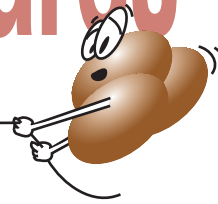
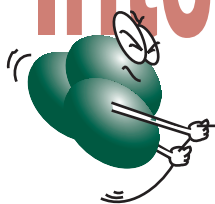


Interações Intermoleculares



Willian R. Rocha

Este artigo tem por objetivo fornecer uma descrição qualitativa dos principais tipos de interações intermoleculares que atuam nos sistemas químicos, e mostrar como o entendimento de tais interações pode auxiliar na racionalização de propriedades macroscópicas observáveis.

► propriedades termodinâmicas, forças intermoleculares ◀

Introdução

Quando moléculas, átomos ou íons aproximam-se uns dos outros, dois fenômenos podem ocorrer: (i) eles podem reagir ou (ii) eles podem interagir. Uma reação química por definição requer que ligações químicas sejam quebradas e/ou formadas. Usualmente as energias envolvidas neste processo variam entre 50 e 100 kcal.mol⁻¹. Uma interação química significa que as moléculas se atraem ou se repelem entre si, sem que ocorra a quebra ou formação de novas ligações químicas. Estas interações são frequentemente chamadas de interações não covalentes ou interações intermoleculares. As energias envolvidas em tais tipos de interações são muito menores que aquelas envolvidas em processos reativos, variando usualmente entre 0,5 a 10 kcal.mol⁻¹.

As interações intermoleculares estão intimamente relacionadas com as propriedades termodinâmicas de líquidos, sólidos e gases. Logo, o entendimento de tais forças intermoleculares é de extrema relevância se quisermos entender o comportamento de sistemas químicos a nível molecular. Como exemplo, a Figura 1 mostra como a temperatura de ebulição de hidrocarbonetos (compostos contendo somente carbono e hidrogênio) varia com o número de átomos de carbono

presentes na molécula. A temperatura de ebulição de um composto é a temperatura na qual um sistema líquido passa para a fase gasosa, que tem uma relação direta com as forças entre as moléculas constituintes do líquido. Pode-se ver na Figura 1 que a temperatura de ebulição varia linearmente com o número de átomos de carbono.

É interessante perceber na Figura 1 que o único fator diferenciador entre uma molécula e outra é a quantidade de átomos de carbono presentes. Entretanto, estas moléculas possuem um comportamento macroscópico completamente diferente. CH₄ é um gás à

temperatura ambiente e C₈H₁₈ é um líquido. Esta e outras características, como será mostrado adiante, estão intimamente relaciona-

das com a natureza das interações existentes entre as moléculas.

A Tabela 1 ilustra como as propriedades de um sistema químico estão intimamente relacionadas com a sua composição e estrutura tridimensional. Nesta tabela, são mostrados compostos

com massas moleculares aproximadamente iguais mas, que à temperatura ambiente existem em diferentes fases: butano (gás), acetona e álcool isopropílico (líquidos). É interessante perceber que dos dois líquidos, acetona e álcool isopropílico, a única diferença entre eles é a substituição de um grupo C=O por um grupo C-OH. Esta mudança é suficiente para alterar completamente as características dos dois líquidos. Como pode ser visto, a acetona é um líquido muito mais volátil que o álcool isopropílico. A substituição dos grupos funcionais é acompanhada de uma mudança na estrutura tridimensional da molécula, que irá afetar completamente a maneira na qual elas irão interagir no líquido. Também é

Uma interação química significa que as moléculas se atraem ou se repelem entre si, sem que ocorra a quebra ou formação de novas ligações químicas. Estas interações são frequentemente chamadas de interações não covalentes ou interações intermoleculares

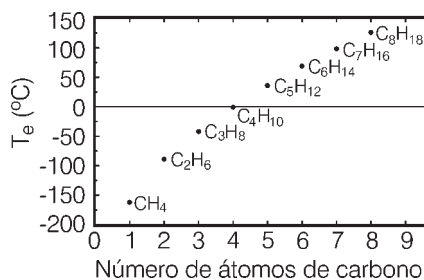
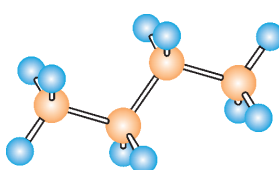
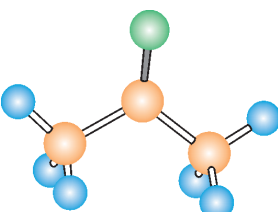
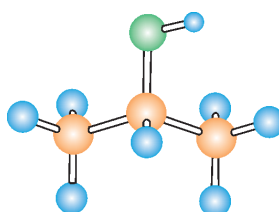


Figura 1: Variação da temperatura de ebulição com o número de átomos de carbono para os hidrocarbonetos lineares.

