ESPECTROSCOPIA TEÓRICA NA REGIÃO DO INFRAVERMELHO: UMA ABORDAGEM DIDÁTICA

THEORETICAL SPECTROSCOPY IN THE INFRARED REGION: A DIDACTIC APPROACH

RODRIGUES, Caio Henrique Pinke^{1*}; ASSIS, Victor Oliveira¹; BRUNI, Aline Thaís¹;

¹ Universidade de São Paulo, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Departamento de Química, Av Bandeirantes, 3900, cep 14040-901, Ribeirão Preto – SP, Brasil

* Autor correspondente
e-mail: caio.pinke.rodrigues@usp.br

Received 17 October 2018; received in revised form 31 October 2018; accepted 5 November 2018

RESUMO

A química é tradicionalmente uma ciência experimental e metodologias de ensino são fundamentais para o entendimento dessa ciência. Entretanto, existe um certo distanciamento dos discentes quanto ao conteúdo teórico quando práticas experimentais são ministradas. Essa abordagem poderia ter inserção tanto em conteúdos ministrados na forma presencial, quanto por meio da modalidade Educação à Distância, enriquecendo as reflexões sobre o ensino de Química. O principal objetivo desse trabalho foi a aplicação de química teórica no estudo de espectroscopia. As técnicas espectroscópicas fazem uso da interação da matéria com a radiação eletromagnética. As vibrações são específicas para cada grupo funcional que compõe uma determinada molécula. Elas são geralmente descritas em salas de aula associando os átomos a esferas e as ligações a molas. No caso desse trabalho foi utilizado o formalismo mecânica quântica com Teoria do Funcional de Densidade para explicar como os espectros podem ser gerados por meio de cálculos teóricos. Os resultados apresentaram uma boa concordância com o que é observado experimentalmente. O procedimento pode alcançar estudantes tanto no ensino presencial quando à distância, oferecendo uma maneira de entendimento de uma técnica experimental por meio de uma abordagem teórica.

Palavras-chave: *Ensino; Química; Química teórica;*

ABSTRACT

Chemistry is traditionally an experimental science and teaching methodologies are fundamental to understand this science. However, the students may be distant from the theoretical content when experimental practices are taught. This approach could be inserted both in content taught in the classroom and through the Distance Education modality, enriching the reflections on teaching of Chemistry. The main objective of this work was the application of theoretical chemistry in the study of spectroscopy. Spectroscopic techniques make use of the interaction of matter with electromagnetic radiation. Vibrations are specific to each functional group that composes a particular molecule. They are usually described in classrooms by associating atoms with spheres and connections with springs. In this work we used quantum mechanical formalism with Density Functional Theory to explain how spectra can be generated by means of theoretical calculations. The results showed a good agreement experimental data. The procedure can reach students both in face-to-face and distance learning, offering a way of understanding an experimental technique through a theoretical approach.

Keywords: *Teaching; Chemistry; Theoretical chemistry;*

INTRODUÇÃO

Dentro das grandes áreas do conhecimento, a Química está atualmente inserida nas Ciências da Natureza e suas Tecnologias. Apesar de tradicionalmente ser uma das disciplinas que contemplam as Ciências Exatas, apresenta alto grau de abstração e, muitas vezes, é de difícil compreensão para uma parcela significativa dos estudantes dos mais diversos níveis de escolaridade. Dessa forma, a experimentação é de importância fundamental no ensino de qualquer uma das áreas da Química, pois possibilita ao discente um maior contato e conseqüentemente uma maior relação entre os conteúdos teóricos e práticos. A experimentação ainda pode tornar as aulas mais dinâmicas e despertar o interesse dos alunos pelo conteúdo ministrado (Pinheiro et al., 2015).

A química é essencialmente baseada em modelos da estrutura atômica. Nesse contexto, experimentos computacionais podem ser muito interessantes para prever o comportamento molecular e propriedades associadas (Bruni and Ferreira, 2008; Bruni et al., 2018; Corrêa et al., 2010; Cramer and Truhlar, 2013; Galembeck and Caramori, 2003; Guido et al., 2010; Rodrigues, 2018; Scotti et al., 2007; SILVA et al., 2016).

