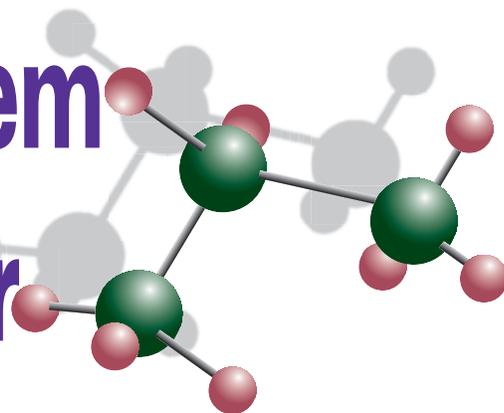


O Conceito da Modelagem Molecular



Hélio F. dos Santos

A necessidade de representar a estrutura da matéria no nível molecular levou ao desenvolvimento de uma nova área de pesquisa dentro da física e da química, conhecida como modelagem molecular. Neste artigo fazemos uma introdução aos conceitos fundamentais da modelagem molecular

► modelagem molecular, química computacional, modelos teóricos, estrutura da matéria ◀

4

A existência de propriedades físico-químicas bem definidas da matéria e suas previsões através das leis da física conferem à química um amplo caráter científico. Este fato permite aos químicos criar modelos capazes, em uma certa extensão, de agrupar, prever e desenvolver novos materiais. Entretanto, devido à complexidade dos sistemas e processos de interesse em química, em muitas situações as contradições se sobrepõem às correlações.

A utilização de modelos para a descrição de propriedades da matéria leva a possibilidade de cometer-se erros devido às aproximações impostas para simplificar o mundo real. Dentro deste contexto, é importante frisar a diferença entre 'teoria' e 'modelo'. Por teoria entende-se um conjunto de leis capazes de fornecer resultados e conclusões a partir de um número de variáveis conhecidas. Normalmente, espera-se que as teorias se apliquem com a precisão definida pelos próprios limites da natureza. Por outro lado, os modelos têm por objetivo descrever aspectos específicos de certas propriedades do sistema.

A aplicação de modelos teóricos para representar e manipular a estrutura

de moléculas, estudar reações químicas e estabelecer relações entre a estrutura e propriedades da matéria constituem o domínio de atuação da modelagem molecular. A química teórica vai além deste limite, tendo também como função o desenvolvimento de novos modelos. As ramificações dentro desta ampla área de atuação se dão em função da natureza física do modelo utilizado e, evidentemente, do problema em questão. Estes dois aspectos, 'modelo' e 'sistema', definem a profundidade necessária de conhecimento da estrutura da matéria.

Atualmente, é bem estabelecido que o mundo material é constituído de moléculas, cuja definição se baseia no conceito de átomo. Por sua vez, átomos são entidades cujas propriedades dependem do arranjo e de forças envolvidas entre partículas subatômicas como elétrons, prótons e nêutrons. Portanto, as diferentes formas de manifestação da matéria podem ser interpretadas como consequência do comportamento das

partículas microscópicas que a constituem.

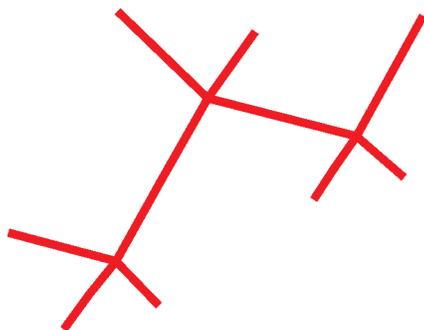
Uma definição simples de modelagem molecular foi apresentada anteriormente. De uma forma geral, todo tipo de estudo que envolve a aplicação de modelos teóricos utilizando os conceitos de átomo e molécula na descrição de estrutura e propriedades de interesse em química pode ser classificado como modelagem molecular. Uma abordagem histórica sobre este tópico tem como princípio a representação de moléculas através de fórmulas estruturais, estabelecida pela primeira vez em 1874 com a descoberta do arranjo tetraédrico dos átomos de carbono em compostos orgânicos por van't Hoff e Le Bel. Quase um século depois, em 1953, Barton introduziu o conceito de análise conformacional, estabelecendo, de forma definitiva,

que moléculas podem ser representadas por diferentes arranjos atômicos espaciais, possuindo energias características. A segunda metade da década de 50 foi marcada pelo

