

# PAINEL 19

*Construção, Cálculo  
e Catalogação de  
Famílias de Moléculas  
Covalentes*

**DESTAQUE**

**Patricia Mesquita Viana**

Bolsista de Inic. Científica, Meteorologia,  
UFRJ

**Paulo Sérgio da Silva Pinto**

Orientador, Eng<sup>o</sup> Químico, D.Sc.

**Peter Rudolf Seidl**

Co-orientador, Eng<sup>o</sup> Químico,  
D.Sc.

## 1. INTRODUÇÃO

Com o advento da modelagem molecular, estruturas químicas tridimensionais passaram a ser construídas, manipuladas e analisadas com o auxílio do computador. As informações obtidas da estrutura molecular podem ser usadas na interpretação dos mecanismos de reação de certas moléculas e na obtenção de correlações entre estrutura e atividade (1). Até então, essas correlações eram de difícil constatação, pois somente eram disponíveis modelos rígidos ou desenhos de estruturas tridimensionais em papel. A modelagem molecular possibilitou a redução do tempo gasto entre pesquisa, síntese e testes de



laboratório e dos altos custos derivados da grande quantidade de moléculas testadas.

Este trabalho tem por objetivo descrever o mecanismo de armazenamento de informações sobre moléculas covalentes, desenvolvido neste Centro, na forma de um catálogo que possibilite o acesso rápido e fácil a dados estruturais e propriedades químicas, evitando o trabalho de reconstrução de uma molécula anteriormente estudada.

Foram desenvolvidos trabalhos de construção e cálculo para catalogação, através do uso de *softwares* acadêmicos e comerciais de modelagem molecular, de uma das várias famílias de moléculas derivadas do norbonano-biciclo[2.2.1] heptano-, composta de 90 moléculas inicialmente, divididas em quatro grupos de acordo com a semelhança existente em suas estruturas químicas (CRM, KAT, MOLL, VALENT).

Essa família de moléculas foi escolhida previamente por ser intensamente estudada pela química teórica e, em alguns casos, pela ressonância magnética nuclear (NMR), uma vez que possui uma unidade estrutural comum, com propriedades peculiares interessantes e que origina outras estruturas mais complexas como, por exemplo, uma gaiola da zeólita ZSM-5.

## 2. METODOLOGIA

### 2.1 Construção das Estruturas Moleculares

As moléculas foram construídas com o auxílio de dois *softwares* de modelagem molecular comerciais — ALCHEMY II (em microcomputadores) (2) e CERIOUS (em *workstations*) (3) — na sua forma espacial, e posteriormente minimizadas.

O processo de minimização executa ajustes na estrutura desenhada (plana), a fim de ser encontrada a forma na qual a molécula apresenta energia mínima de interação entre seus

átomos, considerada padrão (após ser finalizada a minimização, a molécula é apresentada tridimensionalmente).

Foram feitos, também, desenhos de suas estruturas na forma plana, com o auxílio do *software* de desenhos químicos CHEMYWINDOWS. Assim, foram armazenadas imagens das estruturas moleculares na forma tridimensional, para futuras análises e comparações, e na forma plana, uma vez que a maioria das representações encontradas na literatura são apresentadas neste formato.

### 2.2 Cálculos de Propriedades Químicas

Existem diversos métodos de cálculo de parâmetros moleculares. Dentre eles, optou-se pelo uso da modelagem molecular (método empírico) e o MOPAC (método semi-empírico) disponíveis no *software* CERIOUS.

Através do MOPAC, pela rotação de um átomo escolhido previamente, foram obtidas, para todos os demais átomos, as variações de carga e energia para cada posição determinada, e os seguintes parâmetros moleculares: calor de formação, energia eletrônica, repulsão núcleo a núcleo, dipolo, número de níveis preenchidos, potencial de ionização, peso molecular, cálculos SCF, tempo de computação e matriz-z, que contém, para cada átomo, coordenadas espaciais(x,y,z), as ligações entre eles e a carga.

## 3. RESULTADOS OBTIDOS

Os dados obtidos pelo MOPAC geram os seguintes dados:

- listagem impressa dos cálculos realizados;
- imagem da molécula com os átomos numerados para correlacioná-los às páginas de cálculos e
- imagem da molécula com os símbolos dos elementos.

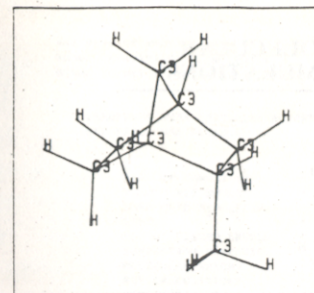


Para uma posterior análise visual, os dados resultantes dos cálculos de cada molécula foram armazenados no *software* de planilha eletrônica Quattro Pro, em 3 tipos de planilhas, gerando os seguintes gráficos:

- carga x posição angular (em relação a cada átomo);
- energia x posição angular (em relação à molécula) e
- distribuição de conformações x posição angular (em relação à molécula).