De acordo com a União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC), “a química computacional é uma disciplina que faz uso de métodos matemáticos para calcular propriedades moleculares ou para simular o comportamento molecular” (Bezerra et al., 2012) e, segundo Silva et al (Silva et al., 2016), “a química computacional é a prova que o tubo de ensaio e o computador são igualmente importantes para o desenvolvimento de química atualmente”.

Dessa forma, o emprego da experimentação computacional pode ser feito por meio de *Softwares* Educacionais (SE) ou como Tecnologias da Informação e Comunicação (TICs). Esses podem ser entendidos como recursos de origem digital que auxiliam no processo de aprendizado e que, segundo Santos e Amaral (Batista et al., 2016) podem auxiliar “potencializando e contribuindo de forma significativa nas melhorias da aprendizagem dos alunos”.

A utilização de recursos computacionais pode ser vista como uma alternativa e uma ferramenta para explorarmos os conteúdos

didático-pedagógicos ministrados em um curso de Química; essa estratégia permite “colocar os alunos em uma posição ativa de descobridores e construtores de seu próprio conhecimento” (Pinheiro et al., 2015). *Softwares* de simulação têm surgido como uma nova opção no ensino da química e podem ser hábeis em substituir as representações pictóricas, esquemáticas e os modelos estáticos anteriormente utilizados por ferramentas que proporcionam visualização de representações de modelos dinâmicos (Melo and Melo, 2005). Ainda, podem proporcionar condições aos alunos para o desenvolvimento da compreensão conceitual dos estudos sem que haja apenas o uso mecânico dos conceitos que envolvem os fenômenos estudados. Sob essa ótica, podemos entender que a utilização das simulações computacionais pode ser uma das possíveis formas de aprimoramento da compreensão dos discentes sobre diferentes fenômenos químicos (Silva et al., 2016).

A principal motivação deste trabalho foi a observação do distanciamento dos alunos em relação às partes teórica e prática referentes à espectroscopia. A ideia é contribuir para aumentar as interações dos alunos com os conteúdos ministrados presencialmente ou por meio da modalidade EAD (Educação a Distância), no intuito de fornecer possibilidades de ampliação das reflexões do uso das tecnologias no ensino de Química.

Portanto, este trabalho tem como objetivo propor um instrumento didático, utilizando SE para contribuir para a formação dos discentes dos cursos de química, trazendo à luz formas teóricas de previsão de espectros de infravermelho.

MATERIAL E MÉTODOS

A metodologia proposta para esse estudo foi dividida em quatro etapas: Escolha dos *softwares* e sistema de estudo; Considerações prévias; Cálculo teórico dos espectros; e Elaboração do espectro.

1. Escolha dos *softwares* e sistema de estudo

Para facilitar a reprodução dos ensaios propostos e/ou direcionar os experimentos para conjunto de moléculas de interesse a metodologia foi desenvolvida com base em *softwares* já conhecidos no meio acadêmico.

Para a montagem do arquivo com a linha de comando do cálculo (input), foi utilizado o Avogadro em sua versão 1.1.1 devido à interface simplificada e à livre disponibilização (Hanwell et al., 2012) (disponível em <https://avogadro.cc/>). Utilizamos o programa ORCA, na versão 4.0.1 (disponível em <https://ORCAforum.cec.mpg.de/>) para efetuar os cálculos relativos aos espectros. Por último, se fez uso do EXCEL®, fornecido e desenvolvido pela Microsoft Corporation, para análise dos dados gerados no cálculo e plotagem dos espectros de infravermelho. As estruturas do sistema de estudo seguem abaixo (Figura 1)

Figura 1. Sistema de estudo

Há uma infinidade de compostos que poderiam ser utilizados para ilustrar a potencialidade dessa abordagem. Entretanto, foram selecionadas moléculas que possuíam características como aromaticidade, ciclicidade, ligações conjugadas, cadeias lineares, além de serem compostos relativamente pequenos, minimizando o custo computacional e demonstrando a validade da técnica independente da complexidade do sistema de análise.

