

Prefácio

Luiz Carlos Gomide Freitas

SciELO Books / SciELO Livros / SciELO Libros

FREITAS, L.C.G. Prefácio. In: FREITAS, L.C.G., and OLIVEIRA, G.S., orgs. *Aplicações de química teórica no estudo de materiais: métodos in silico para nanomateriais* [online]. São Carlos: EdUFSCar, 2018, pp. 9-11. ISBN 978-65-80216-12-3. Available from: doi: [10.7476/9786580216123.0001](https://doi.org/10.7476/9786580216123.0001). Also available in ePUB from: <http://books.scielo.org/id/nvnjd/epub/freitas-9786580216123.epub>.



All the contents of this work, except where otherwise noted, is licensed under a [Creative Commons Attribution 4.0 International license](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

Todo o conteúdo deste trabalho, exceto quando houver ressalva, é publicado sob a licença [Creative Commons Atribuição 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

Todo el contenido de esta obra, excepto donde se indique lo contrario, está bajo licencia de la licencia [Creative Commons Reconocimiento 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

PREFÁCIO

Na próxima década, em 2029, completará um século a famosa afirmação de Paul Adrien Maurice Dirac:

As leis físicas subjacentes à teoria matemática de uma larga parte da Física e de toda a Química são, portanto, completamente conhecidas, sendo a única dificuldade o fato de a aplicação destas leis conduzir a equações demasiado complicadas para serem resolvidas. É por isso desejável desenvolver métodos práticos de aplicação da mecânica quântica que ofereçam uma explicação das principais características dos sistemas atômicos complexos sem recorrer a muitos cálculos.

Existe um forte cunho reducionista nesta afirmação, mas é instigante refletir se, ao proclamá-la, Dirac não considerava também o desenvolvimento da Mecânica Estatística e suas correlações com a Termodinâmica. Cabe ressaltar que, à época, além dos sucessos obtidos com a espectroscopia atômica, eram conhecidas as contribuições seminais de Walter Heitler e Fritz London¹ sobre a estrutura e estabilidade da molécula de H₂ e o trabalho de Max Born e Robert Oppenheimer, “On the quantum theory of molecules”,² apresentando uma aproximação geral para explorar o estado quântico de moléculas. Outra contribuição importante, de Max Born, “Volume and heat of hydration of ions”,³ evidenciava a potencialidade de modelos híbridos, atomístico e contínuo dielétrico para calcular propriedades termodinâmicas. Ainda no limiar da

1 HEITLER, W.; LONDON, F. Interaction of neutral atoms and homopolar binding by quantum mechanics. *Zeitschrift für Physik*, n. 44, p. 455-472, 1927.

2 BORN, M.; OPPENHEIMER, R. On the quantum theory of molecules. *Ann. Phys.*, n. 84, p. 457, 1927.

3 BORN, M. Volume and heat of hydration of ions. *Zeitschrift für Physik*, n. 1, p. 45-48, 1920.

primeira metade do século XX, obras importantes, tais como as de Linus Pauling⁴ e de Charles Coulson,⁵ descortinaram horizontes conceituais para correlacionar ligação química e processos moleculares. Estes avanços iniciais, somados à argúcia e precisão reveladas nos trabalhos de Paul Dirac, contribuíram para que a afirmação fosse aceita com certa naturalidade.

O histórico do “é desejável desenvolver métodos práticos de aplicação”, preconizado por Paul Dirac, é constituído por inúmeros avanços que, acrescidos das facilidades advindas dos computadores, estabelecem na atualidade um amplo cenário de potencialidades para a investigação de sistemas moleculares complexos agrupados na terminologia “métodos para simulação computacional”. Com estas metodologias, utilizando parâmetros semiempíricos e/ou ab initio, experimentos in silico podem ser realizados. Partes significativas destes avanços foram reconhecidas com outorgas da premiação Nobel para desenvolvedores de conceitos e métodos em Química Teórica: Linus Pauling (1954); Kenechi Fukui e Roald Hoffmann (1981); John Pople e Walter Kohn (1998); Arieh Warshel, Martin Karplus, Michael Levitt (2013). Utilizando os conceitos e metodologias, estudos diversos têm sido realizados com sucesso, evidenciando a contribuição da Química Teórica para a abordagem atomística de problemas básicos e tecnológicos.

Este livro apresenta aplicações de métodos de Química Teórica na investigação de sistemas físico-químicos complexos, enfatizando estudos em ciências de materiais, sistemas biológicos etc. Métodos quânticos e clássicos já “tradicionais”, bem como a formulação de métodos híbridos que incorporam abordagens clássica e quântica, são discutidos. Os capítulos foram escritos por pesquisadores da área, formulados com redação independente, compondo um amplo espectro de aplicações. É uma pequena amostragem da diversidade e fecundidade alcançadas pela Química Teórica no país.

No cenário atual, que agrega disponibilidade de métodos e recursos computacionais, um novo desafio pode ser proposto para os pesquisadores brasileiros: dado a expertise da Química Teórica na compreensão do comportamento da matéria, como utilizá-la em projetos visando agregação de valor, buscando diminuir a histórica dependência econômica do país com relação à exportação de produtos primários?

Esta questão remete a uma reflexão profunda sobre objetivos da pesquisa, a colaboração entre pesquisadores e a interface com projetos tecnológicos. Uma tarefa complexa, mas que possui paralelos significativos com empreendimentos que obtiveram sucesso em outras nações. Esperamos que o conteúdo apresentado neste livro contribua para estas reflexões.

Nesta perspectiva, ensejamos que no aniversário de um século da afirmação de Paul A. M. Dirac, pesquisadores brasileiros possam elencar contribuições de pesquisas envolvendo Química Teórica para o avanço do Índice de Desenvolvimento Humano (IDH) deste país.

4 The nature of chemical bond, 1939.

5 Valence, 1952.

Será uma grande homenagem à afirmação de Paul A. M. Dirac, que, além de uma síntese científica genial, antecipou, com raro otimismo, potencialidades da Química Teórica na investigação de propriedades da matéria.

Luiz Carlos Gomide Freitas