

Uso de programas computacionais na aprendizagem de química: importância das propriedades eletrônicas e a geometria das moléculas de hidretos do grupo 16 e propriedades gerais dessas substâncias.

Gustavo Rossoni Ruy¹(IC), Samuel Onofre Nicole¹(IC), Hércules da Silva Miglio¹(PQ)*.

1- Universidade Federal do Espírito Santos. herculesmiglio@hotmail.com.

Palavras-Chave: ensino - aprendizagem, cálculos computacionais, propriedades eletrônicas.

Introdução

O grupo 16 comporta os elementos oxigênio (O), enxofre (S), selênio (Se), telúrio (Te) e polônio (Po). Estes elementos apresentam características que os torna bem distintos, podendo ser de fundamental importância para a vida, como o oxigênio, ou formar compostos altamente tóxicos. Os hidretos desses elementos apresentam um caráter marcante; em destaque para as ligações de hidrogênio presentes nas moléculas de água, responsável por produzir um comportamento bem particular deste composto se comparado aos outros¹.

Tendo em vista tais aspectos este trabalho visa propor o emprego de softwares voltados para a área de química e como estes podem auxiliar, estudantes e pesquisadores, a prever as propriedades e estruturas de diversos compostos, no caso deste trabalho em especial, os hidretos do grupo 16. Utilizando os modelos computacionais presentes no pacote Gaussian 03, com o objetivo de entender e justificar como tais hidretos se comportam de forma tão diferenciadas, visa também estabelecer relações destes com algumas propriedades eletrônicas, analisando a geometria molecular (comprimento e ângulo de ligação) momento dipolo e outras.

Resultados e Discussão

O software Gaussian 03W e o Gaussview 3.0 mostraram resultados satisfatórios quanto a previsão de propriedades e construção do modelo 3D das moléculas estudadas. Com relação à interface de construção do modelo tridimensional (3D) da molécula o software Gaussview 3.0 possui navegação bem simples e de fácil compreensão. A construção de um modelo tridimensional das moléculas estudadas permitiu que fossem observados comportamentos importantes quanto ao ângulo de ligação, comprimento de ligação e outras propriedades decorrentes da geometria molecular destes hidretos.

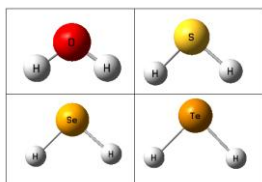


Figura 1. Moléculas dos hidretos dos elementos dos grupo VI A* (H₂O, H₂S, H₂Se e H₂Te)

Os dados obtidos permitem que sejam realizadas diversas discussões a cerca das propriedades eletrônicas destes hidretos e sua relação com as propriedades físico-químicas apresentadas por estes compostos.

Tabela 1 – Dados moleculares obtidos

Hidreto	Comp. da Ligação (nm)	Âng. de Ligação (Å)	Energia (a.u)	Momento Dipolo (Debyes)
H ₂ O	0,951	107,65	-0,0851	1,73
H ₂ S	1,29	93,52	-0,00146	1,77
H ₂ Se	1,46	93,56	0,0362	1,34
H ₂ Te	1,67	88,30	0,0378	0,32

Os dados apresentados na tabela 1 são os dados filtrados do arquivo de saída do programa e foram relacionados com os dados da bibliografia pesquisada, esta relação foi tomada como ponto de partida para as discussões a cerca das propriedades dos hidretos estudados. É possível, por exemplo, explicar o comportamento anômalo do ponto de ebulição da molécula de água (H₂O) quando comparado com os outros hidretos da mesma família. A tabela 1 fornece dados energéticos que nos permite prever esse comportamento e com base nos estudos teóricos explicar tal processo.

Conclusões

O pacote Gaussian é uma ferramenta de grande potencial para estudos realizados em muitas áreas da Química e pode ser descrito como um componente auxiliar na prática do Ensino de Química. A construção do modelo tridimensional das moléculas permitiu que pudessem ser compreendidas as estruturas geométricas das moléculas. Os dados disponibilizados pelo programa foram confrontados com dados observados experimentalmente.

Agradecimentos

CCA/UFES

¹ ATKINS, P.M; SHRIVER, D.F. Química Inorgânica. 4ª Edição. São Paulo, Bookman, 2008. 848 p.

² RAUPP, Daniele; SERRANO, Agostinho; MARTINS, C. Tales Leonardo. A evolução da química Computacional e sua contribuição para a educação em Química. Disponível em: <<http://www.liberato.com.br/upload/arquivos/0103110810131419.pdf>>. Acesso em: 15 de março 2012