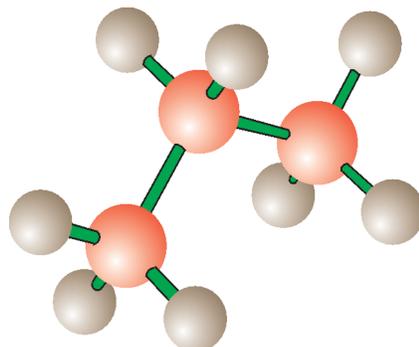
A aplicação de modelos teóricos para representar e manipular a estrutura de moléculas, estudar reações químicas e estabelecer relações entre a estrutura e propriedades da matéria constituem o domínio de atuação da modelagem molecular

Tabela 1: Três diferentes modelos de representação da estrutura do propano. Estas formas de representação de moléculas foram desenvolvidas entre 1959-1965.

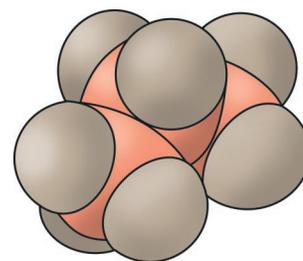
Modelo de varetas



Modelo de pau e bola



Modelo de espaço preenchido



desenvolvimento da cristalografia de raios X. A elucidação de estruturas tridimensionais através de técnicas experimentais possibilitou a obtenção de parâmetros estruturais, como comprimentos e ângulos de ligação, e também a definição de propriedades atômicas como o raio de van der Waals. Com isso foi possível construir modelos simples para representar a estrutura tridimensional de moléculas em escalas relativas reais. Alguns exemplos são apresentados na Tabela 1.

A representação de estruturas como apresentado na Tabela 1 fornecia uma descrição qualitativa e, em algumas situações, semiquantitativa das propriedades da matéria. Por exemplo, a análise da estabilidade relativa entre diferentes conformações da molécula não poderia ser feita de forma quantitativa utilizando apenas fórmulas estruturais. Uma outra limitação destes modelos é com relação à determinação de propriedades eletrônicas como potencial eletrostático, momento de dipolo elétrico, cargas formais e propriedades espectroscópicas. Neste

sentido, visando representar a matéria de maneira completa e quantitativa, os fundamentos da física clássica e quântica começaram a ser implementados com o objetivo de descrever sistemas e processos de interesse para a química. Esta parte da história, que começa no final da década de 60, teve um desenvolvimento relativamente rápido em função do aprimoramento tecnológico dos computadores. Pesquisadores como Allinger, Dewar, Kohn, Pople, Stewart e Zerner, entre outros, empenharam-se no desenvolvimento e implementação de teorias em programas de computador, tornando-as acessíveis à comunidade química de uma forma geral. Com isso, surgiu um novo campo de atuação dos químicos, caracterizado como química computacional e modelagem molecular. O reconhecimento desta nova área de pesquisa pelo mundo científico veio com o prêmio Nobel em Química de

1998 concedido a John Pople e Walter Kohn, pelas contribuições no desenvolvimento da química computacional e modelagem molecular (Freitas, 1998).

Nos próximos capítulos serão introduzidos os formalismos teóricos relacionados aos principais modelos de representação da matéria. O objetivo é fornecer ao leitor uma visão geral e inicial dos principais aspectos que constituem os mo-

delos baseados na mecânica quântica. Ligações químicas, espectroscopia e interações intermoleculares serão também considerados dentro do contexto da teoria quântica e da mecânica clássica.

Hélio F. dos Santos (helius@quimica.ufjf.br), doutor em química, é professor do Departamento de Química da Universidade Federal de Juiz de Fora.

Referência bibliográfica

FREITAS, L.C.G. Prêmio Nobel de química 1999, *Química Nova na Escola*, n. 8, p. 3-6, 1998.

A elucidação de estruturas tridimensionais através de técnicas experimentais possibilitou a obtenção de parâmetros estruturais com os quais foi possível construir modelos simples para representar a estrutura tridimensional de moléculas em escalas relativas reais