



E0554

### **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”). Por meio de simulações de MD, é possível estudar zeólitos, aluminossilicatos que são formados por tetraedros de  $TO_4$  (com  $T=Si$  ou  $Al$ ) e possuem cátions trocáveis. Os zeólitos apresentam alta porosidade e alta área superficial devido aos túneis e às cavidades regulares presentes em sua estrutura cristalina; conseqüentemente, os zeólitos são amplamente usados como peneiras moleculares e catalisadores, sendo assim materiais de grande importância tecnológica. Neste projeto, estudamos faujasitas sódicas desidratadas utilizando a aproximação da matriz estática (ou seja, movimentos vibracionais da estrutura zeolítica não são permitidos). Por meio das trajetórias obtidas, mapeamos as posições preferenciais dos cátions  $Na^+$ , calculamos os fatores de ocupação para os distintos sítios e estudamos as propriedades espectroscópicas (espectros de infra-vermelho longínquo) do sistema.

Zeólitos - Dinâmica molecular - Química teórica