

A APRENDIZAGEM DE ENERGIA DE IONIZAÇÃO E DA DISSOCIAÇÃO: ABORDAGEM DE QUÍMICA COMPUTACIONAL NO ENSINO DE FÍSICO-QUÍMICA

José de B. M. Neto¹; Rafaela G. Faustino²; Luana V. A. dos Santos³; Anna B. V. Pavão⁴; Raquel M. T. Fernandes⁵; Alamgir Khan⁶.

britomonteiro712@gmail.com¹; rafaela.faustino27@gmail.com²; luana.v.santos02@gmail.com³; bia.pavao133@gmail.com⁴; raquelfernandes@professor.uema.br⁵; alamgir@cecen.uema.br⁶.

Palavras-Chave: DFT; Química Computacional; Modelagem Molecular.

Introdução

Antes da década de 1950 e início dos anos 1960, químicos teóricos apenas tinham a disposição simples modelos analíticos, os quais eram muitas vezes incompletos e resultavam, na melhor das hipóteses, em representações qualitativas de moléculas e aglomerado de moléculas. Porém, com o acesso aos computadores, os químicos puderam rapidamente investigar as propriedades de modelos teóricos mais completos, realizando cálculos mais exatos para modelos aceitos e induzindo o uso de computadores para o tratamento de sistemas moleculares complexos (HASE, 2003).

Para que seja possível simular o comportamento da matéria em escala atômica e molecular, a ciência se apropria dos conhecimentos da química computacional, fundamentando-se na mecânica quântica, para obter informações quanto às propriedades químicas e físicas de átomos e moléculas, dentre elas, valores de energia, estrutura e reatividade. Dessa forma, a química computacional pode ser entendida como uma área interdisciplinar, podendo ser aplicada em várias áreas do saber como, por exemplo, para o estudo da química atmosférica e do meio ambiente, para o desenvolvimento de fórmulas e medicamentos, entre outras. O avanço dessa área é condicionado ao desenvolvimento de hardwares e softwares sofisticados, pacotes computacionais mais abrangentes, e ainda ao desenvolvimento de teorias, metodologias e técnicas computacionais (COUTINHO, MORGON, 2007).

Este estudo tem como finalidade ilustrar práticas que podem ser implantadas por estudantes e professores, tais como curva de energia potencial, otimização de geometria, potencial de ionização e energia de interação, com a utilização dos softwares Gaussian 09W e GaussView 6.0. Logo, as tarefas realizadas ajudam o estudante a entender os processos de um cálculo computacional; antecipar as características moleculares de compostos e comparar o impacto de diversas funções de base nos cálculos.

A utilização de softwares químicos transfere para os computadores a difícil tarefa de realizar os cálculos, que seriam impossíveis de realizar manualmente, fazendo com que o estudante deva apenas pensar nas hipóteses assumidas, na interpretação das soluções, no contexto de validade dos modelos e nas possíveis generalizações/expansões do modelo que possam ser realizadas (ARAUJO, 2005). Utilizando práticas computacionais de química, aluno poderá observar e interagir estas situações difíceis ou até mesmo impossíveis de serem simuladas em laboratório, as quais eram muitas vezes apenas abordadas pelo professor no processo de ensino tradicional.

Em um sistema real, cada elétron contribui com um potencial que dá origem a energia cinética dos outros elétrons. Porém no caso de Hartree-Fock, pelas partículas serem independentes, a princípio, é como se cada partícula estivesse em um campo médio e não possui a contribuição de como a interação entre os elétrons altera a sua energia cinética. É comum a utilização do método de Hartree-Fock para estimar a energia de correlação quando se conhece a energia exata do sistema, através da diferença entre a energia de Hartree-Fock e a energia exata.

O maior impasse com relação a DFT é que funcionais exatos para a troca e correlação não são conhecidos exceto para o gás de elétrons livres. Entretanto, existem aproximações que permitem o cálculo de certas propriedades físicas de forma apurada, cujos resultados possuem o mesmo status de resultado experimental, dada sua confiabilidade.

Material e Métodos

Primeiramente, uma pesquisa bibliográfica foi realizada com o objetivo de levantar informações sobre os métodos empregados nas três práticas de química computacional, uma vez que se trata da área da química quântica, logo utilizou-se um bando de dados experimentais NIST- National Institute of Standards and Technology.

