

Otimização do cálculo de entalpias de rede utilizando meios alternativos ao uso da Constante de Madelung

Aluno: Sérgio Henrique Araújo de Castro

Orientadora: Renata Diniz

Data: 17/02/2022, quinta-feira

Horário: 09:00

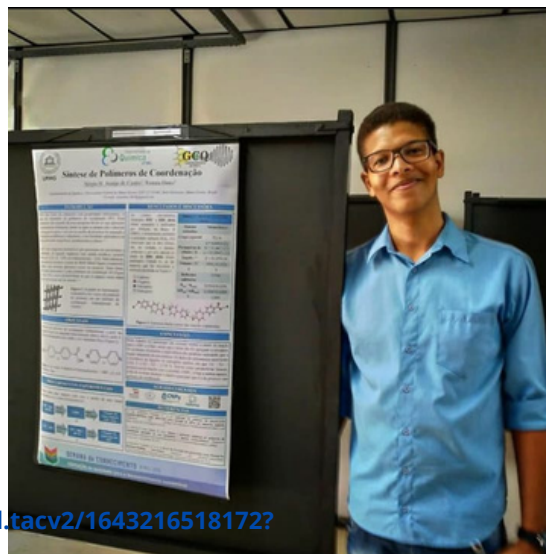
plataforma: Microsoft Teams

[https://teams.microsoft.com/l/meetup-](https://teams.microsoft.com/l/meetup-join/19%3aBOE1G8FzKu9prX1hvv55NBRpL3LrkqU1j1TBzJUSRbo1%40thread.tacv2/1643216518172?context=%7b%22id%22%3a%2264126139-4352-4cd7-b1fb-2a971c6f69a6%22%2c%22oid%22%3a%229ac24705-6cf6-4af8-be29-1b52c4624a83%22%7d)

[join/19%3aBOE1G8FzKu9prX1hvv55NBRpL3LrkqU1j1TBzJUSRbo1%40thread.tacv2/1643216518172?](https://teams.microsoft.com/l/meetup-join/19%3aBOE1G8FzKu9prX1hvv55NBRpL3LrkqU1j1TBzJUSRbo1%40thread.tacv2/1643216518172?context=%7b%22id%22%3a%2264126139-4352-4cd7-b1fb-2a971c6f69a6%22%2c%22oid%22%3a%229ac24705-6cf6-4af8-be29-1b52c4624a83%22%7d)

[context=%7b%22id%22%3a%2264126139-4352-4cd7-b1fb-2a971c6f69a6%22%2c%22oid%22%3a%229ac24705-6cf6-4af8-](https://teams.microsoft.com/l/meetup-join/19%3aBOE1G8FzKu9prX1hvv55NBRpL3LrkqU1j1TBzJUSRbo1%40thread.tacv2/1643216518172?context=%7b%22id%22%3a%2264126139-4352-4cd7-b1fb-2a971c6f69a6%22%2c%22oid%22%3a%229ac24705-6cf6-4af8-be29-1b52c4624a83%22%7d)

[be29-1b52c4624a83%22%7d](https://teams.microsoft.com/l/meetup-join/19%3aBOE1G8FzKu9prX1hvv55NBRpL3LrkqU1j1TBzJUSRbo1%40thread.tacv2/1643216518172?context=%7b%22id%22%3a%2264126139-4352-4cd7-b1fb-2a971c6f69a6%22%2c%22oid%22%3a%229ac24705-6cf6-4af8-be29-1b52c4624a83%22%7d)



Banca examinadora:

MSc. Camila Batista Pinto (Departamento de Química - UFMG)

Profa. Arilza de Oliveira Porto (Departamento de Química - UFMG)

Resumo:

A entalpia de rede é uma propriedade físico-química de interesse para que se determine as características energéticas de um sólido cristalino. Entretanto, a determinação experimental dessa propriedade, bem como seus cálculos, são difíceis, em razão da dificuldade de fazer as reações necessárias ao Ciclo de Born-Haber e de se determinar as Constantes de Madelung. Desta feita, este trabalho se propôs a otimizar os cálculos de entalpia de rede utilizando meios alternativos ao uso da Constante de Madelung. Para tanto, os dados de entalpia de rede de referência foram comparados aos encontrados pelos pesquisadores Glasser e Jenkins em sua equação denominada “equação de Glasser-Jenkins”. Foi determinada a razão dos desvios dos valores de referência observados e foi modelada uma equação que permite calcular os fatores de correção que transformam os resultados encontrados pela equação de Glasser-Jenkins em resultados mais exatos, utilizando aplicativos gráficos. Foi constatado que a equação de Glasser-Jenkins não prediz de forma eficaz as entalpias de rede de sólidos com força iônica 1 e 3, porque não considera as distâncias e as polarizabilidades dos íons formadores do sólido cristalino na modelagem de sua equação. Também foi constatado que a correção modelada neste trabalho foi exitosa para haletos de metais alcalinos, haja vista que foi possível calcular com um erro de até - 3,6 % as entalpias de rede dessa classe de compostos. Por fim, este Trabalho produziu conhecimentos inéditos, abriu precedente para novos estudos e gerou um avanço no entendimento do significado da força iônica na equação de Glasser-Jenkins.