

6 Conclusão

Neste trabalho estudamos as substituições de Cd e Sr nos sítios 1 e 2 da hidroxiapatita, utilizando o método Hückel Estendido (eHT) em modelos de aglomerados geometricamente relaxados. Parâmetros empíricos foram escolhidos ou modificados de modo a reproduzir propriedades eletrônicas dos óxidos CaO, CdO e SrO, conhecidas experimentalmente ou calculadas a partir de métodos de primeiros princípios. Foram feitos cálculos de estrutura eletrônica e seus resultados foram comparados a dados experimentais e resultados teóricos conhecidos na literatura. A análise teórica baseou-se principalmente no cálculo da distribuição de carga e ordens de ligação cation-O.

São as seguintes as principais conclusões deste trabalho:

1-As ordens de ligação totais para Cd e Sr são maiores no sítio 2, sugerindo que neste sítio os átomos estão mais covalentes do que no sítio 1. A preferência por sítio 2 fica claramente definida pela comparação entre ordens de ligação nos sítios, $Cd_2/Cd_1 = 2,1$; $Sr_2/Sr_1 = 1,4$. Na HA pura tem-se $Ca_2/Ca_1 = 1,3$, confirmando que em todos os casos há maior covalência no sítio 2. Nota-se a semelhança com resultados encontrados para Sr_2/Sr_1 e Ca_2/Ca_1 , resultado esperado visto que Sr e Ca são elementos muito próximos na tabela periódica.

2- Se compararmos os valores calculados para carga atômica de Ca, Cd e Sr por ordem de ionicidade teremos que o Sr é o mais iônico, em seguida o Ca e por fim o Cd, que é o menos iônico de todos.

3-O método eHT reproduziu corretamente a previsão sobre sítio preferencial de substituição de Sr e Cd, analogamente ao que foi observado para Zn/HA.