

Cristais inorgânicos do arranjo Berílio. lítio. Selênio e Silício

A. Gobato¹, D. F. Gobato², R. Gobato²

alekssandergobato@hotmail.com¹, desirefg@bol.com.br², ricardogobato@seed.pr.gov.br²

¹ Faculdade Pitágoras de Londrina, Faculdade Tecnológica de Londrina, Londrina, Paraná

² Secretaria Estadual de Educação do Estado do Paraná, Londrina, Paraná

INTRODUÇÃO

A utilização de cristais inorgânicos na tecnologia vem de ampla data. Desde os cristais de quartzo para os rádios receptores comuns aos chips de computadores com novos materiais semicondutores. Elementos como o Se, Li, Be, e Si [1-2], são de grande utilização na tecnologia. A utilização de novos cristais inorgânicos na tecnologia tem sido amplamente estudada. O desenvolvimento de novos compostos advindos deste arranjo podem trazer avanços tecnológicos nas mais diversas áreas do conhecimento. A provável dificuldade de encontrar tais cristais na natureza ou sintetizados, sugerem um estudo avançado do tema. Uma preliminar pesquisa bibliográfica não indicou quaisquer compostos do referido arranjo destes elementos químicos. Deste fato nosso estudo pode levar a obtenção de novos cristais a serem utilizados na indústria de materiais. Para este, um estudo computacional utilizando softwares com métodos Mecânica Molecular, *ab initio*, DFT [3], e empírico com técnica de microesmagamento e análise conoscópica [4] pode levar a obtenção de tais cristais.

OBJETIVO

Nosso trabalho tem como objetivo o estudo, caracterização provável e/ou obtenção de novos cristais inorgânicos formados de um arranjo de quatro elementos: Selênio, Lítio, Berílio e Silício.

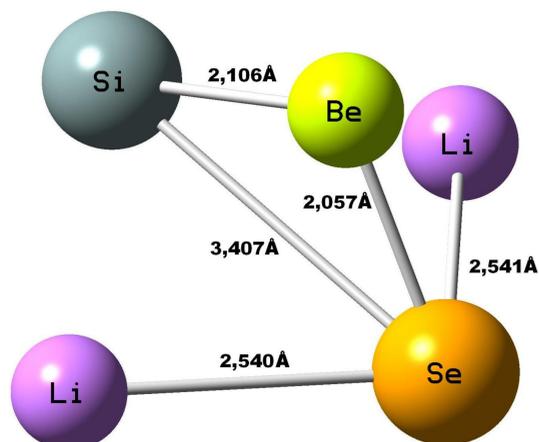


Figura 1. Representação da estrutura molecular obtida da semente SiSeBeLi_2 , obtida através de cálculo computacional via método *ab initio*, com funcional de base 6.31G, obtida utilizando o software *HyperChem 7.5 Evaluation* [5,8].

Tabela 1. Dados da molécula semente SiSeBeLi_2 .

Fórmula química	Si Se Be Li_2
Massa atômica	129,94 g/mol
Sistema cristalino	triclinico
Densidade	215,757 g/cm ³
Tipo de fórmula	NOPQ2
Sequência Wyckoff	a5

Fonte: [5-6]

Tabela 2. Parâmetros moleculares dos átomos da molécula SiSeBeLi_2 .

Parâmetros atômicos				
Átomo	Wyckoff	x/a	y/b	z/c
Si	1a	-0,37900	-1,08000	1,70700
Se	1a	-0,67100	0,68100	-0,73800
Be	1a	-1,66100	-0,53900	0,24000
Li	1a	-0,62400	1,34100	1,61400
Li	1a	0,41200	-1,54200	-0,59400

Fonte: [5-6]

Tabela 3. Parâmetros de ligação dos átomos da molécula SiSeBeLi_2 .

