

Experimentos em Química Computacional na Educação em Química.

Livia Streit¹(PG), Thiago C. F. Gomes¹(PG)*, Pedro A. M. Vazquez¹(PQ).

¹Depto. de Físico-Química, Instituto de Química, UNICAMP, 13083-970, Campinas – SP, Brasil.

*tgomes@iqm.unicamp.br

Palavras Chave: Química Computacional, momento de dipolo, polarizabilidades, ensino-aprendizagem, educação.

Introdução

Um dos objetivos dos cursos de Bacharelado em Química é formar futuros pesquisadores. Para tanto, é importante esclarecer ao aluno quais são as diversas áreas às quais poderá dedicar-se. Uma das áreas que, em geral, não é apresentada de maneira tão extensa é a Química Teórica e Computacional, de forma que os egressos raramente decidem pela área como campo de especialização. Isso talvez por não serem expostos a atividades inerentes à rotina dos pesquisadores desta área, ou pelo menos, não na mesma proporção a que são expostos a atividades no laboratório. Pesquisadores em Química Teórica eventualmente desenvolvem novos modelos e teorias mas, essencialmente, realizam “experimentos em computadores”, ou seja, testam modelos e hipóteses utilizando computadores como ferramenta de cálculo. Entretanto, o aluno em geral desconhece a vasta gama de informação sobre sistemas químicos que pode ser extraída destes cálculos. Este trabalho propõe um experimento simples e atrativo de determinação de momentos dipolares e polarizabilidades elétricas a partir das derivadas numéricas da energia eletrônica total em relação às componentes Cartesianas do campo elétrico aplicado.¹ Esse exercício pode ser ministrado em cursos de graduação com o intuito de familiarizar o aluno com métodos empregados na Química Teórica e Computacional.

O cálculo mais básico que é feito para um sistema químico é a determinação de sua energia eletrônica total. Realizando vários desses cálculos para um mesmo sistema químico, na presença de campos elétricos aplicados nos dois sentidos das três direções Cartesianas, é possível computar numericamente as derivadas da energia em relação às componentes Cartesianas do campo elétrico. Com estas derivadas determina-se o momento dipolar elétrico permanente (primeira derivada) e as componentes do tensor de polarizabilidade (segundas derivadas) do sistema estudado. Assim, os objetivos do experimento são: 1) Otimização de geometria, 2) Cálculo da energia eletrônica com o sistema sujeito ao campo elétrico e, com estes dados, computar as derivadas da energia em relação ao campo elétrico, obtendo então momento dipolar e polarizabilidades.

Resultados e Discussão

Os cálculos foram realizados para os sistemas CH₄, NH₃, H₂O e HF, utilizando o pacote GAUSSIAN 03

(D.02) no nível de teoria Hatree-Fock/cc-pVQZ. As moléculas foram orientadas com seus eixos principais de polarizabilidade coincidindo com os eixos Catesianos, de maneira que os tensores de polarizabilidade possam ser representados por matrizes diagonais. As moléculas polares têm seus momentos de dipolo orientados no sentido positivo da direção z. Os campos elétricos têm intensidades de -0,002; -0,001; 0,001 e 0,002 u.a. quando aplicados nas direções x, y, z e intensidades de -0,001; 0,001 u.a. quando aplicado simultaneamente em duas direções. Os dados foram tratados utilizando uma planilha eletrônica (OpenOffice).

Os resultados obtidos numericamente mostram uma excelente concordância com os resultados analíticos. Por exemplo, para HF (ácido fluorídrico), o momento dipolar elétrico calculado numericamente é de 1,89 Debye, igual ao resultado calculado analiticamente no mesmo nível de teoria. O resultado experimental² é 1,82 Debye (erro relativo de 3,8%). As polarizabilidades esféricas obtidas numericamente concordam muito bem com as analíticas, mas não com as experimentais (erros relativos médios de 0,2% e 18,9% respectivamente).

Conclusões

O experimento proposto é indicado para colocar o aluno em contato com os procedimentos mais comuns em Química Quântica, como o cálculo de energia eletrônica e a otimização da geometria molecular. Também explora o cálculo de outras propriedades moleculares como o momento dipolar e as polarizabilidades elétricas, via diferentes procedimentos. Os resultados são didáticos pois, se repetir o experimento utilizando um nível de teoria mais elevado o aluno pode verificar que os resultados serão mais próximos aos experimentais. As atividades propostas servem como iniciação ao uso de pacotes de estrutura eletrônica, através dos quais o aluno é capaz de calcular e investigar uma grande diversidade de propriedades moleculares.

Agradecimentos

CNPq e Capes.

¹ Sauer, S. P. A. “The Ab Initio Calculation of Molecular Properties: Lectures Notes for the 3rd Mercosur School on Molecular Physics”, versão 3, 2001.

² NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database, “NIST Standard Reference Database Number 101”, Release 14, 2006. <http://srdata.nist.gov/cccbdb>