Deve-se levar em consideração, ainda, que os ambientes do computador e do laboratório são diferentes. Nesse caso, optou-se por não levar em consideração a interação com solvente, pois aumentaria o custo computacional. No entanto, o docente que pretende aplicar essas ferramentas pode optar por um estudo mais aprofundado caso haja tempo e interesse nesses aspectos.

2. Considerações prévias

▪ Otimização de geometria

A otimização de geometria para a grande maioria dos cálculos teóricos é, normalmente, o primeiro passo para a determinação do arranjo

espatial dos átomos. Esse passo tem por objetivo encontrar o arranjo atômico relativo à conformação de menor energia para o composto em estudo. Dependendo da flexibilidade da molécula é necessário investigar uma superfície de energia potencial (do inglês *Potential Energy Surface*, PES), a qual relaciona matematicamente diferentes geometrias moleculares e suas energias (Gotwals, 2000). Os valores encontrados de energia geralmente são dispostos em um gráfico bidimensional ou tridimensional para que sejam observados os pontos de mínimos e máximos globais e locais.

▪ Escolha do método e conjunto das bases de cálculo

Como mencionado anteriormente, neste trabalho foi utilizado DFT para a resolução da equação de Schrödinger (Equação 1).

$$H\psi = E\psi \quad (1)$$

Dentre as várias possibilidades de métodos disponíveis para uso no ORCA, o funcional B3LYP foi escolhido, pois este método requer um custo computacional relativamente baixo e resultados próximos aos encontrados na literatura. O acrônimo B3LYP (Becke, 1993; Stewart, 2007) combina o funcional de Becke, proposto em 1988, com a correlação funcional de Lee, Yang e Parr enquanto o número 3 indica três parâmetros semiempíricos a serem determinados por um ajuste adequado com os dados experimentais, sendo eles: aproximação da densidade do spin local (do inglês *Local Spin Density Approximation*, LSDA), correção do gradiente de Becke de 1988 (Salahub and Zerner, 1989) (B88) e a correção de gradiente para a correlação de Perdew e Wang de 1991 (PW91) (Ortolan, 2014).

Em seguida é necessário escolher um conjunto de bases para fornecer os orbitais atômicos ideais para o cálculo em questão. Neste trabalho foi escolhido o conjunto de base 6-31G** (Pople, 1967), a qual se trata de uma base de dupla valência de Pople; o núcleo é um CGTO composto de 6 gaussianas e a valência é descrita por dois orbitais, um CGTO de 3 gaussianas e outro composto de apenas uma. Além do mais, essa base conta também com polarização nos orbitais *d* e *p*.

3. Cálculo teórico dos espectros

- Criação do arquivo de entrada (*input*)

O *software* Avogadro foi escolhido para que as estruturas do sistema de estudo fossem desenhadas. O *input* para o cálculo no *software* ORCA requer uma linha de comando que deve ser fornecida pelo executor. Este *input* é geralmente gerado por outro programa e não pelo próprio ORCA. Nesse trabalho também utilizamos o Avogadro para a criação desse arquivo de entrada. Esse *input* é composto por duas partes principais: (i) as linhas de comando, que dirão ao *software* o que ele deverá fazer e (ii) as coordenadas dos átomos que compõem a molécula estudada.

A base utilizada foi 6-31G** e aproximações nas integrais foram feitas com o intuito de acelerar a convergência dos cálculos. Para isso foram empregadas as palavras chave *RIJCOSX* e *DIIS*. No entanto, é necessário que a molécula esteja otimizada e encontre-se no mínimo de energia global para que seja feito o cálculo. Dessa forma, a descrição feita por Foresman e Frisch (Foresman and Frisch, 1996) foi seguida, onde o método matemático geral aplicado é através da primeira derivada da energia, que deve ser zero, caso a estrutura esteja em um mínimo. Esse ponto na superfície de energia potencial, onde as forças são zero é chamado de ponto estacionário. No caso específico dos espectros, foi empregada a palavra-chave *FREQ* para determinar a frequência das vibrações dos átomos ou conjunto de átomos.