As práticas foram realizadas por alunos da Universidade Estadual do Maranhão na disciplina de Equilíbrio Químico e Cinética Química, pelo qual foi necessário softwares Gaussian 09W e GaussView 06, para modelagem e cálculos de moléculas atribuída aos exercícios.

Contudo a primeira atividade foi gerada uma molécula de hidrogênio no GaussView, ajustando o raio intermolecular para 1 Å. O arquivo foi então exportado para o Gaussian 09W, onde os cálculos de energia foram realizados utilizando o método Hartree-Fock e a função de base STO-3G.

Na prática seguinte foi seguido os mesmos passos com a exceção da molécula analisada, qual foi uma molécula de H₂O, que a princípio, foi colocado a distância de ligação H-O de 0,958 Å e ângulo de ligação H-O-H de 104.477°, depois foram realizados outros testes, e gerados molécula de água com carga positiva, e um dímero de água com coordenadas experimentais, e assim repetido cálculo de energia com bases diferentes, sendo testadas as bases HF; DFT- B3LYP; DFT- PBE/PBE.

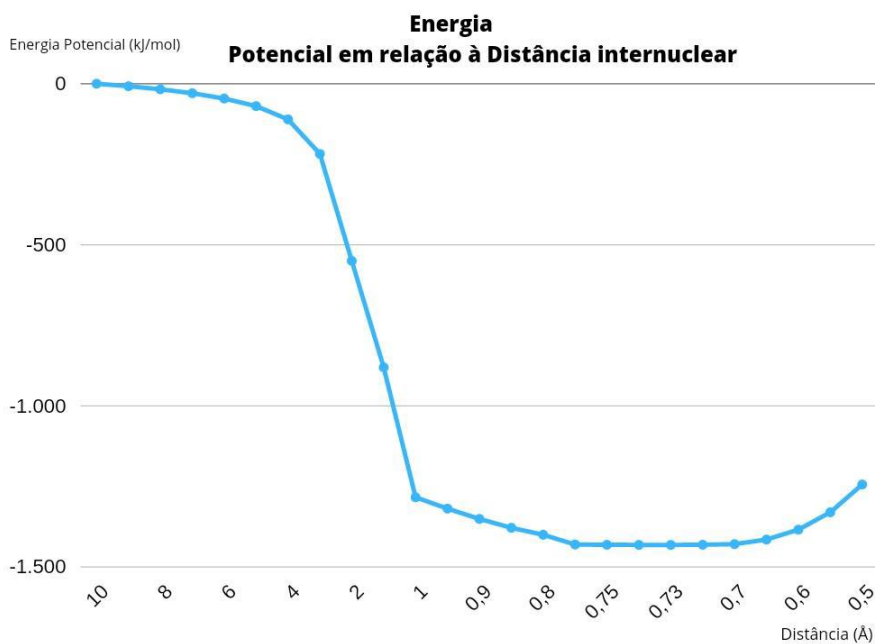
Para finalizar as práticas, utilizou o arquivo com a molécula de água da prática anterior, com a finalidade do cálculo de otimização com os métodos Hartree Fock (HF) e DFT (B3LYP) e alternância função de base: STO3G; cc-pVDZ; 6-31G(d, p); cc-pVTZ.

Enfim foram realizadas as três atividades solicitadas, com realização de relatórios por parte dos estudantes, com auxílio do software Excel para geração de gráficos e tabelas, pelo qual foi feita uma análise detalhada de cada exercícios.

Resultados e Discussão

Curva de energia potencial que a energia da molécula de água tende diminuir à medida que aumentamos a distância entre os átomos. Além disso, como demonstrado no gráfico 1 abaixo, nota-se que quando a molécula assume distâncias nos valores de 0,74 e 0,73, respectivamente, a diferença de energia foi praticamente zero, pois quase não houve variação, pois quando chega no ápice dessa energia, atinge-se o máximo de estabilidade para a molécula, que corresponde a um mínimo de energia potencial interna, na qual é normalmente a situação que as moléculas se encontram.

Gráfico 1: Curva da energia potencial em kJ/ mol



Fonte: autor 2024

Com os resultados da prática do potencial de ionização e energia de interação foi gerada a tabela 1, mostrada logo abaixo, os valores de energia para a molécula de água e a molécula de água carregada positivamente, sendo calculadas através dos métodos de HF, DFT-B3LYP e DFT- PBEPBE.

Tabela 1: Resultados da prática do potencial de ionização.

