



VENHA À UMA AULA NO TÉCNICO

Modelação Molecular: A Química num Computador

José Nuno Aguiar Canongia Lopes

A química computacional nasceu muito mais tarde que os restantes e mais tradicionais ramos da química (química orgânica ou inorgânica, química analítica, química-física, termodinâmica química, bioquímica, ou mesmo os diversos tipos de química teórica). Esse aparecimento tardio deve-se, como é óbvio, ao facto de só poder existir química computacional quando existem computadores suficientemente poderosos para efetuar os cálculos inerentes a sistemas com múltiplos componentes.

Existe uma primeira "separação de águas" entre os vários métodos subjacentes à química computacional: os que tentam modelar de forma detalhada a estrutura interna das moléculas e que se baseiam nos princípios da mecânica quântica (métodos *ab initio*, teorias do funcional da densidade), e os que tentam prever as propriedades de grandes conjuntos de moléculas e que se baseiam na mecânica estatística (métodos de Monte Carlo e Dinâmica Molecular).

Nesta palestra serão ilustradas várias técnicas de modelação e simulação molecular, bem como exemplos das capacidades predictivas e interpretativas de tais métodos aplicadas a casos concretos, nomeadamente na área emergente dos líquidos iónicos. Que limitações falta ainda ultrapassar, que outras possíveis aplicações e qual o contributo da Química para o desenvolvimento desta tecnologia, serão perguntas a que tentaremos responder.

