

TULHO MARTINS DOS REIS

**INTRODUÇÃO À MODELAGEM MOLECULAR COM O *SOFTWARE*
AVOGADRO®: POTENCIALIDADES E LIMITAÇÕES**

Monografia apresentada ao Departamento de Química da Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências para a conclusão do Curso de Bacharelado em Química.

VIÇOSA – MINAS GERAIS

2022

*Dedico este trabalho a minha amada **Vó Maria** (in memoriam – 10/02/2021), que me ensinou sobre fé, amor e resiliência.*

*Dedico ao meu sobrinho **Calebe**, ao meu primo **Emanuel Levi** e à **Diana**. Que a educação pública de qualidade alcance vocês, a nova geração.*

AGRADECIMENTOS

À *força divina*, que, em mim, faz-se abrigo, transbordando pelo meu ser. Louvo a Deus todos os dias pela sua graça e amor incondicional. A *mim*, pela resiliência, determinação e, sobretudo, sonhos. À minha *Vó Maria*, cujo amor levarei para sempre. À minha *mãe Silvani* pela vida e orações. A meu *irmão Jorge Lucas*, pelo incentivo e por me fazer acreditar no amanhã. À **Carla Beatriz**, que honrou a vida e memória de minha Vó. À minha prima **Luciana**, pelas conversas sobre família, trajetória e futuro. À minha prima **Lauddy**, pelo tempo partilhado, nas férias e pelas conversas, ao longo desses anos. À minha amiga **Alenne** pelo apoio ao longo desses anos e por me ensinar sobre a bondade. Ao amigo **Luquinhas**, pelas conversas e incentivos. À minha amiga **Sabrina**, por todas as vezes que se fez presente, mesmo à distância. Ao **Diego Ducan**, por ter me recebido tão bem em sua casa, quando eu mais precisei. Você me deu a energia que eu precisava para seguir em frente. À minha amiga **Paula Fernanda**, por ter sido uma família em Viçosa, ao longo desses anos. À **Dany**, amiga especial que Viçosa me apresentou. Lembrome de quando dividimos um miojo e um pão de sal, em um sábado à noite. O milagre da multiplicação fez mais do que sentindo. À minha amiga **Gabi**, com a qual aprendi a resignificar o período da graduação e a olhar com mais empatia para a minha trajetória. Sigo encontrando a porta para a bagunça que se acumulo por aqui (Desanuiar – Gabi Viegas). À **Karoline França**, uma amizade que simplesmente aconteceu, como os dias mais inexplicados da vida. Ao amigo **Abraão**, pelas conversas profundas e reflexivas que tivemos ao longo desses anos. À minha amiga **Bibi**, cujo abraço me deu ânimo em muitos momentos. Às professoras do meu ensino fundamental, **Camille Altoé** (por ter me apresentado ao universo da Química), **Gilmara Pandolfi** (por ter acreditado no meu potencial como ser humano e estudante) e **Inovicleia** (por ter me feito olhar o futuro como possibilidade, e pelo lindo cartão de Natal). À professora **Cataldi** (DEL/UFV), por ter me acolhido, ensinado e aconselhado. À professora **Rosane** (DMA/UFV) pela empatia e pelos conselhos, os quais levo comigo ainda hoje. À professora **Andreza** (DPF/UFV) pelas oportunidades de conversa, embora tenham sido poucas, muito me fizeram refletir. À professora **Ana Paula** (DEQ/UFV), pelos diálogos sobre vida, futuro, trajetória e pelos chás de hortelã. À professora **Ástrea** (DEQ/UFV), pelas conversas sobre trajetória e futuro. À professora **Deyse** (DEQ/UFV), que me orientou, acolheu, ensinou e muito ainda me ensina. Ao professor **Angel** (DEQ/UFV), pelas conversas sobre Química, cultura e política e por aceitar, gentilmente, avaliar este trabalho. À professora **Nauvia** (IFES), pelo incentivo incondicional e também por ter aceitado avaliar este trabalho. Aprendo muito com você todos os dias. Por fim, agradeço à **UFV**, pela possibilidade de uma formação ímpar.

