

Modelo em escala da estrutura da apatita para estudo das mudanças cristaloquímicas nos processos geológicos

Elisângela Cordeiro Pessoa, Viviane Carillo Ferrari & M. Cristina M. de Toledo
Instituto de Geociências, Universidade de São Paulo

1. Objetivos

O objetivo do projeto foi a construção do modelo em escala da estrutura do mineral, apatita, de fórmula $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{F},\text{OH},\text{Cl})_2$, pertencente ao grupo espacial P63/m[2]. O modelo visa destacar os diferentes sítios cristaloquímicos e servirá para estudo da complexa estrutura da apatita, incluindo as suas modificações cristaloquímicas durante os processos geológicos, endógenos e exógenos, e as consequências em suas propriedades, dando subsídios, assim, às pesquisas sobre seu comportamento e aproveitamento.

2. Material e/ou métodos

Para a confecção do modelo, foi realizada pesquisa bibliográfica para o entendimento da disposição espacial dos átomos e as operações de simetria presentes na estrutura cristalográfica da apatita, tendo sido útil o programa Diamond Version 2.1c [1]. Além disso, foram estudados os tipos de substituições possíveis na cela unitária da apatita, formando as variedades fluorapatita, hidroxiapatita e cloroapatita.

O modelo inicial da cela unitária da estrutura da fluorapatita foi construído na proporção 1 Å igual a 4cm, em armação de ferro, sendo os átomos representados por bolinhas de isopor e as ligações químicas por varetas de madeira; o modelo final teve sua escala modificada para 1 Å igual a 2cm, e foi construído em armação de ferro mais fina que o inicial, com as ligações químicas também representadas por varetas de metal de ferro e os átomos por bolinhas de biscuit para maior precisão na representação do raio iônico.

3. Resultados e discussão

Com o programa utilizado e a bibliografia foram construídos os modelos (figuras 1 e 2),

localizando-se os átomos, as distâncias interatômicas, os ângulos e os planos de simetria.

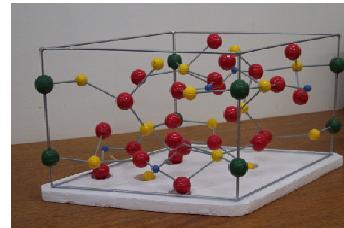


Figura 1: Modelo inicial.

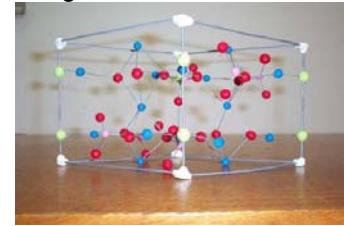


Figura 2: Modelo final

4. Conclusões

A visualização da estrutura da apatita em três dimensões facilita a compreensão da estrutura tridimensional em relação às representações no plano do papel, por permitir a observação dos planos sobrepostos, em escala o que possibilita visualizar e pensar mais concretamente sobre as substituições iônicas e seus efeitos na cela unitária, melhorando a percepção espacial destas questões.

5 . Referências bibliográficas

- [1] BRANDENBURG K. (1999) Diamond Version 2.1c. Crystal Impact. GbR, University of Bonn, Germany (<http://www.crystalimpact.com/diamond/>).
- [2] SUDARSANAN, K.; MACKIE, P.E. & YOUNG, R. A (1972) Comparison of Synthetic Fluorapatite $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{F}$, in Crystallographic detail. *Mater. Res. Bull.* 7, 1331-1338.