Além dessas especificações na linha de comando do *input*, também foi solicitado ao ORCA uma otimização de energia por meio do termo *TightOpt*. Essa palavra chave é utilizada para refinar a otimização e os cálculos de frequências vibracionais harmônicas. A ideia é alcançar o ponto estacionário correspondente e, a partir dele, obter o espectro de infravermelho.

- Cálculos no ORCA

Embora seja disponibilizado de forma gratuita e periodicamente atualizado por grupos de pesquisadores, o *software* ORCA não possui uma interface, sendo necessário iniciá-lo por meio do *prompt* de Comando. No menu “Iniciar”, basta pesquisar por CMD que aparecerá a opção

para abrir o *prompt*. Para levar o computador até o programa, é necessário utilizar o comando “*cd*” (do inglês *change directory*) e indicar qual diretório ele deverá entrar (Figura 2).

Figura 2. *Prompt* de comando do Windows® mostrando como iniciar o ORCA.

Para reduzir as mudanças de diretório necessárias até o computador encontrar a pasta do ORCA, sugere-se deixá-la na área de trabalho; quanto aos *inputs*, esses deverão estar dentro da pasta do *software* em questão. Em seguida, basta acessar os diretórios do computador até que esteja dentro da pasta onde o ORCA está instalado (para maiores informações acesse o manual do ORCA em sua versão 4.0 no site <https://orcaforum.cec.mpg.de/OrcaManual.pdf>).

4. Elaboração do espectro

Caso o cálculo termine sem problemas, o resultado será o arquivo de saída ([NOME PARA O OUTPUT].out) contendo todas as informações solicitadas na linha de comando do arquivo *input*, dentre elas frequências. Para encontrá-las no arquivo de saída, deve-se procurar pelo campo denominado “*VIBRATIONAL FREQUENCIES*”.

Nesse ponto vale a ressalva da possibilidade de haver alguma frequência negativa (denominada pelo ORCA como ****imaginary mode****). Isso indica que o sistema não está no ponto mínimo de energia e, portanto, não se encontra no estado estacionário. Esse fato é especialmente importante, pois as frequências negativas indicam que uma determinada região da molécula não está em uma configuração de mínimo e, por isso, oscila. É possível visualizar qual parte da molécula pertence tal frequência negativa. Embora facilmente encontrado no manual do *software* utilizado, não será abordado nesse artigo. Com

todos os pontos até aqui certificados, o próximo item do arquivo de saída é chamado "IR SPECTRUM". Deve-se copiar para o EXCEL® as colunas "freq (cm⁻¹)", que dizem respeito ao número de onda responsável pela vibração bem como a coluna "T²", que se refere à intensidade dessa vibração.

Os cálculos teóricos tendem a gerar resultados que são energeticamente superiores aos experimentais devido a uma otimização da geometria imperfeita quando comparada aos sistemas reais. Esse valor contabiliza os efeitos de uma estrutura que não atingiu o mínimo global real e acrescenta os efeitos de anarmonicidade que não foram considerados. Dessa forma, esses dados precisam ser corrigidos (Biczysko et al., 2018; Bruni et al., 2018; Cornaton et al., 2016).

Devido à popularidade do DFT aqui utilizado (Shao et al., 2015), é possível aplicar uma correção linear dos valores obtidos a partir de uma escala pré-calculada pelo Instituto Nacional de Padrões e Tecnologia (do inglês, *National Institute of Standards and Technology*, NIST) (NIST, 2018) para aproximar o resultado calculado da correção tabelado.

Na planilha com os dados foi aplicada a correção fornecida pelo NIST, multiplicando os valores da coluna contendo os números de onda por um fator que depende do método; no nosso caso, esse valor é 0,961 (NIST Standard Reference Database 101, 2016). Quando as vibrações obtidas pelo ORCA são projetadas, obtém-se linhas bem definidas. No entanto, em um espectro real, temos uma distribuição das intensidades pelas frequências. Para contornar esse fato, foi utilizado uma distribuição normal ou gaussiana, como mostrado abaixo na Equação 2 (Caire, 2013), para que os números de onda possam ser contínuos e o espectro possa ser construído de forma ininterrupta.