“Tudo tem o seu tempo determinado, e há tempo para todo o propósito debaixo do céu:

Há tempo de nascer e tempo de morrer; tempo de plantar e tempo de arrancar o que se plantou;

Tempo de matar e tempo de curar; tempo de derribar e tempo de edificar;

Tempo de chorar e tempo de rir; tempo de prantear e tempo de saltar de alegria;

Tempo de espalhar pedras e tempo de ajuntar pedras; tempo de abraçar e tempo de afastar-se de abraçar;

Tempo de buscar e tempo de perder; tempo de guardar e tempo de deitar fora;

Tempo de rasgar e tempo de coser; tempo de estar calado e tempo de falar;

Tempo de amar e tempo de aborrecer; tempo de guerra e tempo de paz”

(Eclesiastes 3.1-8)

RESUMO

MARTINS, Tulho R., Monografia de conclusão do Curso de Bacharelado em Química. Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 2022. **INTRODUÇÃO À MODELAGEM MOLECULAR COM O SOFTWARE AVOGADRO®: POTENCIALIDADES E LIMITAÇÕES**. Orientadora: Deyse Gomes da Costa.

Este trabalho tem como objetivo avaliar as potencialidades e limitações do Avogadro® (*software*) como uma ferramenta introdutória à modelagem molecular. Atualmente, vários *softwares* calculam propriedades moleculares, a partir de vários níveis de teorias: clássica ou quântica; o Avogadro® se baseia na teoria clássica. As espécies químicas H_2 , CH_4 , NH_3 , H_2O , He_2 , C_3 , CH_3NH_2 e CH_3CONH_3 foram escolhidas como protótipos de estudo. Os parâmetros comprimento e ângulo de ligação e a energia total foram calculados para essas espécies, empregando-se os campos de força clássicos UFF e MMFF94. Os resultados foram discutidos à luz da Mecânica Quântica, baseando-se nas Teorias de Ligação de Valência (TLV) e a Teoria do Orbital Molecular (TOM). Concluiu-se que o Avogadro® pode ser empregado satisfatoriamente como uma ferramenta na modelagem molecular quando se pretende fazer uma abordagem qualitativa, envolvendo a visualização, edição e manipulação de estruturas químicas.

Palavras-chaves: Mecânica Quântica (MQ), Campo de Força, Otimização de Geometria, Avogadro®, Modelagem Molecular.

ABSTRACT

MARTINS, Tulho R., Undergraduate Final Paper Submitted to the Department of Chemistry in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Bachelor in Chemistry. Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 2021. **INTRODUCTION TO MOLECULAR MODELING WITH THE AVOGADRO® SOFTWARE: POTENTIALITIES AND LIMITATIONS.** Advisor: Deyse Gomes Costa.

This work aims to evaluate the potentialities and limitations of Avogadro® software as an introductory tool to molecular modeling. Currently, various software calculates molecular properties, from various levels of theories: classical or quantum. Thus, part of the difficulties associated with the application of Quantum Mechanics (QM) to Chemistry can be circumvented. Chemical species H_2 , CH_4 , NH_3 , H_2O , He_2 , C_3 , CH_3NH_2 e CH_3CONH_3 were chosen as study prototypes. The parameters length and angle of connection and total energy in the equilibrium were calculated for these species, using the force fields UFF and MMFF94. . The results were discussed in the light of quantum mechanics, based on the Valencia N.K.A. (VL) and molecular orbital theory (MO). It was concluded that Avogadro® can be used satisfactorily as a tool in molecular modeling for the visualization, editing and manipulation of chemical structures.

Keywords: Quantum Mechanics (QM), Force Fields, Molecular Modeling, geometry optimization, Avogadro®.