Com o objetivo de se agrupar os cálculos e gráficos criados para cada molécula estudada, foi idealizado o catálogo de moléculas, constituído da seguinte ordem de páginas:

- página de apresentação da molécula, definida no editor de textos WORDPERFECT, constituída de: imagem tridimensional construída no ALCHEMY, imagem plana construída no CHEMYWINDOWS, nome pela classificação IUPAC (4), nome comercial, nome catalogado, fórmula molecular e trabalhos publicados anteriormente sobre a mesma;
- página contendo imagem tridimensional construída no CERIOUS, apresentando os símbolos dos elementos;
- página contendo imagem tridimensional construída no CERIOUS, apresentando os átomos numerados pela classificação IUPAC;
- páginas dos cálculos gerados pelo MOPAC, no CERIOUS;
- páginas dos gráficos gerados no QUATTRO PRO.



FORMULA MOLECULAR:  
 $C_8H_{14}$

NOME IUPAC:  
Endo-2-metil,Biciclo[ 2.2.1 ]heptano.

NOME COMERCIAL :

NOME CATALOGADO:  
CRM3

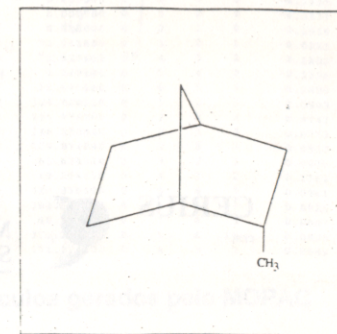
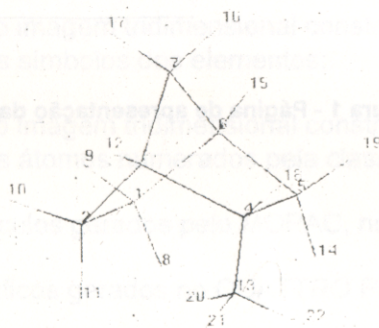
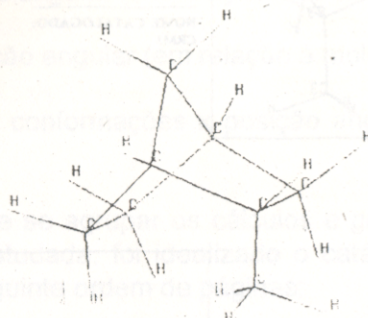


Figura 1 - Página de apresentação da molécula





Figuras 2 e 3 - Imagens tridimensionais do CERIUS apresentando símbolos dos elementos e átomos numerados pela classificação IUPAC

AM1 T=24.0H PRECISE BONDS  
Mopac Calculation from CERIUS  
MOPAC format Z-matrix from CERIUS: crm3f001

GRADIENTS WERE INITIALLY ACCEPTABLY SMALL  
SCF FIELD WAS ACHIEVED

HEAT OF FORMATION - 842.007296 KCAL  
ELECTRONIC ENERGY - 7245.826088 EV  
CORE-CORE REPLICATION - 6065.348793 EV  
DIPOLE - 0.09266 DEBYE  
NO. OF FILLED LEVELS - 23  
IONIZATION POTENTIAL - 10.403792 EV  
MOLECULAR WEIGHT - 110.199  
SCF CALCULATIONS - 2  
COMPUTATION TIME - 2.110 SECONDS

FINAL GEOMETRY OBTAINED

| AM1 T=24.0H PRECISE BONDS                   |           |   |            |   |            |   |   |   |   | CHARGE  |
|---|-----------|---|------------|---|------------|---|---|---|---|---------|
| Mopac Calculation from CERIUS               |           |   |            |   |            |   |   |   |   |         |
| MOPAC format Z-matrix from CERIUS: crm3f001 |           |   |            |   |            |   |   |   |   |         |
| C   | 0.0000000 | 0 | 0.0000000  | 0 | 0.0000000  | 0 | 0 | 0 | 0 | -0.1455 |
| C   | 1.4065300 | 0 | 0.0000000  | 0 | 0.0000000  | 0 | 1 | 0 | 0 | -0.1539 |
| C   | 1.3976300 | 0 | 102.625320 | 0 | 0.0000000  | 0 | 2 | 1 | 0 | -0.1519 |
| C   | 1.3926900 | 0 | 107.721960 | 0 | 72.193800  | 0 | 3 | 2 | 1 | -0.0235 |
| C   | 1.3979700 | 0 | 102.841120 | 0 | 71.929860  | 0 | 4 | 3 | 2 | -0.1802 |
| C   | 1.3932700 | 0 | 102.865300 | 0 | 0.148980   | 0 | 5 | 4 | 3 | -0.1136 |
| C   | 1.3893700 | 0 | 102.226250 | 0 | 35.648660  | 0 | 6 | 5 | 4 | -0.1429 |
| H   | 0.9499200 | 0 | 112.652470 | 0 | 120.420110 | 0 | 1 | 2 | 3 | 0.0803  |
| H   | 0.9496800 | 0 | 109.066300 | 0 | 115.974200 | 0 | 1 | 2 | 3 | 0.0741  |
| H   | 0.9496100 | 0 | 109.082660 | 0 | 116.558340 | 0 | 2 | 1 | 3 | 0.0773  |
| H   | 0.9499900 | 0 | 112.633420 | 0 | 119.819040 | 0 | 2 | 1 | 3 | 0.0913  |
| H   | 0.9500400 | 0 | 113.386670 | 0 | 161.626310 | 0 | 3 | 2 | 1 | 0.0976  |
| C   | 0.9499500 | 0 | 113.647260 | 0 | 49.294350  | 0 | 4 | 3 | 2 | 0.1761  |
| H   | 0.9499500 | 0 | 112.825870 | 0 | 120.310190 | 0 | 5 | 4 | 3 | 0.0861  |
| H   | 0.9500200 | 0 | 113.311580 | 0 | 161.572170 | 0 | 6 | 5 | 4 | 0.0926  |
| H   | 0.9514100 | 0 | 112.685320 | 0 | 60.264340  | 0 | 7 | 6 | 5 | 0.0847  |
| H   | 0.9506700 | 0 | 112.746650 | 0 | 172.210850 | 0 | 7 | 6 | 5 | 0.0820  |
| H   | 0.9499900 | 0 | 109.779780 | 0 | 171.274200 | 0 | 4 | 3 | 2 | 0.0588  |