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (2)$$

No *software* EXCEL®, a função matemática que realiza essa distribuição é a apresentada na Equação 3,

$$\{=SOMA(Bx:By*EXP(-((Fx-Cx:Cy)^2)/2/Ex))\} \quad (3)$$

onde Bx:By é o intervalo com todas as intensidades (T² no output gerado pelo

ORCA), Cx:Cy é o intervalo correspondente as frequências já corrigidas (μ), Fx é o novo conjunto de frequências (x) e Ex é a dimensão da gaussiana (σ) utilizada. Neste caso foi empregada uma variação de 4 em 4 cm⁻¹ de 550 cm⁻¹ até 3846 cm⁻¹, pois os valores abaixo de 550 cm⁻¹ são característicos do chamado *fingerprint* das moléculas, muito específicos e que requerem estudos mais detalhados (Aboul-Enein et al. 2005; Hillenbrand et al. 2012; Piatkowski et al. 2018). Os valores acima de 3846 cm⁻¹ não foram observados nos resultados obtidos e, portanto, não foi necessário expandir o gráfico para além desse valor. A especificação de utilizar frequências de 4 em 4 cm⁻¹ foi escolhida para oferecer uma melhor dispersão dos valores. Vale ressaltar que tanto os limites do gráfico quanto a dispersão podem ser ajustados para cada sistema a ser estudado.

A distribuição gaussiana é um artifício estatístico para mostrar como os valores de uma matriz estão distribuídos em um eixo. Dessa forma, é necessário especificar quais são esses valores. Para este caso, indicamos que sejam feitas duas colunas uma com os valores do IR Inten (este obtido diretamente do *output*) e outra com o *Scaled* (valores das vibrações corrigidos). Ambas devem ser identificadas como matrizes. Para isso, no caso do *software* utilizado, basta apertar o conjunto de botões "Alt + Ctrl + Enter" na célula onde a função será empregada. Assim, a equação 3 será interpretada pelo programa como uma matriz e para simbolizar isso, as chaves serão introduzidas no começo e no final da fórmula.

Para a criar o espectro propriamente dito, inicialmente deve-se selecionar as colunas com as novas frequências (Freq) e a coluna com a distribuição gaussiana dos valores. O próximo passo foi ir em "Inserir > Gráficos > Dispersão > Dispersão com Linhas Suaves". O gráfico, após formatação de acordo com a preferência requerida, será semelhante ao apresentado na Figura 3. Tem-se nesse caso aspecto semelhante ao dos espectros obtidos experimentalmente, exceto pela orientação dos eixos. No caso dos espectros experimentais, os eixos são invertidos. Entretanto, a análise pode ser feita da mesma maneira.

Figura 3. Gráfico gerado no EXCEL para o espectro teórico calculado

Os espectros gerados teoricamente foram comparados com os experimentais que foram retirados do banco de dados do NIST (NIST Standard Reference Database 101, 2016).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A proposta deste estudo é voltada principalmente para a educação e desmistificação dessa técnica, que pode ser pouco intuitiva se for seguido apenas o modelo clássico de equações matemáticas.

A Tabela 1 abriga os espectros obtidos pelo método proposto e os obtidos experimentalmente em bancos de dados na literatura específica.

A partir da justaposição dos espectros teóricos e seus respectivos análogos experimentais, foi possível notar a semelhança no perfil da curva dos picos. No etanol, por exemplo, foi possível notar picos de alta intensidade na região de 1000 cm^{-1} , 1400 cm^{-1} e 3000 cm^{-1} em ambos os casos. Em todos os outros foi observada a mesma tendência de relação, o que valida o método computacional como uma ferramenta na predição dos espectros experimentais. Não são observadas as grandes bandas na região de 3000 cm^{-1} até 3600 cm^{-1} provenientes da interação com o solvente ou das ligações de hidrogênio das hidroxilas.

As frequências vibracionais calculadas nos experimentos também podem ser visualizadas no Avogadro, de forma a elucidar as distorções que a molécula sofre sob determinada frequência. Para essa visualização, é necessário abrir o arquivo de output no *software* selecionar uma intensidade e depois o “*Start Animation*”. Como resultado, houve a animação que ilustra a vibração.

