



CONQUIAMB

Congresso Online Nacional de Química Analítica e Ambiental

UMA PROPOSTA DA APLICAÇÃO DA ANÁLISE POPULACIONAL DE MULLIKEN NA ECONOMIA DE REATIVOS EM LABORATÓRIOS.

Congresso Online Nacional De Química Analítica E Ambiental., 1ª edição, de 26/10/2020 a 30/10/2020
ISBN dos Anais: 978-65-86861-45-7

SILVA; Marco Aurélio de Sobral¹

RESUMO

1. A função de onda obtida através dos métodos de cálculo resultantes da Equação de Schrödinger não pode ser interpretada fisicamente mas algumas propriedades dos sistemas moleculares que podem ser calculadas a partir dessa função podem ter interpretações físicas. É o caso por exemplo da distribuição de cargas líquidas. A utilização de uma ferramenta de informática como peça auxiliar que julgamos importante nessa proposta visa economizar reativos que geram além dos produtos principais, subprodutos indesejados como resíduos poluentes persistentes com alto risco de vazamento, contaminação e explosão. A carga líquida é um parâmetro importante no estudo da estrutura eletrônica molecular. A sua análise distributiva na molécula indica a área com maior densidade eletrônica, ou seja, a sua região mais reativa. Objetivamos, neste resumo, desenvolver potencialmente uma forma de realizar reações orgânicas utilizando como recurso um software que tem como prioridade fornecer aos técnicos laboratoriais um grande banco de dados com moléculas utilizadas nas suas práticas laborais além de alguns parâmetros de sua estrutura eletrônica (carga líquida sobre os átomos). Os dados apresentados, como já dissemos, serão calculados com o uso do HyperChem versão 7.0, através do método químico- quântico semi-empírico AM1. A aplicação do software demonstrou que reações complexas podem ser analisadas em tempo real, substituindo em muitos casos, os métodos analíticos em laboratório além de não gerar os resíduos tóxicos que são detectados assim que se inicia o processo. Fomentando iniciativas a serem seguidas também por indústrias que queiram se adaptar a essa proposta buscando diminuir ou eliminar a utilização de substâncias que promovem poluição, bem como com os princípios da prática química guiada pela preocupação com a melhoria da qualidade de vida e com a preservação do meio ambiente.

PALAVRAS-CHAVE: Análise populacional, Economia de reativos, Laboratório.

¹ Licenciatura Plena em Química - Universidade Estadual do Ceará e Mestrado profissional em Química- profqui-UFRPE, marcoaurelioquimica@hotmail.com