Tabela 1: Relação entre a estrutura e propriedades químicas.

Nome	butano	acetona	alcool isopropílico
Fórmula molecular	C_4H_{10}	C_3H_6O	C_3H_8O
Massa molecular (g/mol)	58	58	60
Estrutura bidimensional	$\begin{array}{ccccccc} & H & H & H & H & & \\ & & & & & & \\ H & - C & - C & - C & - C & - H & \\ & & & & & & \\ & H & H & H & H & & \end{array}$	$\begin{array}{ccccc} & H & O & H & \\ & & & & \\ H & - C & - C & - C & - H \\ & & & & \\ & H & & H & \end{array}$	$\begin{array}{ccccc} & H & OH & H & \\ & & & & \\ H & - C & - C & - C & - H \\ & & & & \\ & H & H & H & \end{array}$
Estrutura tridimensional			
Temperatura de ebulição (°C)	-0,6	56	82
Tipo de interação	Dispersão	Dipolo - Dipolo	Ligação de hidrogênio

mostrado na Tabela 1, os diferentes tipos de interação intermolecular, que serão explicados adiante, para os três compostos.

Para finalizar com os exemplos, cabe salientar que as interações intermoleculares e seu entendimento ganham sua expressão máxima em sistemas biológicos. As moléculas da vida (DNA, RNA, proteínas etc.) são mantidas em suas estruturas tridimensionais através de interações intra e intermoleculares. Uma vez que a estrutura tridimensional molecular é responsável pela atividade biológica específica destas moléculas, percebe-se então a importância do entendimento de tais interações. Um fato interessante, que até hoje não é bem entendido, é o porquê ou como estas moléculas biológicas adquirem sua estrutura tridimensional. Como exemplo, uma proteína é sintetizada como uma seqüência linear de aminoácidos que se enovelam no espaço dando origem à sua estrutura tridimensional única, que irá ditar se esta proteína terá características estruturais ou enzimáticas. Um outro fato interessante a ser mencionado é que todos os processos orgânicos vitais estão relacionados com o reconhecimento molecular específico inter e intramolecular. Estes processos podem ser definidos como sendo

interações fracas, usualmente reversíveis e altamente seletivas entre duas moléculas (intermolecular) ou dentro da macromolécula biológica (intramolecular). Um exemplo das interações intermoleculares específicas que mantém a estrutura tridimensional em hélice do DNA é mos-

trado na Figura 2.

Este artigo tem por objetivo fornecer uma descrição qualitativa dos principais tipos de interações intermoleculares que atuam nos sistemas químicos, e mostrar como o entendimento de tais interações pode auxiliar na racionalização de propriedades ma-

