



# QUÍMICA COMPUTACIONAL: UMA FERRAMENTA AUXILIADORA NO ESTUDO DA QUÍMICA.

Janês Inês de Brito  
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí – inescandidabrito@outlook.com.  
Adrielle de Oliveira Davi  
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí – adrielleoliveira95@outlook.com.  
Francisco de Assis Araújo Barros  
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí – fbarros@ifpi.edu.br.

**Resumo:** O presente trabalho caracteriza-se como uma pesquisa bibliográfica, com caráter qualitativo, realizada como atividade complementar do Programa Institucional de Bolsa e Iniciação a Docência (PIBID), com apoio do Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia do Piauí (IFPI) Campus-Picos, tendo como objetivo realizar um estudo sobre a Química Computacional e mostrar sua relevância como recurso auxiliar à pesquisa de discentes em Licenciatura em Química. Assim, a Química Computacional como uma área nova de pesquisa deve ser inserida no convívio dos alunos a fim de proporcionar melhor compreensão de estudos com cálculos e modelagens computacionais.

**Palavras chave:** Química Computacional, Incentivo à pesquisa e PIBID Campus-Picos.

## 1. Introdução

Segundo Fernandes (2011), a Química Computacional contribui principalmente no desenvolvimento e utilização de softwares dedicados à resolução de problemas químicos, bioquímicos, tecnológicos e industriais. Com o passar dos anos, a área da computação avançou de maneira impressionante e esse avanço traz consigo uma gama de benefícios em todas as áreas do conhecimento, nela não poderia ser diferente.

Essa área de estudo relativamente “nova” conseguiu reconhecimento e maturidade em 1998 com a conquista do prêmio Nobel de Química para J.A. Pople e W. Kohn com as contribuições para a elucidação de estruturas moleculares e de reatividade. E em 2013, Martin Karplus, Michael Levitt e Arieh Warshel ganharam o Nobel de Química pelo desenvolvimento de um conjunto de métodos e programas computacionais que permite o estudo detalhado de reações químicas em sistemas macromoleculares, como por exemplo, os movimentos individuais dos átomos e moléculas em um sistema contendo milhares e até milhões das partículas, bem como cada uma das etapas de uma reação química. Esse método consistiu em olhar para uma proteína e ver como, exatamente, ela faz o que faz (SKAF, 2013).

Hoje em dia a Química Computacional se mostra de grande relevância nos grandes centros de pesquisa. Uma das áreas frequentemente abordadas é a modelagem molecular que tem um papel importante na determinação de propriedades, pois possibilita observações que seriam inacessíveis aos laboratórios convencionais. Para Skaf M. S. (2013) os químicos modernos de hoje se valem dos cálculos e das previsões teóricas obtidas por meio dos métodos de modelagem molecular para interpretar seus resultados experimentais de uma forma nunca antes



testemunhada na ciência. Criou-se, assim, um elo indissociável entre a química tradicional realizada nas bancadas do laboratório e a química computacional.

Com o crescimento acelerado do mundo tecnológico, faz-se necessário a modernização das pesquisas realizadas, com isso a química computacional vem a enriquecer e complementar o trabalho minucioso e muitas vezes demorado dos laboratórios convencionais, fazendo com que os softwares de cálculos químicos fossem aplicados a outros campos da ciência, como no planejamento e síntese de fármacos, na química ambiental, nanotecnologia e ciência dos materiais, como um item complementar aos estudos realizados (ALLOUCHE, 2011). Todavia, nota-se que a mesma abrange uma variedade de pesquisas, tendo como objetivo mostrar aos discentes de graduação em química a realização de pesquisas teórica a partir da química computacional.

## 2. Procedimentos Metodológicos

O presente trabalho tem cunho qualitativo, onde se realizou uma revisão bibliográfica, como atividade complementar de pesquisa no Programa Institucional de Bolsa e Iniciação a Docência (PIBID), realizada na cidade de Picos-PI. A pesquisa abordou a Química computacional, como uma área relativamente nova.

O trabalho desenvolveu-se a partir da leitura de artigos relacionados à área dos seguintes autores, Allouche A. (2011), Fernandes F. M. S. S (2011), Skaf M. S. (2013), Carvalho I. et al. (2003), Santos H. F (2001), Santos G.A. A (2011). Em seguida, realizou-se uma análise dos trabalhos mencionados e da sua influência em pesquisas relacionadas à Química.

## 3. Resultados e discussões

A partir da análise dos trabalhos percebe-se que a Química computacional possui embasamento meramente teórico, mas que os resultados obtidos com a mesma quando comparados à literatura possibilitam resultados satisfatórios, onde discentes podem realizar cálculos complexos com o auxílio de computadores pessoais.

Segundo Santos (2001) a aplicação de modelos teóricos facilita a representação e manipulação de estruturas e 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, trazendo também como função o desenvolvimento de novos modelos e novos estudos.

A utilização da Química Computacional em modelagem molecular pode e deve ser utilizada como incentivo a pesquisa, possibilitando os discentes a realizar trabalhos que anteriormente so seriam possíveis através de laboratórios equipados tanto na química em geral como em áreas afim.

## 5. Considerações finais



Com o estudo realizado nota-se que a química computacional se faz de grande importância nas pesquisas em geral, como também pode ser trabalhada com técnicas auxiliaadoras no ensino, como fonte de aprendizagem e varias outras formas de estudo e pesquisa. Contudo, é caracterizada como uma área nova de pesquisa, mas que deveria ser inserida no convívio de discentes de licenciatura em química com o intuito de proporcionar melhor compreensão de pesquisa em cálculos e modelagem computacionais.

## Referências

FERNANDES F. M. S. S. Atualidades científicas: **Perspectivas da Química computacional**. Centro de Ciências Moleculares e Materiais, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, 2011.

SKAF M. S.: **O prêmio Nobel de Química 2013**. Quím. nova esc. Vol. 35, N° 4, p. 243-246, São Paulo-SP, BR. NOVEMBRO 2013.

ALLOUCHE, A. Gabedit—a graphical user interface for computational chemistry softwares. **Journal of computational chemistry**, 2011. Disponível em: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jcc.21600/full>>. Acesso em: 4/9/2013.

CARVALHO, Ivone et al. **Introdução a modelagem molecular e fármacos no curso experimental de química farmacêutica**. Química Nova, n° 3, V-26, p.428-438, 2003.

SANTOS, H. F. : **O conceito da modelagem molecular**. Química Nova na Escola. São Paulo-SP ,N° 4 – Maio 2001.