Essa funcionalidade permite com que os

alunos consigam observar o que é um estiramento simétrico (Figura 4 – A e B), antissimétrico, “tesoura”, quando é no mesmo plano ou fora do plano, dentre outras observações que podem ser guiadas pelo professor.

Figura 4. Estiramento simétrico observado na região de 3000 cm^{-1} da molécula de etanol

Na Figura 3 foi utilizada uma amplitude do movimento para mostrar de forma clara a vibração que é observada na animação por meio da funcionalidade de visualização do *software*.

O método proposto pode seguir duas vertentes de análise e finalidades. A primeira pode ser utilizada na fronteira das pesquisas científicas, como no caso da convecção de espectros de moléculas ainda desconhecidas, como por exemplo as novas drogas sintéticas (Feng et al., 2017; Rodrigues et al., 2013; Skultety et al., 2017), auxiliando na identificação precoce dessas substâncias. A segunda pode ser destinada a aproximar os conteúdos teóricos dos experimentais dos discentes de diferentes semestres dos cursos de química, farmácia, engenharias e outros correlatos, mostrando de forma mais ativa qual grupo funcional originou aquela frequência, qual a forma do estiramento proporcionado por ela e diversas outras discussões que podem advir dos resultados. Esse procedimento ajuda a aproximar os conteúdos abordados em livros da área e também pode auxiliar os alunos a entender melhor porque uma determinada frequência está associada a um estiramento. Essa abordagem vai além da simples abstração de qual seria essa forma e onde ela estaria no espectro (Bezerra et al., 2012).

Como a abordagem e profundidade do conteúdo depende de quem ministra a aula, pode ser utilizado o mesmo conceito para diferentes profundidades de estudo. Outro ponto que merece destaque é a possibilidade dos discentes da modalidade EAD terem o contato com a técnica, mesmo à distância. Ainda vale

ressaltar que todos os *softwares* utilizados nos cálculos deste artigo são gratuitos, exceto o Excel® que acompanha todos os computadores com sistema operacional Windows®, colaborando com a acessibilidade do emprego do método proposto a praticamente qualquer realidade, desde que haja um computador hábil a execução dos programas.

CONCLUSÕES

A necessidade dos discentes em compreender como que todas as segmentações de um curso se comunicam é de extrema importância. A formação de um profissional multidisciplinar, ou seja, aquele que consegue integrar as diversas disciplinas com facilidade e destreza é uma das características mais requeridas no mercado. Para alcançar essas particularidades da formação, podemos empregar métodos teóricos como uma ferramenta de aprofundamento do conhecimento.

O uso de novas tecnologias é de extrema importância e muito pertinente na sociedade atual, sendo que as possíveis aplicações podem ter reflexos muito benéficos na área educacional. Diversos recursos estão cada vez mais sendo inseridos e utilizados no exercício do ensino-aprendizagem como um instrumento que pode subsidiar e auxiliar o referido processo.

Sob a ótica da química, a visualização experimental da interação da matéria com radiação é raramente trabalhada de forma direta. Devido a esse fato, pode haver uma certa dificuldade aos estudantes de compreender como ocorre o processo de obtenção dos valores de um espectro de infravermelho. É nesse contexto que essa proposta de método a ser aplicado em aula tornou-se pertinente.

Somando a esses fatos, o aprendizado é mais efetivo quando utilizamos uma abordagem baseada em informações sensoriais, tornando-a um mecanismo de aprendizado interessante. Dessa forma, a proposta de material didático utilizando métodos teóricos pode facilitar o entendimento dos movimentos atômicos e moleculares ligados ao espectro no infravermelho.

A busca por meios para a facilitação e a compreensão de conceitos de Química por parte dos alunos tem sido um dos principais objetivos dos pesquisadores em Ensino durante as últimas

décadas. A utilização de recursos provenientes de ferramentas decorrentes de tecnologias como os SE estão cada vez mais inseridos na área de ensino. Esse movimento tem o desígnio de melhorar a qualidade do aprendizado e do ensino, para que haja um maior aproveitamento tanto por parte dos discente, mas também oferecer mais ferramentas pedagógicas para o docente.