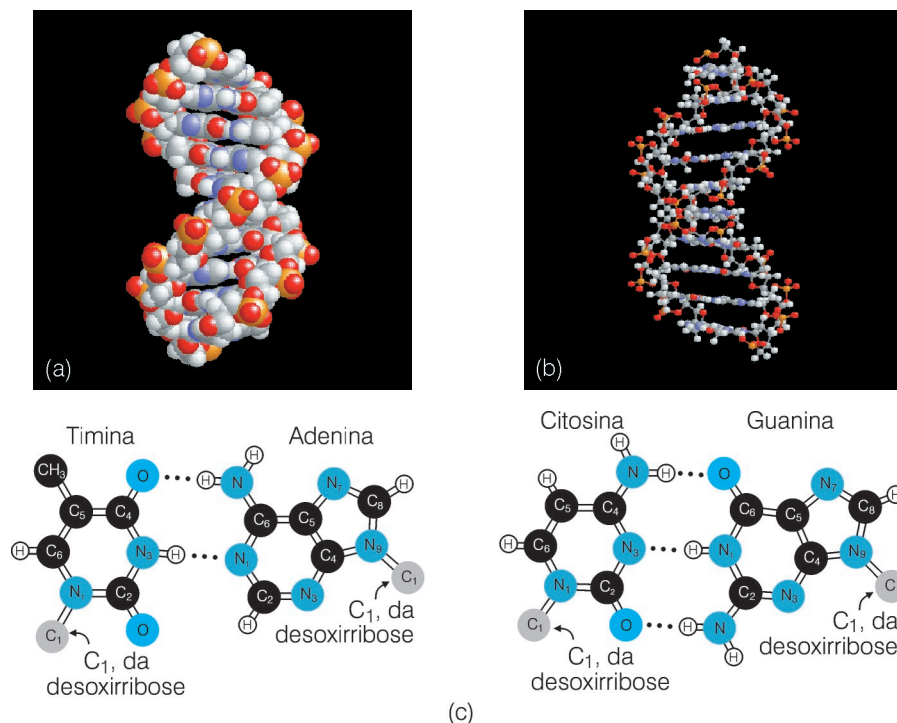


Figura 2: Estrutura tridimensional da molécula de DNA. (A) modelo de espaço preenchido. (B) modelo bola e vareta. (C) interações intermoleculares específicas (ligações de hidrogênio) entre os pares de bases.

croscópicas observáveis.

Descrição das forças intermoleculares

Sob um ponto de vista histórico, o efeito das interações intermoleculares e sua manifestação sobre o comportamento de sistemas químicos começou a mais de dois séculos atrás com os experimentos pioneiros em sistemas gasosos realizados por cientistas como Robert Boyle, Jacques Charles, Joseph-Louis Gay-Lussac e Johannes van der Waals. A combinação das relações obtidas por Boyle, Charles e Gay-Lussac levou à conhecida equação de estado dos gases ideais:

$$PV = nRT \text{ ou } P\bar{V} = RT \quad (1)$$

Onde P é a pressão, V é o volume, T a temperatura, n o número de moles do gás contidos no recipiente e R é a constante universal dos gases ideais. Um gás ideal é, por definição, um sistema gasoso constituído de partículas pontuais e não interagentes, isto é, não existe nenhuma interação entre as partículas constituintes do gás, quer sejam átomos ou moléculas. A análise da equação de estado dos gases ideais (Equação 1) nos revela algumas curiosidades. Por exemplo, a uma dada pressão e temperatura, 1 mol de qualquer gás ocupará o mesmo volume. Isto é devido ao fato que a equação dos gases ideais não contempla nenhuma informação inerente ao sistema gasoso sob estudo, o que faz com que as propriedades termodinâmicas calculadas sejam as mesmas para qualquer gás.

Os desvios do comportamento ideal dos gases podem ser vistos quando o fator de compressibilidade, Z , que é definido como mostrado na Equação (2), é representado graficamente em função de P a várias temperaturas.

$$Z = \frac{P\bar{V}}{RT} \quad (2)$$

As forças de interação intermoleculares fazem com que Z desvie do valor ideal de 1.

As interações intermoleculares surgem devido às forças intermoleculares, que são essencialmente de natureza elétrica, e fazem com que uma molécula influencie o comporta-

mento de outra molécula em suas proximidades. Estas forças são responsáveis pelo desvio do comportamento ideal dos gases, e são mais efetivas nas fases líquida e sólida da matéria. Uma vez que estas forças intermoleculares se originam do contato não reativo entre duas moléculas, é natural pensarmos que as forças intermoleculares tenham um comportamento que varie com o inverso da distância de separação entre as moléculas interagentes, isto é, as interações serão mais fortes para pequenas distâncias de separação entre as moléculas. Tal fato faz com que as interações intermoleculares possam ser agrupadas em interações de curto alcance (aquelas que atuam a pequenas distâncias de separação intermolecular) e interações de longo alcance, que atuam a grandes distâncias de separação intermolecular.

Para ilustrarmos como se dá a formação de um complexo intermolecular (espécie formada pela interação entre duas moléculas), considere a seguinte situação: uma molécula A interage com uma molécula B, produzindo a espécie A-B, como é exemplificado na Figura 3.

