

UMA APLICAÇÃO DE MATRIZES EM GRAFOS QUÍMICOS.

Adriana C. Rosa¹ (PQ), Jonas S. Silva¹ (EG), Maraína S. Medeiros¹ (TA).

¹Instituto Federal de Goiás, *Campus Itumbiara*.

Área do Conhecimento: Ciências Exatas e da Terra.

Palavras-chave: Química; Álgebra Linear; Matrizes; Grafos Químicos; Fórmula Estrutural.

Introdução

A Álgebra Linear possui uma grande variedade de aplicações em muitas ciências. Na Química, por exemplo, não seria diferente¹. Durante muito tempo, estudiosos vem pesquisando novas técnicas para a aplicação da Álgebra que, por sua vez, vem mostrando resultados exatos para os pesquisadores que desenvolvem projetos, alcançando, assim, maior eficácia em seus experimentos práticos. A teoria dos grafos, em especial, tem extensa aplicabilidade quando se fala em modelagem matemática, pois permite interpretar e analisar várias situações reais na Química¹. Esse trabalho teve por objetivo encontrar alguma aplicação direta da Álgebra Linear na área da Química.

Material e Métodos

A aplicação da Álgebra Linear na Química a ser apresentada a seguir, refere-se ao uso de matrizes para a representação de fórmulas estruturais (grafos químicos) de substâncias químicas.

Resultados e Discussão

A fórmula estrutural (ou grafo químico) descreve a disposição dos átomos para formar uma determinada substância. Para formar uma substância idêntica à outra é necessário manter uma mesma proporção no número de átomos, e também é fundamental que os átomos (mesmo iguais) sejam arranjados numa forma específica no espaço.

No caso da água (H_2O) e do peróxido de hidrogênio (H_2O_2), ambas são formadas pelos mesmos elementos, embora sejam substâncias diferentes. Esta diferença é explicada simplesmente pelo fato do peróxido de hidrogênio (comercialmente conhecido como água oxigenada) apresentar um átomo a mais de oxigênio em sua estrutura².

Outro exemplo, de duas substâncias diferentes formadas pelo mesmo elemento é o diamante e o grafite, o que os diferenciam é apenas a disposição dos átomos do carbono.

Os grafos químicos de cada substância descreve a forma como os átomos se ligam entre si, seja em formato de cristal (sal, diamante, etc.), ligação dupla ($O = O$) ou, em ligação simples ($O - O$).

Os vértices são os átomos e os lados são ligações químicas. Portanto, é possível formar uma matriz da seguinte maneira: os átomos são numerados em uma ordem arbitrária. Se existe uma ligação entre dois átomos, assinalamos o número 1, caso contrário o número 0. Os números são reunidos em uma matriz quadrada, cada linha refere-se a um átomo e cada coluna também, seguindo a ordem numérica, como mostra as Figuras 1 e 2.

Figura 1 – Grafo químico I.

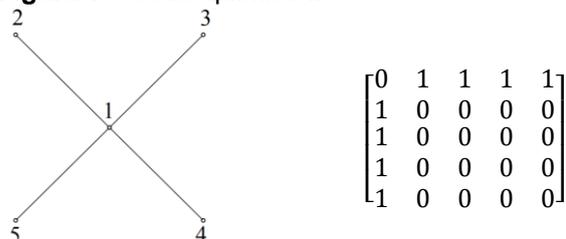
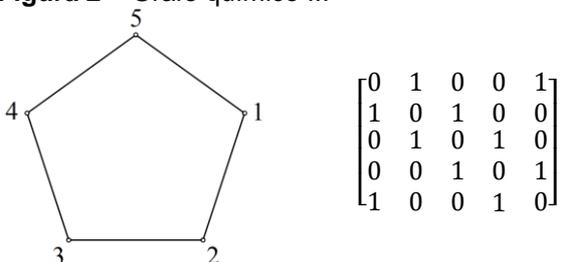


Figura 2 – Grafo químico II.



Conclusões

As formas como os átomos são arranjados de maneira específica no espaço nos permite formar uma matriz quadrada que representa determinada fórmula estrutural de uma substância qualquer. Portanto, uma das aplicações da Álgebra Linear é na conversão de grafos químicos em matrizes.

Agradecimentos

Ao IFG – *Campus Itumbiara*.

Referências Bibliográficas

- ¹BISOGNIN, G.; FRANCO, F. B.; BISOGNIN, V. Estudo de grafos e aplicações. **Disciplinarum Scientia**. Série: Ciências Exatas, v. 02, n. 01, p. 69-83, 2001.
²RUSSEL, John Blair. **Química geral**. 2ª ed., v. 01, São Paulo: Pearson Makron Books, 1994.