A proposta desse estudo mostrou resultados teóricos obtidos por meio de softwares podem ter boa correlação com os de origem experimental.

Em linhas gerais, este estudo tem potencial para ser empregado como instrumento didático, tanto na educação presencial, quanto no sistema de EAD. Além disso, também poder auxiliar no entendimento teórico da espectroscopia, mais especificamente da espectroscopia no infravermelho.

REFERÊNCIAS

1. Aboul-Enein, H. Y., Zou, H., Yang, G., Qin, Z., Jiang, W., Du, A. Profress in Quality Control of Herbal Medicine with IR Fingerprint Spectra. *Analytical Letters*, **2005**, 1457-1475.
2. Batista, G. da C., Lima, A.R., Crisóstomo, L.C. da S., Marinho, M.M., Marinho, E.S. Softwares para o ensino de química: CHEMSKETCH® um poderoso recurso didático. *Rev. Educ. Interdiscip.* **2016**, 5, 1–9.
3. Becke, A.D., Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *J. Chem. Phys.* **1993**, 98, 5648.
4. Bezerra, A.F., Lopes, K.C., Araújo, R.C.M.U. Utilização da química computacional como ferramenta de auxílio no aprendizado dos conteúdos do ensino médio. *XVI Encontro Nac. Ensino Química (XVI ENEQ) e X Encontro Educ. Química da Bahia (X EDUQUI)*, **2012**.
5. Biczysko, M., Bloino, J., Puzzarini, C. Computational challenges in Astrochemistry. *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci.* **2018**, 8, e1349.
6. Bruni, A.T., Ferreira, M.M.C. Theoretical study of omeprazole behavior: Racemization barrier and decomposition reaction. *Int. J. Quantum Chem.* **2008**, 108, 1097–1106.

7. Bruni, A.T., de Carvalho, P.O.M., Rodrigues, C.H.P., Leite, V.B.P. In silico methods in forensic science: Quantum chemistry and multivariate analysis applied to infrared spectra of new amphetamine- and cathinone-derived psychoactive substances. *Forensic Chem.* **2018**, 9, 21–34.
8. Caire, E. A história da origem da curva normal. UNESP, **2013**.
9. Cornaton, Y., Ringholm, M., Louant, O., Ruud, K. Analytic calculations of anharmonic infrared and Raman vibrational spectra. *Chem. Phys.* **2016**, 18, 4201–4215.
10. Corrêa, P.C., Oliveira, G.H.H., Botelho, F.M., Goneli, A.L.D., Carvalho, F.M. Modelagem matemática e determinação das propriedades termodinâmicas do café (*Coffea arabica* L.) durante o processo de secagem. *Rev. Ceres*, **2010** 57, 595–601.
11. Cramer, C., Truhlar, D.G. Theoretical chemistry accounts: new century issue. Springer Science & Business Media, **2013**.
12. Feng, L.-Y., Battulga, A., Han, E., Chung, H., Li, J.-H. New psychoactive substances of natural origin: A brief review. *J. Food Drug Anal.*, **2017** 25, 461–471.
13. Foresman, J.B., Frisch, Ae. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Second Edi. ed, Gaussian, Inc. Pittsburgh. PA. **1996**.
14. Galembeck, S.E., Caramori, G.F. Qual o sítio de reação? Um experimento computacional. *Quim. Nova*, **2003**, 26, 957–959.
15. Guido, R.V.C., Andricopulo, A.D., Oliva, G. Planejamento de fármacos, biotecnologia e química medicinal: aplicações em doenças infecciosas. *Estud. Avançados*, **2010**, 24, 81–98.
16. Hanwell, M.D., Curtis, D.E., Lonie, D.C., Vandermeersch, T., Zurek, E., Hutchison, G.R., 2012. Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *J. Cheminform.*, **2012**, 4, 1–17.
17. Hillenbrand, R., Huth, F., Govyadinov, A., Amarie, S., Nuansing, W., Keilmann, F. Nano-FTIR Absorption Spectroscopy of Molecular Fingerprints at 20nm Spatial Resolution. *NanoLetters*, **2012**, 3973–3978.
18. Melo, E.S. do N., Melo, J.R.F. de. Softwares de simulação no ensino de química: uma representação social na prática docente. *ETD - Educ. Temática Digit.*, **2005**, 7 6, 57–63.
19. NIST. CCCBDB listing of precalculated vibrational scaling factors. **2018**.
20. NIST Standard Reference Database 101, 2016. Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase, Release 18 [WWW Document]. Natl. Inst. Stand. Technol.
21. Ortolan, A.O. Apostila de práticas de química computacional, **2014**.
22. Piatkowski, T., Wilsenack, F., Lorenzen, A., Brygo, F., Awanzino, C., Gatty, F., Grisard, A., Larat, C., Papillon, D., Schwarz, M., Lallier, E., Tholl, H. D., Münzhuber, F., Kunz, J., Raab, M., Rattunde, M., Hugger, S., Kastek, M. First results of a QCL-OPA based standoff system, for detecting hazardous substances in the IR-fingerprint domain. *Proc. SPIE 10629, Chemical, Biological, Radiological, Nuclear, and Explosives (CBRNE)*, **2018**, 10629-1 – 10629-12.
23. Pinheiro, A.F., Araújo, M.D. de, Pessoa Júnior, E.S.F. Software de simulação: um recurso facilitador no processo de ensino e aprendizagem de química NO. *XII Congr. Nac. Educ.*, **2015**, 2042–2057.
24. Pople, J.A. Approximate Self-Consistent Molecular-Orbital Theory. V. Intermediate Neglect of Differential Overlap. *J. Chem. Phys.*, **1967**, 47, 2026.
25. Rodrigues, C.H.P. Dissertação de mestrado. Estudos in silico do comportamento de catinonas sintéticas com interesse forense. Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - Universidade de São Paulo, **2018**.
26. Rodrigues, N.V.S., Cardoso, E.M., Andrade, M.V.O., Donnici, C.L., Sena, M.M. Analysis of seized cocaine samples by using chemometric methods and FTIR spectroscopy. *J. Braz. Chem. Soc.*, **2013**, 24, 507–517.