O ganho adicional de energia devido às interações intermoleculares no complexo A-B, pode ser obtido da seguinte forma:

$$E(\text{intermolecular}) = E_{A-B} - (E_A + E_B)$$

Esta energia intermolecular pode então ser decomposta nos seus vários componentes:

$$E(\text{intermolecular}) = E(\text{longo alcance}) + E(\text{curto alcance})$$

Logo, as principais contribuições energéticas para a estabilização do complexo intermolecular A-B podem ser encontradas. A pergunta que se torna imediata é: quais são as forças intermoleculares responsáveis pelas interações (energias) de curto e longo

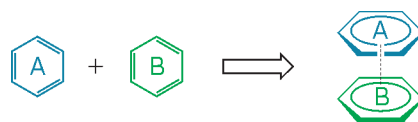


Figura 3: Formação de um complexo intermolecular entre duas moléculas de benzeno.

alcance? A seguir, alguns tipos de interações intermoleculares serão descritas.

Interações iônicas

São interações eletrostáticas fortes que ocorrem entre cátions e ânions, que são grupos funcionais com cargas positivas e negativas, respectivamente. Geralmente os compostos onde este tipo de interação é predominante são ditos serem compostos iônicos. Como exemplo podemos citar os compostos abaixo:

$[\text{Na}]^+\text{Cl}^-$ (cloreto de sódio)

$[\text{CH}_3\text{CO}_2]^- \text{Na}^+$ (acetato de sódio)

$[\text{CH}_3\text{NH}_3]^+\text{Cl}^-$ (cloreto de metil amônio)

As interações deste tipo (carga-carga) podem ser atrativas ou repulsivas. A força eletrostática associada com este tipo de interação é descrita matematicamente como (Lei de Coulomb):

$$F = k \frac{q_1 q_2}{\epsilon r^2} \quad (3)$$

onde q_1 e q_2 são as cargas das partículas (cátions ou ânions) interagentes. r é a distância que separa estas cargas e ϵ é a constante dielétrica do meio. Esta constante reflete a tendência do meio em blindar uma carga da outra, isto é, uma carga irá “sentir” com maior ou menor intensidade a presença da outra. A constante dielétrica assume valores de 1 no vácuo, ao redor de 4 no interior de proteínas e 80 na água. A energia eletrostática envolvida neste tipo de interação é dada por:

$$E_{\text{elet}} = k \frac{q_1 q_2}{\epsilon r} \quad (4)$$

Logo, a contribuição eletrostática para a energia intermolecular varia com o inverso da distância de separação intermolecular, $1/r$. As forças eletrostáticas conferem aos sólidos características como alto ponto de fusão e ebulição.

Interações do tipo dipolo-dipolo

Em moléculas constituídas de átomos diferentes, os elétrons não são compartilhados de maneira equivalente. O comportamento de átomos em moléculas pode ser entendido através de uma série de conceitos. Por exemplo, a tendência de um átomo em atrair elétrons para si, em um ambiente mole-

cular, é caracterizada por uma quantidade denominada eletronegatividade. A Tabela 2 mostra valores de eletronegatividade para alguns átomos:

Em uma molécula composta de átomos com diferentes eletronegatividades, os átomos com menor eletronegatividade ficam com cargas parciais positivas, e os átomos com maior eletronegatividade ficam com cargas parciais negativas. O resultado disto é que ocorre então uma polarização das ligações que refletirá na maneira como a molécula irá interagir. Para ilustrar este conceito, considere a molécula de acetona, mostrada na Figura 4.

Uma vez que o oxigênio é mais eletronegativo que o átomo de carbono, a ligação C=O exibirá um dipolo elétrico μ , (dois monopolos elétricos), com os elétrons tendendo a serem mais atraídos pelo oxigênio. Então, a ligação C=O terá uma carga parcial negativa (δ^-) no oxigênio e uma carga parcial positiva no carbono (δ^+). A representação do dipolo elétrico resultante na molécula de acetona é mostrada na Figura 4b. A ponta da seta é voltada para o lado negativo do dipolo. Da mesma forma que os lados opostos de um magneto (ímã) se atraem, os lados opostos de um dipolo se atraem, dando origem às interações dipolo-dipolo. Algumas orientações possíveis entre os dipolos na acetona são mostradas na Figura 5.

