



E0506

ESTUDOS AB INITIO DE PROPRIEDADES ESTRUTURAIS DO TRIMERO DE ALUMINIO $Al_3(OH)_4^{5+}$ E CÁLCULO DE PROPRIEDADES POR SIMULAÇÃO DE DINÂMICA BROWNIANA

Thiago Duarte (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Celso Aparecido Bertran (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

O estudo das espécies hidroxiladas de alumínio em solução é importante para diversas áreas como a médica e farmacêutica, materiais cerâmicos e catalisadores e no processo de tratamento de água. Nestas soluções as espécies hidroxiladas de alumínio existentes dependem do pH. Neste projeto, a espécie denominada de trímero $[Al_3(OH)_4]^{5+}$ foi estudada. O trímero é importante por ser o “bloco formador” para as espécies de alumínio mais complexas. Porém, compostos formados por esta espécie não foram isolados até o momento, desta forma, o uso de ferramentas da Química Teórica representam uma boa alternativa para investigar suas propriedades. Neste projeto, a estrutura desta espécie foi otimizada utilizando o software Gaussian 98 e bases de função de onda adequadas. Além da estrutura foi determinada a distribuição de cargas na espécie tanto no vácuo como em solução, considerando o solvente um meio dielétrico contínuo. A otimização da estrutura do trímero mostrou que ele é rígido e simétrico, devido a isso, a sua distribuição de carga aproximou a estrutura para uma esfera com carga centralizada. Além das propriedades estruturais determinou-se para a espécie, através de dinâmica Browniana utilizando o software BrownRig, o coeficiente de difusão em solução e valores de potencial zeta em função da protonação da espécie.

Íon alumínio - Hidróxido de alumínio - Simulação browniana