

INTRODUÇÃO À QUÍMICA QUÂNTICA COMPUTACIONAL

POR LUÍS ALCÁCER



IST Press, Lisboa, 2007, 306 pág., € 25,00 ISBN 972-8469-55-1

O papel da Química Computacional na Química moderna e em muitas outras ciências que nela se apoiam (Materiais, Bioquímica, Biologia Molecular) tem crescido consideravelmente nos últimos anos, acompanhando o desenvolvimento dos meios de cálculo e das metodologias. Nesta perspectiva, é sem dúvida do maior interesse a publicação dum texto deste tipo em língua portuguesa, independentemente da necessidade de todos os estudiosos utilizarem a língua inglesa. Embora seja praticante da arte e muitos dos assuntos discutidos façam parte do meu quotidiano, nunca tive oportunidade de ensinar disciplinas em que se abordasse a Química Quântica ou Computacional, para além dumas brevíssimas introduções em disciplinas de iniciação ao estudo

da ligação química. Como todos sabem, entre estas duas perspectivas vai uma grande distância no modo de olhar para um livro de texto.

A qualidade gráfica, importante factor na conquista de leitores, está ao nível dos livros que conheço da colecção, com uma capa atraente e uma “mancha” agradável, num discreto e clássico preto e branco. A escolha de assuntos engloba os princípios básicos da Mecânica Quântica que ocupam as duas primeiras secções, dedicadas às ideias fundamentais e ao formalismo, sendo a terceira secção totalmente dedicada à Mecânica Quântica na Química. São abordados brevemente o oscilador harmónico e vibrações moleculares, seguindo-se o tratamento do átomo de hidrogénio, e passando

depois ao estudo dos métodos aproximados de resolução da equação de Schrödinger para espécies polieletrónicas. O capítulo designado por Teoria das Orbitais inclui os métodos mais utilizados actualmente na Química Computacional, permitindo uma passagem relativamente rápida da teoria para as aplicações. Ao longo do livro existem uns pequenos capítulos com o título de “Complementos do Capítulo #”, onde são tratados temas específicos (a título de exemplo, o efeito fotoeléctrico, as espectroscopias de ressonância magnética electrónica e nuclear para o átomo de hidrogénio, cálculo de Hartree-Fock para a molécula de H_2O) e propostos problemas para resolver.

Existe uma lista de bibliografia que inclui alguns clássicos, textos avançados sobre a Mecânica Quântica e a Química Computacional, assim como alguns textos básicos. Alguns não seriam a minha primeira escolha, mas incluem os textos modernos mais populares na área. Como complemento são sugeridos sítios da *web*. Não consultei todos, mas os que vi proporcionam uma extensão e complemento dos temas tratados neste livro e estão associados a instituições de qualidade.

Pelos vários aspectos referidos, assim como pela facilidade de leitura que permite, não duvidaria em utilizar este texto como apoio a uma disciplina, nesta área, dum curso de Química e espero que muitos colegas o façam. Traduz a experiência muito grande do seu autor no ensino da Química Quântica e constitui um valioso contributo para a lista de textos científicos em língua portuguesa.

Maria José Calhorda

Professora Catedrática
Departamento de Química e Bioquímica
Faculdade de Ciências, Universidade
de Lisboa
mjc@fc.ul.pt