Como pode ser visto, a interação dipolo-dipolo depende da orientação espacial dos dipolos interagentes, isto é, o momento de dipolo elétrico, μ , é uma grandeza vetorial. Todas as moléculas polares exibem dipolos elétricos que são ditos serem permanentes. A magnitude do dipolo molecular nos fornece uma medida da polaridade da molécula, logo, moléculas mais polares apresentam maiores dipolos elétricos.

Tabela 2: Valores de eletronegatividade para alguns átomos.

Átomo	Eletronegatividade
H	2,13
C	2,55
N	2,98
O	3,45
S	2,53

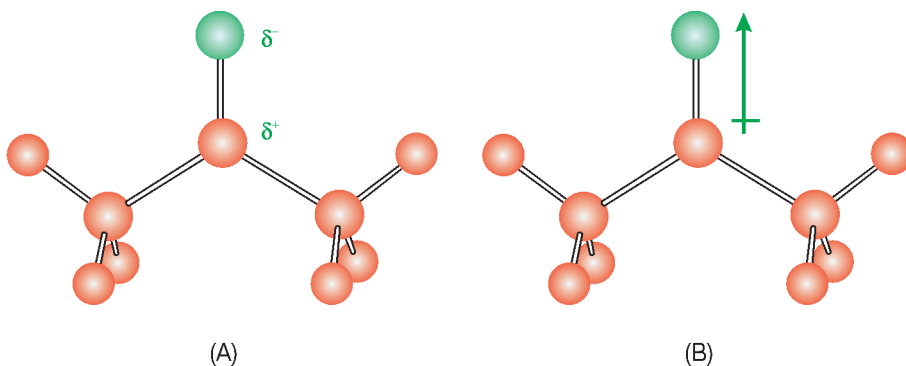


Figura 4: Momento de dipolo molecular da molécula de acetona. (A) distribuição de cargas, (B) orientação do vetor momento de dipolo resultante.

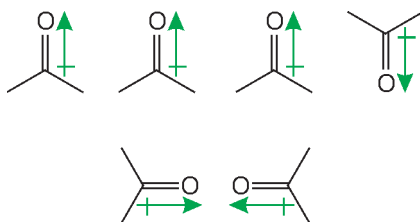


Figura 5: Algumas orientações dos vetores momento de dipolo na acetona.

cos, e moléculas com dipolo elétrico muito baixo ou zero são ditas serem apolares. A expressão matemática que define a interação dipolo-dipolo é mostrada abaixo:



$$E_{\text{dipolo-dipolo}} = -\frac{1}{4\pi\epsilon} \mu_a \mu_b (2\cos\theta_a \cos\theta_b - \text{sen}\theta_a \text{sen}\theta_b) \frac{1}{r^3} \quad (5)$$

A energia de interação dipolo-dipolo depende então da orientação entre os dois dipolos (dados pelos ângulos θ_a e θ_b) e varia com o inverso da terceira potência da separação intermolecular, $1/r^3$. Uma vez que dipolos são propriedades vetoriais, a estrutura tridimensional da molécula é crucial para a determinação da distribuição de cargas na molécula e, por conseguinte, do momento de dipolo resultante. Como exemplo, algumas moléculas podem ter ligações polares e, entretanto, não exibirem momento de dipolo elétrico resultante. Como por exemplo as moléculas CF_4 e *trans*-1,2-dicloroeteno, mostradas abaixo, não exibirão dipolo elétrico, pois o arranjo tridimen-

sional dos átomos nestas moléculas faz com os dipolos presentes nas ligações se anulem no somatório global para a determinação do dipolo molecular. Por conseguinte, estas moléculas não exibirão interações do tipo dipolo-dipolo.

Interações dipolo-permanente-dipolo induzido

Uma molécula com um dipolo permanente pode induzir um dipolo em uma segunda molécula que esteja localizada próxima no espaço. A força desta interação irá depender do momento de dipolo da primeira molécula e da polarizabilidade, α , da segunda molécula. A polarizabilidade de uma molécula é uma grandeza física que indica com que facilidade a densidade eletrônica da molécula pode ser polarizada, isto é, formando uma distribuição assimétrica de densidade eletrônica (cargas) e por conseguinte ocorrendo a formação de dipolos instantâneos na molécula. Estes dipolos instantâneos podem então se alinhar de várias maneiras com o dipolo permanente da primeira molécula, originando a interação dipolo permanente-dipolo induzido. Este tipo de interação usualmente

