

DEL CRISTAL AL CLUSTER: MODELIZACIÓN MOLECULAR DE CONFIGURACIONES FINITAS DE CaCO₃

Á. FERNÁNDEZ-GONZÁLEZ ⁽¹⁾, L. FERNÁNDEZ-SEIVANE ⁽²⁾, M. PRIETO ⁽¹⁾ Y J. FERRER ⁽²⁾

⁽¹⁾ Dpto. de Geología. Universidad de Oviedo. *mafernan@geol.uniovi.es*

⁽²⁾ Dpto. de Física. Universidad de Oviedo. *ferrer@condmat.uniovi.es*

Las propiedades termodinámicas de los minerales se describen desde una perspectiva macroscópica, en la que se considera al cristal como un ente de dimensiones infinitas. Sin embargo, en los procesos reales como la nucleación y el crecimiento cristalino se ven implicadas entidades finitas cuyas dimensiones y propiedades deben ser consideradas a escala molecular. La configuración de estos cristales incipientes o clusters y la determinación de sus energías de exceso con respecto al cristal ideal es clave para comprender el comportamiento macroscópico de los sistemas en los que se ven implicados. En este trabajo, partiendo de las posiciones atómicas teóricas en los cristales de calcita, aragonito y vaterita, se han confeccionado clusters esféricos virtuales de carbonato de calcio. Con el objetivo de determinar la influencia del tamaño del cluster en su energía y en su geometría, se han preparado tres series de clusters de CaCO₃, una por cada polimorfo, cuyo número de fórmulas va desde 1 hasta 2000. La energía de red de cada cluster se ha calculado con el programa GULP (Gale y Rohl, 2003), usando un campo de fuerzas determinado por Rohl et al. (2003).

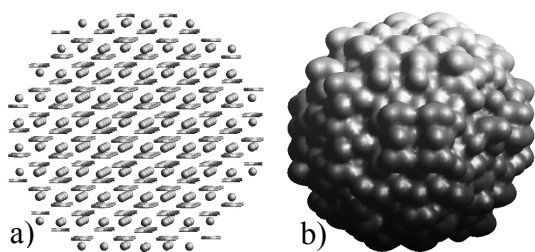


Figura 1: Cluster de aragonito de 250 fórmulas (a) y representación de su superficie molecular (b).

A continuación, se ha llevado a cabo la relajación de los clusters a presión constante y el cálculo de la energía de red de los clusters completamente relajados. En el caso de las entidades de pequeño tamaño, se han considerado también relajaciones y

cálculos energéticos realizados mediante DFT con el programa SIESTA (Soler et al., 2002).

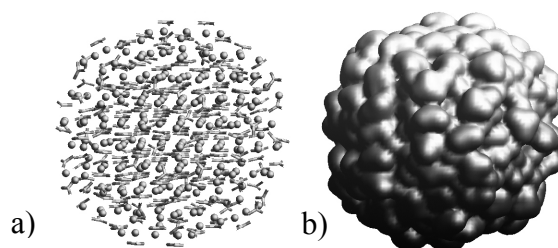


Figura 2: Cluster relajado de aragonito de 250 fórmulas (a) y representación de su superficie molecular final (b).

El trabajo incluye un estudio geométrico (figuras 1 y 2) de cada cluster antes y después de la relajación que permitió conocer la relación entre su volumen y su superficie molecular y un estudio cristalográfico de los clusters relajados en los que se ha simulado su diagrama de difracción de rayos X (figura 3) y se ha comparado con el del polimorfo correspondiente.

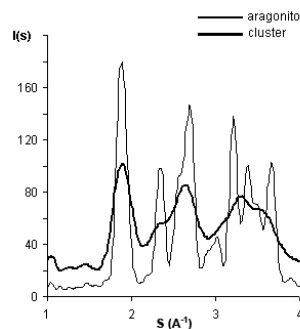


Figura 3: Diagramas de difracción simulados de un cluster de aragonito de 250 fórmulas relajado y de un cristal de aragonito.

REFERENCIAS

Gale, J.D. y Rohl A.L. (2003). *Mol. Simul.*, 29, 291-341.
 Rohl A.L., Wright K. y Gale J.D. (2003). *Am. Miner.*, 88, 921-925.
 Soler J.M., Artacho E., Gale J.D., García A., Junquera J., Ordejón P. y Sánchez-Portal D. (2002). *J. Phys. Condens. Matter.*, 14, 2745-2779.