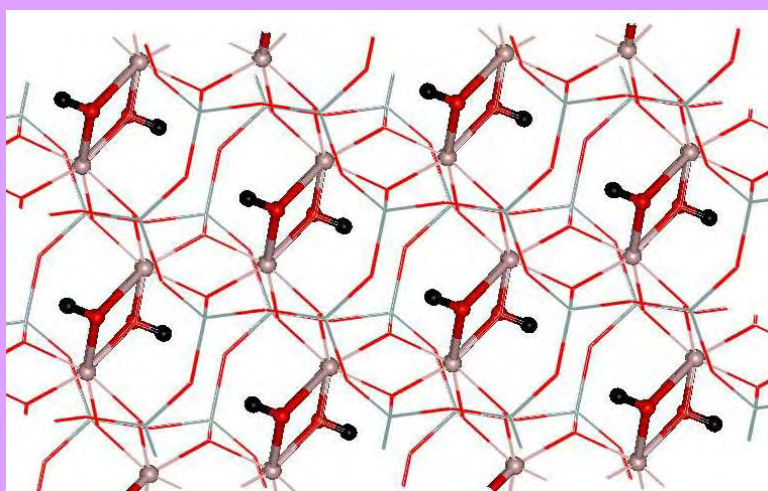
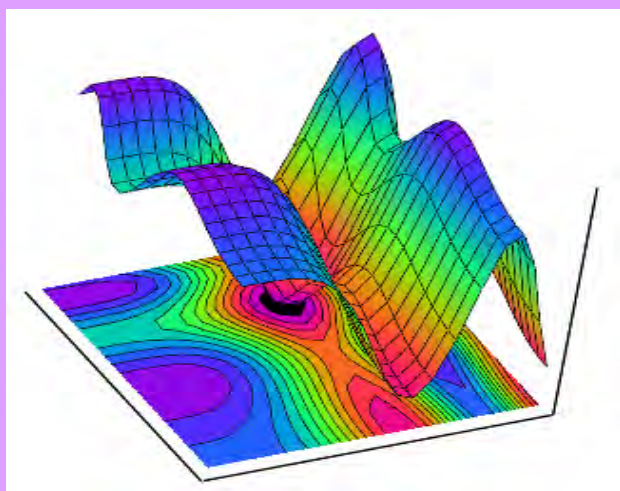


SEMINARIOS DE LA SOCIEDAD ESPAÑOLA DE MINERALOGÍA

VOLUMEN 4

Computer Methods in Mineralogy and Geochemistry

(Ponencias presentadas en el seminario “Métodos computacionales en Mineralogía y Geoquímica”, celebrado en Oviedo, 11 de septiembre de 2006)



Editores:

**Manuel Prieto
Covadonga Brime
Universidad de Oviedo**

**Sociedad
Española
de Mineralogía**



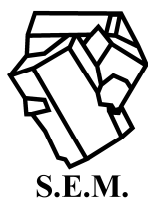
SEMINARIOS DE LA SOCIEDAD ESPAÑOLA DE MINERALOGÍA

VOLUMEN 4

Computer Methods in Mineralogy and Geochemistry

Editores:

Manuel Prieto y Covadonga Brime



© Sociedad Española de Mineralogía

Depósito legal: AS-4850/2008

ISSN: 1698-5478

Impreso en España – Printed in Spain

2008

Impresión: Gráficas Cano - Asturias

Preface

Over the last few decades, computer methods have become an essential tool for improving our understanding of mineral behaviour from the macroscopic to the atomistic scale. *Computer Methods in Mineralogy and Geochemistry*, the fourth volume in the Seminar series of the Spanish Mineralogical Society, explores the latest advances in molecular simulations and macroscopic modelling of low temperature geochemical systems. The volume collects the invited lectures presented at a seminar held in Oviedo on 11 September, 2006. The first chapter is a general introduction to atomistic simulation methods by Martin Dove (University of Cambridge), which includes lattice energy relaxation, lattice dynamics, molecular dynamics and Monte Carlo methods, the use of empirical interatomic potentials and ab-initio quantum mechanical methods. In the second chapter, Ignacio Sainz (CSIC-Granada) illustrates the application of these methods to solve problems related to the structure and behaviour of a variety of phyllosilicates. Also at the atomistic scale, Nora de Leeuw (University College London) describes two approaches to modelling surface and interface processes in oxide minerals, using both classical atomistic simulations and electronic structure calculations.

At the macroscopic scale, the contributions focus on the environmental applications of geochemical modelling. Lara Duro (Amphos²¹ Environmental Consulting) introduces the topic and presents some examples of modelling the sorption of radionuclides on the surface of kaolinite and other minerals. Finally, Carlos Ayora (CSIC-Barcelona) describes the parameters involved in modelling the reactive transport of solutes through porous media. The scope of this volume is introductory and the topics are obviously not treated in depth, but a basic overview is provided and the readers will find the key references to more detailed studies in this field.

Prefacio

En las últimas décadas, los métodos computacionales se han convertido en una herramienta esencial para la comprensión del comportamiento mineral, desde la escala atómica a la escala macroscópica. *Computer Methods in Mineralogy and Geochemistry*, el cuarto volumen de la serie de Seminarios de la Sociedad Española de Mineralogía, explora los últimos avances en simulaciones moleculares y en modelización macroscópica de sistemas geoquímicos de baja temperatura. El volumen recoge las ponencias invitadas al seminario que sobre esta materia se celebró en Oviedo el 11 de septiembre de 2006. El primer capítulo es una introducción a los métodos de simulación

atomísticos por Martin Dove (University of Cambridge), lo que incluye los métodos de relajación reticular, dinámica reticular, dinámica molecular y métodos de Monte Carlo, el uso de potenciales interatómicos empíricos y métodos mecánico-cuánticos ab-initio. En el segundo capítulo, Ignacio Sainz (CSIC-Granada) ilustra la aplicación de estos métodos a la resolución de problemas relacionados con la estructura y comportamiento de diversos filosilicatos. También en la escala atómica, Nora de Leeuw (University College London) describe dos aproximaciones a la modelización de procesos superficiales e interfaciales en óxidos, basadas en simulaciones atomísticas clásicas y cálculos de estructura electrónica.

En la escala macroscópica, las contribuciones se centran en las aplicaciones ambientales de la modelización geoquímica. Lara Duro (Amphos²¹ Environmental Consulting) introduce el tema y presenta algunos ejemplos de modelización de la sorción de radionucleidos sobre la superficie de caolinita y de otros minerales. Finalmente, Carlos Ayora (CSIC-Barcelona) describe los parámetros implicados en la modelización del transporte reactivo de solutos a través de medios porosos. El alcance del volumen es introductorio y por ello los temas no se tratan en profundidad, pero los lectores podrán obtener una visión general y encontrar las referencias clave para profundizar en este campo.

*Manuel Prieto
Covadonga Brime
Universidad de Oviedo*

ÍNDICE

An introduction to atomistic simulation methods7

Martin T. Dove

Aplicaciones de la mineralogía computacional
al estudio de los filosilicatos39

C. Ignacio Sainz Díaz

Computer simulations of surfaces and interfaces: a case of
study of the hydration and dissolution of α -quartz SiO_2 ... 66

Nora H. de Leeuw

Aplicaciones medioambientales de la modelización
geoquímica104

Lara Duro

Transporte reactivo en la zona no saturada 118

Carlos Ayora