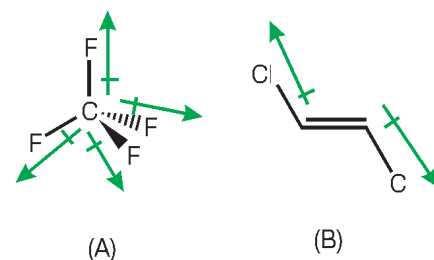


Figura 6: Orientação dos dipolos de ligação resultando em um dipolo molecular nulo.

varia com o inverso da quarta potência da separação intermolecular, $1/r^4$, e ocorre entre moléculas polares e apolares. A Figura 7 ilustra a interação dipolo permanente-dipolo induzido entre uma molécula polar e uma molécula apolar.

Interações de dispersão

Na introdução deste texto foi mostrado o exemplo dos hidrocarbonetos e a variação da temperatura de ebulição dos mesmos em função do número de átomos de carbono (Figura 1). Estes compostos possuem somente ligações do tipo C-C e C-H. Uma vez que a diferença entre as eletronegatividades dos átomos de carbono e hidrogênio é muito pequena, estes compostos serão apolares. Mas como explicar a diferença drástica na temperatura de ebulição mostrada na Figura 1? Indo mais além, como explicar o fato de que CH_4 é um gás à temperatura ambiente e C_8H_{18} é um líquido, sendo que a única diferença entre eles está no número de átomos de carbono? A resposta, como era de se esperar, está no tipo de interação intermolecular presente nestes compostos.

Quando compostos apolares interagem, o contato de uma molécula com a outra faz com que apareça uma força atrativa muito fraca que pode ser vista como uma interação dipolo induzido-dipolo induzido. Isto é, as polarizabilidades das duas moléculas em contato é que irão determinar a força de tal interação. Uma molécula perturba a densidade eletrônica da outra, fazendo aparecer dipolos momentâneos que se orientam e originam esta interação fraca. Esta interação também é conhecida como força de dispersão de London, em homenagem a Fritz London, que as descobriu. Trata-se de uma interação muito fraca, que varia com o inverso da sexta potência da separação intermolecular, $1/r^6$. Este tipo de força está presente em todo tipo de

sistema molecular, mas torna-se aparente somente quando as outras interações intermoleculares não estão presentes, como no caso dos hidrocarbonetos. Apesar de ser uma interação fraca, possui um efeito cumulativo e varia proporcionalmente com o número de contatos moleculares presentes na molécula. Isto justifica então o gráfico apresentado na Figura 1.

Ligações de hidrogênio

A idéia que um único átomo de hidrogênio poderia formar uma “ligação química” com outros dois átomos foi proposta em 1919 e 1920 por M.L. Huggins e G.N. Lewis, respectivamente. Um átomo aceptor (A), que possua um par de elétrons não ligado, pode interagir favoravelmente com um átomo doador (D) que carrega um hidrogênio ácido. Duas maneiras diferentes de representar uma ligação de hidrogênio podem ser vistas na Figura 8.

Uma ligação de hidrogênio requer que A e D sejam átomos eletronegativos (como por exemplo N, O e F). Se o átomo de hidrogênio está ligado a um átomo muito eletronegativo, o hidrogênio fica com uma carga parcial bastante positiva (ou ácido), e o outro átomo (D) fica com carga parcial negativa. Uma vez que o hidrogênio é o menor átomo da tabela periódica, é possível que as duas moléculas entrem em contato muito próximo uma da outra. A combinação de alta polaridade da ligação H-D e o contato muito próximo resulta em uma interação particularmente forte. Na verdade, a interação

é tão forte que é diferente das interações dipolo-dipolo convencionais, e recebe o nome especial de ligação de hidrogênio. A geometria de uma ligação de hidrogênio pode ser descrita através de três parâmetros: a distância D-H, representada por r_1 na Figura 8a, a distância H-A, r_2 , e o ângulo ϕ entre D-H-A. As ligações de

hidrogênio não são necessariamente lineares, correspondendo a $\phi = 180^\circ$, e um mesmo átomo aceptor pode formar mais de uma ligação de hidrogênio, como mostrado na Figura 8b. Quando a técnica de raios X, que nos permite determinar o arranjo tridimensional dos átomos em uma molécula, é aplicada a sistemas contendo hidrogênio, não é possível determinarmos a posição dos átomos de hidrogênio. Desta forma, a descrição geométrica da ligação de hidrogênio é determinada através da distância de separação D-A (r_{DA} na Figura 8a). É comum

