

Revisitando a Teoria Química com os Cálculos Computacionais

Régis Casimiro Leal¹(IC), José Machado Moita Neto¹(PQ). e-mail: regis@ufpi.edu.br

¹ Universidade Federal do Piauí, Centro de Ciências da Natureza, Departamento de Química, 64049-550, Teresina-PI
Palavras Chave: Ensino de Química, Química Computacional, Química Quântica.

Introdução

Na última década, a química computacional vem conquistando definitivamente seu espaço entre as metodologias que investigam os fenômenos químicos. Essa conquista deve-se ao grande avanço das metodologias teóricas, assim como aos avanços tecnológicos na área de informática¹. Assim, esses desenvolvimentos modificam a rotina do ensino de química: atualmente, os cálculos de química são essenciais em qualquer laboratório acadêmico. Portanto, a química computacional torna-se capaz de fornecer resultados confiáveis sobre geometria molecular e outras propriedades, que são provenientes de experimentações químicas ou derivados de abordagens puramente teóricas, podendo ser obtidas através de métodos de mecânica molecular, mecânico-quântico e pela metodologia do funcional de densidade.

Resultados e Discussão

A Química Quântica pode colaborar no entendimento de vários conceitos químicos, como energias dos orbitais de fronteira, o momento dipolar da molécula, as cargas eletrônicas sobre os átomos, estimar frequências vibracionais, etc. Métodos semi-empíricos, ab initio e funcional densidade foram utilizados para mostrar aspectos importantes da teoria química. A seguir serão discutidos alguns dos resultados obtidos.

A Tabela 1 mostra a diferença do comprimento das ligações para os grupos funcionais de hidrocarbonetos (alcano, alceno e alcino). Observa-se que independente do método de cálculo utilizado, o resultado relacionado ao comprimento da ligação é sempre o mesmo: etano > etileno > acetileno.

Tabela 1. Comprimento da ligação entre os carbonos das moléculas de etano, etileno e acetileno em Angstrom.

Métodos de Cálculo	Etano	Etileno	Acetileno
AM1	1,500	1,326	1,195
PM3	1,504	1,322	1,190
H-F 3-21G	1,543	1,315	1,188
H-F 6-31G(D)	1,527	1,317	1,186
B3LYP 3-21G	1,544	1,329	1,204
B3LYP 6-31G(D)	1,530	1,331	1,205
PBE1PBE 3-21G	1,537	1,328	1,204
PBE1PBE 6-31G(D)	1,523	1,328	1,204

* H-F, corresponde ao método ab initio Hartree-Fock.

Os grupos substituintes no anel aromático são classificados e ordenados de acordo com a possibilidade de ativarem ou desativarem o anel em

uma reação química. O cálculo de três destes anéis exemplifica a vantagem de uso da química quântica. A molécula de fenol possui um grupo ativante (OH), que influencia um possível ataque eletrofílico em posições orto, para. Já a molécula de ácido benzóico (COOH), possui um grupo desativante orientando os substituintes em posições meta. As cargas atômicas mais negativas sobre os átomos de carbono no anel confirmam a orientação dos substituintes (Tabela 2).

O ensino de Química Orgânica não é claro, quando se têm mais de um grupo ligado diretamente ao anel, por exemplo, a molécula de ácido salicílico. Neste caso conforme a Tabela 2, o ataque eletrofílico mais provável ocorre no C₂ (Figura 1).

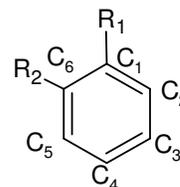


Figura 1. Esquema representativo para ácido salicílico, fenol e ácido benzóico.

Tabela 2. Cargas atômicas de Mulliken calculadas através do método semi-empírico AM1.

Átomos	R ₁ = OH R ₂ = COOH	R ₁ = H R ₂ = OH	R ₁ = H R ₂ = COOH
C1	0,143	-0,147	-0,070
C2	-0,237	-0,118	-0,147
C3	-0,054	-0,138	-0,094
C4	-0,184	-0,118	-0,149
C5	-0,037	-0,147	-0,068
C6	-0,151	0,041	-0,117

Conclusões

É possível mostrar alternativamente diversos conceitos de outras áreas da Química, através da química quântica computacional. Em algumas situações torna-se imprescindível o uso dessa ferramenta.

Agradecimentos

Agradeço ao PIBIC/CNPq, pela bolsa de pesquisa (RCL).

¹Ribeiro, A. A.; Greca, I. M. *Simulações computacionais e ferramentas de modelização em educação química: uma revisão de literatura publicada*. Quím. Nova, v. 26, n. 4, 2003, 542-549.