMICA MOLECULAR DE ZEÓLITOS**

Tatiana Mello da Costa Faro (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Munir Salomão Skaf (Orientador),  
Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Simulação de dinâmica molecular (MD) é uma técnica utilizada para se determinar propriedades termodinâmicas, estruturais e dinâmicas de um sistema mecânico-estatístico atômico-molecular. A técnica consiste em resolver as equações newtonianas de movimento das partículas para gerar sucessivas configurações de um sistema (ensemble) no estado termodinâmico desejado a partir de potenciais de interação entre os átomos (conhecidos como “campos de força”). Neste projeto pretendemos estudar a dinâmica de cátions trocáveis em zeólitos. Nesta primeira etapa, foi realizado um estudo preliminar de íons  $Al^{3+}$  em solução aquosa como parte do processo de familiarização com as técnicas de simulação. Embora o comportamento de íons  $Al^{3+}$  em solução aquosa seja importante em vários contextos (síntese sol-gel, por exemplo), não se encontra na literatura um potencial de interação entre  $Al^{3+}$  e água que seja suficientemente simples para uso efetivo em simulações atômicas clássicas por MD. Neste trabalho, apresenta-se um estudo por MD um sistema com um íon  $Al^{3+}$  em 500 moléculas de água SPC com o intuito de testar um potencial simples (termo de Lennard-Jones mais potencial de Coulomb) para descrever as interações íon-água. Através das trajetórias obtidas, estudaram-se diversas propriedades dessa solução, como a estrutura das camadas de solvatação do íon  $Al^{3+}$ , a difusão e a dinâmica reorientacional do complexo íon-solvente. Obtiveram-se resultados consistentes com medidas experimentais e com métodos computacionais mais sofisticados.

Dinâmica molecular - Zeólitos - Química teórica