Quando compostos apolares interagem, o contato de uma molécula com a outra faz com que apareça uma força atrativa muito fraca que pode ser vista como uma interação dipolo induzido-dipolo induzido

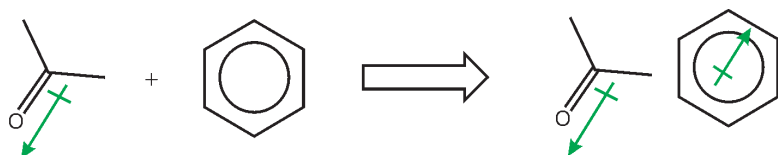


Figura 7: Interação de uma molécula polar com uma molécula apolar.

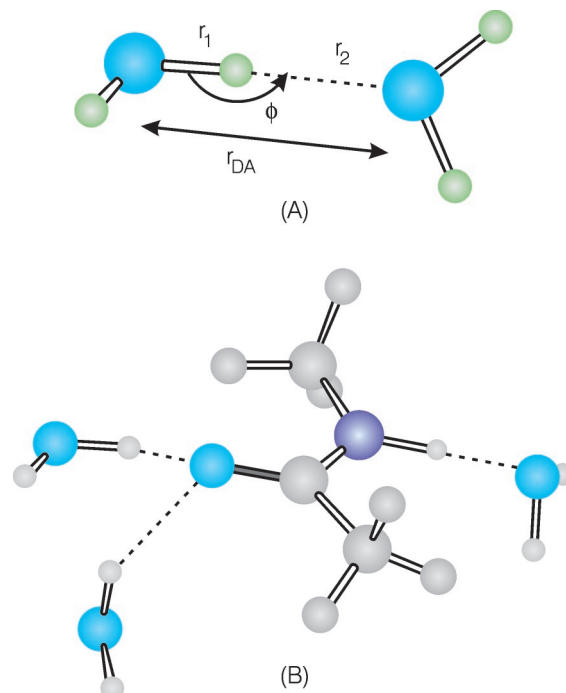


Figura 8: Arranjo geométrico das ligações de hidrogênio. (A) interação entre duas moléculas de água. (B) interação entre uma molécula modelo de ligação peptídica (*trans*-N-Metilacetamida) com três moléculas de água, mostrando que o átomo de oxigênio pode estar envolvido em mais de uma ligação.

atribuir a existência de uma ligação de hidrogênio em uma molécula se a distância entre os átomos D e A for menor que a soma dos seus raios de van der Waals. Usualmente, em sistemas envolvidos em ligação de hidrogênio, a distância D-H, se encontra na faixa de 1,8 a 2,0 Å e a distância D-A na faixa de 3 a 3,5 Å.

A força das ligações de hidrogênio está relacionada com a natureza dos átomos doadores (D) e aceptores (A) de prótons envolvidos na interação. Ligações de hidrogênio fortes, com a energia de interação variando entre 20 a 40 kcal.mol⁻¹, são geralmente formadas quando os átomos D e A estão carregados, sendo tão fortes quanto uma ligação covalente. Ligações de hidrogênio moderadas (energia variando entre 5 a 15 kcal.mol⁻¹) são as mais comuns, e são formadas entre doadores e aceitadores neutros. Ligações de hidrogênio fracas (de 1 a 5 kcal.mol⁻¹) são usualmente formadas quando a diferença de eletronegatividade entre o átomo doador e o hidrogênio é pequena. As propriedades da água, álcoois, ácidos orgânicos, aminas e as macromoléculas biológicas (proteínas, DNA e RNA) estão intimamente relacionadas com a formação de ligações de hidrogênio.