27. Salahub, D.R., Zerner, M.C. The Challenge of d and f Electrons: Theory and Computation, Electrons ACS Symposium Series. *American Chemical Society*, **1989**, Toronto.
28. Scotti, L., Scotti, M.T., Cardoso, C., Pauletti, P., Castro-Gamboa, I., Bolzani, V. da S., Velasco, M.V.R., Menezes, C.M. de S., Ferreira, E.I. Modelagem molecular aplicada ao desenvolvimento de moléculas com atividade antioxidante visando ao uso cosmético. *Rev. Bras. Ciências Farm.*, **2007**, 43, 153–166.
29. Shao, Y., Gan, Z., Epifanovsky, E., Gilbert, A.T.B., Wormit, M., Kussmann, J., Lange, A.W., Behn, A. Advances in molecular quantum chemistry contained in the Q-Chem 4 program package. *Journal of Molecular Physics*, **2015**.
30. Silva, G.N. da, Filho, F.F.D., Andrade, R.B. de. Ensino de química e química computacional: teoria do estado de transição. *Rev. Tecnol. na Educ.*, **2016**, 17, 1–11.
31. Skultety, L., Frycak, P., Qiu, C., Smuts, J., Shear-Laupe, L., Lemr, K., Mao, J.X., Kroll, P., Schug, K.A., Szewczak, A., Vaught, C., Lurie, I., Havlicek, V. Resolution of isomeric new designer stimulants using gas chromatography – Vacuum ultraviolet spectroscopy and theoretical computations. *Anal. Chim. Acta.*, **2017**, 971, 55–67.
32. Stewart, J.J.P. Optimization of parameters for semiempirical methods V: modification of NDDO approximations and application to 70 elements. *J. Mol. Model.*, **2007**, 13, 1173–213.

Tabela 1. Comparação entre os espectros teóricos e experimentais

TEÓRICO	EXPERIMENTAL
<p>Antraceno</p>
<p>Benzeno</p>
<p>Cicloexano</p>
<p>Etano</p>
<p>Etanol</p>
<p>Fenol</p>