Átomo	NA	NB	NC	Bond	Ângulo	Dihedral
1Si						
2Se	1			3,0272777		
3Be	2	1		1,8506712	40,6512698	
4Li	1	3	2	2,4351417	69,0527075	53,4172985
5Li	3	2	1	2,4492640	68,7308859	-58,1835086

Fonte: [5-6]

REFERÊNCIAS

- [1] R. E. Newnham. *Properties of materials*. Anisotropy, Symmetry, Structure. New York: Oxford University press, 2005.
- [2] C. D. Gribble, A. J. Hall. *A Practical Introduction to Optical Mineralogy*. George Allen & Unwin (Publishers) Ltd, 1985.
- [3] R. G. Parr, W. Yang. *Density Functional Theory*. Oxford University Press, 1989.
- [4] A. J. R. Nardy, F. B. Machado, A. Zanardo, T. M. B. Galembeck. *Mineralogia Óptica de Cristais Transparentes*. Parte Prática. Unesp: Cultura Acadêmica, 2010.
- [5] Hyperchem.7.5 Evaluation. Computational Chemistry, **Hypercube, Inc.** 2003. Gainsville, FL. USA.
- [6] Diamond Demonstration View - Crystal and Molecular Structure Visualization Crystal Impact - K. Brandenburg & H. Putz GbR, Rathausgasse 30, D-53111 Bonn.
- [7] GaussView, Version 5, Roy Dennington, Todd Keith and John Millam, *Semichem Inc.*, Shawnee Mission KS, 2009.
- [8] PubChem. **NCBI**. National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine Rockville Pike, Bethesda, MD, USA.