Tendências observadas nas interações intermoleculares

Enquanto as forças intramoleculares mantêm os átomos em uma molécula, e constituem a base para a racionalização das propriedades químicas, as forças intermoleculares são responsáveis por todas as propriedades físicas da matéria. Como foi mostrado, as forças intermoleculares aumentam em força da seguinte forma:

dispersão < dipolo-dipolo < ligações de hidrogênio

À medida que a magnitude das forças intermoleculares aumenta, fica mais difícil de afastarmos uma molécula da outra. Portanto, podemos esperar que o ponto de fusão, por exemplo, seja maior para aquelas substân-

cias que possuam interações intermoleculares mais fortes. Nós sabemos que é necessário fornecermos energia para transformarmos um sólido em um

líquido e um líquido em um gás. Estas energias estão diretamente relacionadas com a força de atração entre as moléculas nas fases condensadas (líquida e sólida). Uma vez que a energia é direta-

mente proporcional à temperatura, cada um destes processos irá variar com a magnitude das forças intermoleculares. Isto é, à medida que a magnitude das interações intermoleculares aumenta, as energias necessárias para fundir, vaporizar ou sublimar uma substância aumentam.

Conclusões e leituras adicionais

Neste artigo foi mostrado como o entendimento microscópico das interações intermoleculares pode auxiliar na compreensão das propriedades termodinâmicas macroscópicas de sistemas químicos. O área da físico-química que se dedica ao estudo das relações entre propriedades microscópicas e propriedades termodinâmicas observáveis (macroscópicas) é chamada de Termodinâmica Estatística. A termodinâmica estatística se constitui em uma intensa área de pesquisa em física e química; a abordagem dos princípios da termodinâmica estatística foge dos objetivos deste capítulo. O leitor interessado pode consultar Hill, 1986, Allen e Tildesley, 1987 e Warshell, 1991. A utilização dos fundamentos da termodinâmica estatística em conjunto com técnicas computacionais, abriu uma grande área de pesquisa conhecida como 'simulação computacional de sistemas químicos'. Na simulação computacional a premissa básica é que se nós conhecemos a descrição analítica (função matemática) do potencial de interação intermolecular, como aqueles mostrados nas equações anteriores, pode-se então fazer a evolução temporal (ou mapeamento configuracional) até que o sistema atinja o equilíbrio; então podemos utilizar os conceitos da mecânica estatística para obtermos as proprie-

dades termodinâmicas macroscópicas do sistema em equilíbrio. As duas grandes técnicas de simulação utilizadas hoje são a dinâmica molecular e o método de Monte Carlo. O leitor interessado em um maior detalhamento sobre estas técnicas de simulação deve consultar Allen e Tildesley, 1987, Warshell, 1991, Freitas e Botelho, 1994, Coutinho e Canuto, 1997 e Barlette e Freitas, 1999. As técnicas de simulação também podem ser utilizadas em conjunto com métodos fundamentados na mecânica quântica, para avaliarmos a influência das interações intermoleculares em propriedades espectroscópicas, propriedades elétricas e propriedades estruturais de sistemas químicos em fases condensadas. Tais metodologias podem ser vistas em Barlette e Freitas, 1999, Rocha *et al.*, 2000 e Rocha *et al.*, 2001.

Willian R. Rocha (wrocha@quimica.ufjf.br), doutor em química, é professor do departamento de química da Universidade Federal de Juiz de Fora.

Referências bibliográficas

- ALLEN, M.P. and TILDESLEY, D.J. *Computer simulation of liquids*. Londres: Oxford University Press, 1987.
- BARLETTE, V.E. e FREITAS, L.C.G. Termodinâmica estatística de líquidos com o método de Monte Carlo. I. Metodologia. *Química Nova*, v. 22, n. 2, p. 254, 1999.
- COUTINHO, K. and CANUTO, S. Solvent effects from a sequential Monte Carlo-quantum mechanical approach. *Advances in Quantum Chem.*, v. 28, p. 89, 1997.
- FREITAS, L.C.G. e BOTELHO, L.F. Cálculo de propriedades termodinâmicas de líquidos via simulação computacional. *Química Nova*, v. 17, n. 6, p. 489, 1994.
- HILL, T.E. *An introduction to statistical thermodynamics*. Nova Iorque: Dover, 1986.
- ROCHA, W.R. ALMEIDA, K.J. and ALMEIDA, W.B. *Chem. Phys. Lett.*, n. 316, p. 510, 2000.
- ROCHA, W.R.; COUTINHO, K.; ALMEIDA W.B. and CANUTO, S. *Chem. Phys. Lett.*, n. 335, p. 127, 2001.
- WARSHHELL, A. *Computer modeling of chemical reactions in enzymes and in solution*. Nova Iorque: Wiley, 1991.