MODELAGEM DE MOLÉCULAS E CÁLCULOS DE ESTRUTURA ELETRÔNICA UTILIZANDO SOFTWARES LIVRES

DOS SANTOS, Kauã Melo[1]; SILVA, Gesiel Gomes[1]*
[1]Instituto Federal de Goiás, Câmpus Luziânia *gesiel.silva@ifg.edu.br

A Química Computacional é uma importante área de pesquisa científica que utiliza conhecimentos combinados de diversas áreas, tais como: Química, Computação, Física, Matemática, entre outras. Este trabalho teve como objetivo explorar o uso de *softwares* livres, importantes na democratização e disseminação do conhecimento, visando o estudo de propriedades físicas e químicas de moléculas simples, amplamente investigadas, bem como explorar algumas moléculas mais complexas, o que nos permitiu verificar o potencial dessas ferramentas e também a familiarização com a simulação computacional e suas possibilidades de aplicação. Esses pacotes e programas, geralmente mais acessíveis, podem fornecer dados valiosos e úteis tanto para pesquisas acadêmicas, inclusive como ponto de partida (*inputs*) para simulações mais complexas, bem como também para finalidades comerciais, como, por exemplo, no estudo de potenciais novos fármacos. O *software* utilizado foi o *Argus Lab*, que aplicamos ao longo de todo o processo de modelagem e cálculos de estrutura eletrônica, explorando diferentes características de compostos diversos por meio de suas funcionalidades. A fim de que a pesquisa fosse bem fundamentada, agregando conhecimento e também para que fosse possível uma boa análise dos resultados obtidos, foi feita uma revisão e até mesmo um aprofundamento dos conceitos de química básica além de uma introdução ao campo da química quântica, sem qualquer preocupação com a formalização matemática envolvida mas sim com a parte conceitual. Posteriormente, as moléculas selecionadas foram modeladas, otimizando a geometria e analisando algumas de suas propriedades, tais como: comprimento de ligação, ângulo de ligação, densidade eletrônica, polaridade e orbitais. Os resultados obtidos foram sempre comparados com aqueles disponíveis na literatura científica e se mostraram satisfatórios, especialmente considerando que não foram utilizados computadores com configurações avançadas ou mesmo *clusters*. Apesar dos recursos limitados, os resultados obtidos corroboraram com o fato de que é possível produzir conhecimento de qualidade a partir de ferramentas acessíveis e disponíveis gratuitamente. Esse e outros *softwares* livres com a mesma finalidade se mostram úteis também como ferramentas didáticas, facilitadoras do processo de ensino e aprendizagem de química e física.

Palavras-chave: *software* livre; química computacional; geometria; moléculas.

Agradecimentos: O presente trabalho foi realizado com o apoio do Instituto Federal de Goiás (Edital n° 18/2023). dos Santos, Kauã Melo agradece ao CNPq pela bolsa concedida.