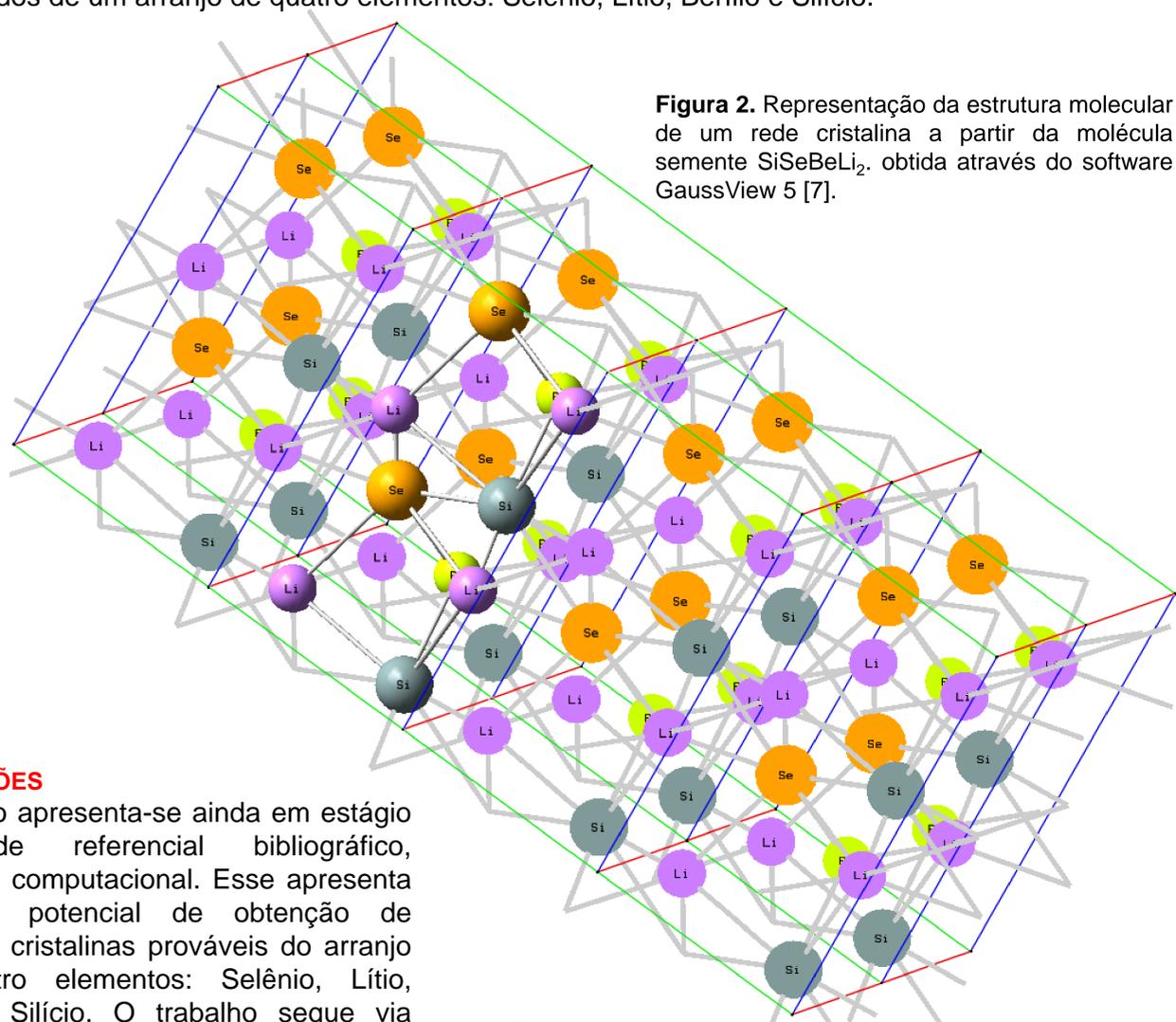


Figura 2. Representação da estrutura molecular de uma rede cristalina a partir da molécula semente SiSeBeLi_2 , obtida através do software *GaussView 5* [7].

CONCLUSÕES

O trabalho apresenta-se ainda em estágio inicial de referencial bibliográfico, simulação computacional. Esse apresenta um bom potencial de obtenção de estruturas cristalinas prováveis do arranjo dos quatro elementos: Selênio, Lítio, Berílio e Silício. O trabalho segue via computacional.

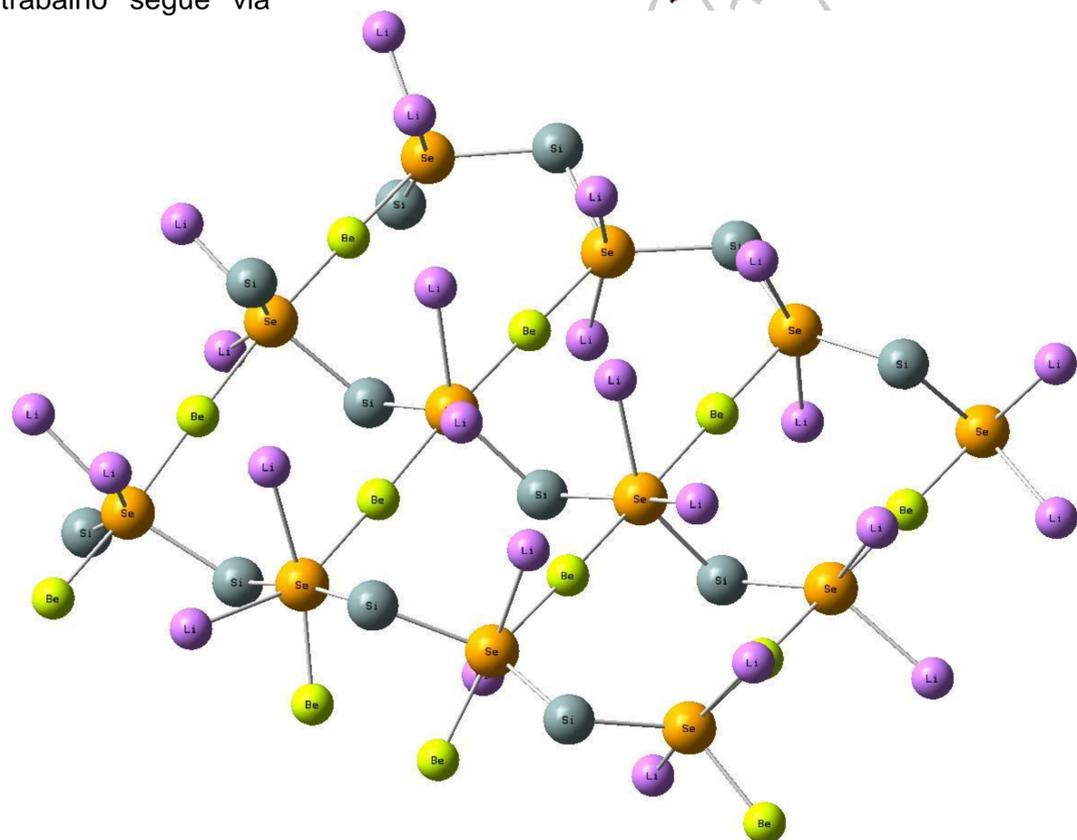


Figura 3. Representação da estrutura cristalina obtida com a semente SiSeBeLi_2 , em arranjo provável, obtida através de cálculo computacional em uma dinâmica molecular via Mecânica Molecular, obtida utilizando o software *HyperChem 7.5 Evaluation* [5,7].