Figura 4 - Página de cálculos gerados pelo MOPAC

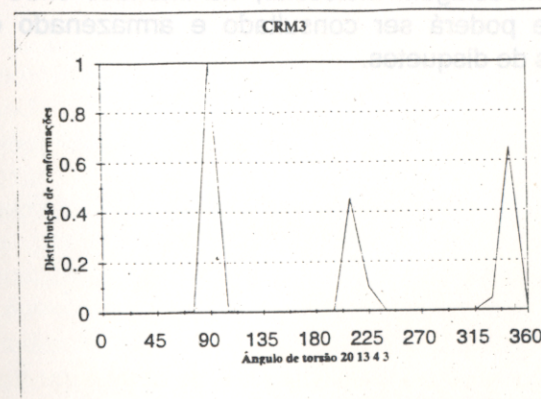


Figura 5 - Página de gráfico gerado no QUATRO-PRO



#### 4. CONSIDERAÇÕES GERAIS

O catálogo foi construído apenas para o grupo de nome catalogado CRM, composto de 17 moléculas, restando ainda o cálculo dos grupos KAT, MOLL e VALENT, compostos no total de 73 moléculas, já construídas e arquivadas nos *softwares* de modelagem molecular. Isso se deve à constatação de que os dados integrantes do catálogo demandaram um tempo considerável de impressão, aliado a um grande volume de papel utilizado pois somaram aproximadamente 500 folhas, entre imagens, cálculos e gráficos, apenas para o grupo citado anteriormente, que corresponde a 1/5 do total de moléculas estudadas.

Esse resultado demonstra que este tipo de armazenamento de moléculas é inviável, uma vez que se deseja criar um mecanismo prático, que requeira o menor tempo possível de procura e uso, por parte do pesquisador.

Após esse resultado, foi definida a criação de um banco de dados via microcomputador, ou melhor, um banco de estruturas moleculares (5), que será alimentado com os dados do respectivo catálogo, e que, futuramente, será interligado diretamente com os *softwares* de modelagem molecular, via interface entre micros e *workstations* e poderá ser consultado e armazenado de forma rápida, através de disquetes.

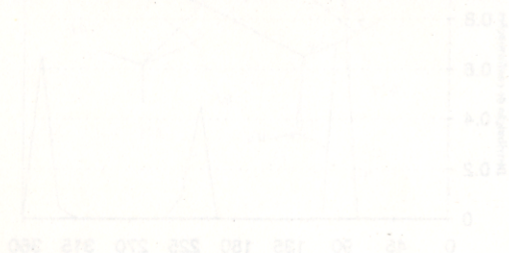


Figura 2 - Página de gráfico gerado no QUATRO PRO

#### BIBLIOGRAFIA

1. RUSSEL, J.B., General Chemistry, Copyright by McGraw-Hill do Brasil; (1982).
2. TRIPOS ASSOCIATES, INC, User Manual ALCHEMY II, (1988).
3. MOLECULAR SIMULATIONS, INC, User Manual CERIOUS Version 3.1 and 3.2, (1993, 1994).
4. ALENCASTRO, R.B. de, Nomenclatura dos Compostos Orgânicos, *Química Nova*, (1982), pp. 67-110.
5. TÜRNER, V.P., Banco de Dados de Estruturas Moleculares, Centro de Tecnologia Mineral (1994).

#### 1. INTRODUÇÃO

O conjunto dos procedimentos analíticos que são utilizados no Departamento de Química Analítica e Instrumental (DAI) precisa ser revisado e atualizado periodicamente, com o propósito de manter o bom nível dos trabalhos laboratoriais.

Em primeiro lugar, a metodologia empregada e técnicas de execução dos procedimentos analíticos em laboratório são revistas e atualizadas periodicamente, com o propósito de manter o bom nível dos trabalhos laboratoriais. Além disso, a metodologia empregada e técnicas de execução dos procedimentos analíticos em laboratório são revistas e atualizadas periodicamente, com o propósito de manter o bom nível dos trabalhos laboratoriais.