Método	Energia (H ₂ O)	Energia (ion)	Diferença	Energia (Kcal/mol)	Energia (Kj/mol)
HF	-75,99124	-75,58113	0,41011	258,3693	1081,02
B3LYP	-76,399548	-75,928235	0,47131	296,9253	1242,34
PBEPBE	-76,313894	-75,843561	0,47033	296,3079	1239,75
Experimental	-75,99125	-75,58115	0,47032	291,0157	1217,61

Fonte: autor 2024

Ao subtrair a energia total do dímero da soma das energias das moléculas individuais, obteve-se a tabela 2.

Tabela 2: Resultados da energia de interação por método.

Método de cálculo	Energia de interação
HF	- 0,01199231
B3LYP	- 0,0131456
PBEPBE	- 0,013965083

Fonte: autor 2024

Nota-se que em todos os métodos foi analisada que a molécula de água carregada positivamente possui uma energia total menor que a molécula de água neutra, isso ocorre porque possuem estruturas menos estáveis, com 1 elétron desemparelhado. Na tabela1 também se encontra o valor da energia de ionização da molécula da água. Os valores estão apresentados em kJ/mol e em kcal/mol.

Logo, comparando os valores teóricos da energia de ionização com os valores calculados, nota-se que os métodos DFT-B3LYP e DFT-PBEPBE mostraram-se mais eficazes, com o DFT-PBEPBE fornecendo o valor mais próximo da referência (~172.414 kJ/mol). A diferença maior observada no método Hartree-Fock sugere que ele não é o mais indicado para esse tipo de cálculo, evidenciando a importância das correlações eletrônicas mais sofisticadas, incluídas no DFT.

Ao finalizar a última etapa de otimização de geometrias, a partir dos resultados obtidos realizando-se os cálculos de energia, distância e ao modificar os ângulos da molécula, pudemos observar que a molécula de água teve sua menor variação de energia quando observamos os métodos (DFT/cc-pVTZ) e DFT/cc-pVTZ e a diferença de energia calculada entre eles. A diferença de energia entre esses dois métodos foi de 0,00002 ou de $2,2 \times 10^{-4}$. Neste sentido, podemos inferir que esses dois métodos foram os mais satisfatórios. Em comparação com a literatura, percebeu-se que os valores de energia não apresentaram muitas alterações, estando em concordância.

Conclusões

A importância dos métodos computacionais para a modelagem molecular tornou-se notória a partir desses experimentos, tendo em vista os resultados da modelagem molecular, com métodos computacionais Hartree-Fock e DFT (B3LYP e PBEPBE), que obteve dados precisos. Sobretudo, o método DFT-PBEPBE de modo geral apresentou ser mais eficaz para cálculos praticado neste estudo, pois forneceu resultados aproximados dos valores experimentais.

Contudo podemos destacar, que as práticas reforçam a metodologia aplicada para compreensão de diversas áreas da química, logo o ensino aprendido é direcionado a aproximação do aluno aquisição do saber científico, ou seja, orienta o aluno o cotidiano da sua futura profissão, pois tendo em vista que as ferramentas computacionais atualmente são cada vez mais adotada por pesquisadores, uma vez que os softwares usados nessas práticas são de cunho profissional.



Agradecimentos

Gostaria de expressar minha gratidão a programa de PIBIC da UEMA pela concessão de bolsa, laboratório de Físico-química (LFQ) do curso de Química e ao Núcleo de Ensino de Química Teórica e Aplicada (NEQTA), meu muito obrigado por todo o suporte. Agradeço à minha família e a Deus por tudo

Referências

ARAÚJO, E. A. V. E I. S. **Modelagem computacional no ensino de física**. Xxiii encontro de físicos do norte e nordeste –, 2005.

ATKINS, P. W.; JONES, L. **Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente**. 5. ed. Porto Alegre: Bookman, 2012.

BASE DE DADOS EXPERIMENTAIS. Disponível em <<http://webbook.nist.gov/chemistry/>> Acesso em: 28/10/2020.

COUTINHO, K; MORGON, N, M. **Métodos de química teórica e modelagem molecular**. São Paulo: Editora Livraria Física, 2007.

HASE, W.L. **Computational chemistry computing in science e engineering**.p.12-13,2003.

ORTOLAN, O, A. **Apostila de práticas de química computacional**. Paraná: Coordenação de química – UTFP, 2014.