

Química Computacional

CITAÇÃO

Fernandes, F. M. S. S. (2015)
Química Computacional,
Rev. Ciência Elem., V3(02):131.
doi.org/10.24927/rce2015.131

EDITOR

José Ferreira Gomes,
Universidade do Porto

RECEBIDO EM

17 de janeiro de 2012

ACEITE EM

30 de janeiro de 2012

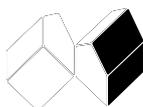
PUBLICADO EM

15 de junho de 2015

COPYRIGHT

© Casa das Ciências 2015.
Este artigo é de acesso livre,
distribuído sob licença Creative
Commons com a designação
[CC-BY-NC-SA 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/), que permite
a utilização e a partilha para fins
não comerciais, desde que citado
o autor e a fonte original do artigo.

rce.casadasciencias.org



Fernando Manuel Sebastião Silva Fernandes

Faculdade de Ciências Universidade de Lisboa

A Química Computacional é um ramo interdisciplinar da Química que serve todas as suas especialidades, tecnologias e indústrias afins. O objetivo da Química Computacional é o desenvolvimento e utilização de software dedicado à resolução de problemas químicos, bioquímicos, tecnológicos e industriais.

A vastidão do seu domínio leva a que se identifiquem algumas vertentes como a Modelação Molecular (ou Simulação Molecular), Quimiometria, Quimioinformática e Bioinformática que, embora com notáveis interseções, sistematizam objetivos e métodos específicos:

(i) Cálculo de propriedades de moléculas reais ou ainda não sintetizadas, e de sistemas moleculares (sólidos, líquidos, gases, plasmas, interfaces e organismos biológicos). A gama de propriedades estende-se desde as estruturas eletrónicas e conformações de moléculas isoladas até aos diferentes tipos de energia, dinâmica e reatividade de sistemas moleculares. Os fundamentos são teorias e modelos da mecânica clássica e quântica, do eletromagnetismo e da termodinâmica estatística, cujos métodos computacionais típicos são: ab initio e DFT, mecânica e dinâmica moleculares, Monte Carlo, incluindo os de cinética química e bioquímica, minimização de energia, análise conformacional e espetroscópica, integração e perturbação termodinâmicas, tratamento de erros e docking. Estes aspetos são usualmente associados à designação Modelação Molecular (ou Simulação Molecular).

(ii) Análise e tratamento da informação química, proveniente de experiências laboratoriais, monitorização instrumental/industrial e simulações, em tempo-real ou armazenada em bases de dados (tipicamente com números de entradas da ordem de vários milhões) para, por exemplo: (a) previsão de espetros (RMN, Infravermelho, Massa, etc.) que complementam a comprovação de sínteses químicas; (b) determinação de relações de estrutura-atividade molecular (QSAR); (c) planeamento e assistência de técnicas experimentais automatizadas (como a química combinatorial, "high-throughput screening" e "flowshops") dirigidas à síntese de vários produtos em simultâneo, de interesse químico, agroquímico e farmacêutico; (d) determinação de sequências genéticas; (e) classificação automática de reações químicas e bioquímicas; (f) reconhecimento de padrões; (h) controlo de qualidade e calibração instrumental.

A par de técnicas da modelação molecular, usam-se métodos mais específicos como a análise de componentes principais, otimização multivariada, redes neuronais artificiais, algoritmos genéticos, autómatos celulares e "expert systems" que, por sua vez, também

são utilizados em muitos problemas de modelação molecular (minimização de energia, análise conformacional, estimativa de erros, regressão, ajustes não-paramétricos, concepção de novos materiais e fármacos, etc.). Estes aspetos, nas fronteiras entre a Química e as Estatística, Informática e Inteligência Artificial, associam-se aos nomes Quimiometria ou Quimioinformática e Bioinformática.