Um Banco de Dados de Entalpias de Vaporização e de Sublimação

Hermínio P. Diogo, Madalena Dionísio,
Adelino M. Galvão e
José A. Martinho Simões^a

1. Introdução

O grande volume de resultados experimentais em muitas áreas da Química tem catalisado a criação de *bancos de dados*. O «Cambridge Data File», dedicado à compilação de dados estruturais de moléculas, é talvez o exemplo mais conhecido, mas existem muitos outros conjuntos de valores experimentais arquivados em memória de computadores. Os benefícios de tais bancos de dados não se limitam ao acesso simples e rápido de toda a informação disponível. Talvez mais importante que isso, permitem realizar as chamadas *buscas selectivas*.

Para citar um caso de uma busca selectiva pode recorrer-se ao banco de dados descrito nesta nota, o qual consiste numa compilação de valores experimentais de entalpias de vaporização e de sublimação padrão de substâncias orgânicas. Por exemplo, é fácil agrupar numa folha de papel os valores referentes aos tióis lineares (Fig. 1) e estudar a variação da entalpia de vaporização padrão com o tamanho da cadeia (Fig. 2). As inúmeras possibilidades de correlações deste tipo que se podem obter sem gastos de tempo e esforço, proporcionam uma melhor compreensão da natureza da propriedade em estudo, em particular a sua relação com a estrutura molecular. Como resultado, podem aperfeiçoar-se métodos de estimativa.

Uma base de dados como a que se apresenta deve obedecer a alguns requisitos. Primeiro, deve ser crítica e exaustiva, isto é, deve conter todos os valores disponíveis que mereçam confiança; segundo, deve poder ser actualizada; terceiro, deve ser versátil, proporcionando vários tipos de buscas selectivas; quarto, não deve depender dos conhecimentos informáticos do utilizador, a nível de programação.

2. Base de Dados

O programa que gere a base de dados de entalpias de vaporização está preparado para funcionar num micro-computador DIGITAL (Rainbow), apenas equipado com disquetes de 400 K. Os ficheiros de dados anexos ao programa incluem cerca de 1300 compostos e 41 «termos» (símbolos que englobam as funções químicas e características estruturais), podendo ambos ser actualizados tanto no que diz respeito a novos compostos como a novos termos. A listagem da Fig. 1 foi obtida recorrendo a três termos: «n—» (indicando cadeia linear), «Vap» (pretendia-se excluir sólidos) e «SH» (função tiol).

Como se ilustra no exemplo, o programa encontra-se estruturado de forma a que o utilizador possa pesquisar um determinado composto (ou classe de compostos), através das funções químicas e/ou das características estruturais nele presentes. Nos ficheiros cada

molécula foi classificada tendo em conta os seus grupos funcionais e as suas características estruturais (e.g., número de átomos de carbono, estrutura da cadeia — linear, ramificada ou cíclica — e função química — ácido, tiol, etc.). A actualização do banco de dados, pode ser conseguida directamente através do programa e, se necessário, pela definição de funções químicas ou outras características estruturais inexistentes no ficheiro.

A visualização da informação armazenada, tanto de compostos como de termos, pode ser obtida directamente no ecrã ou por listagem em impressora.

O programa efectua uma série de testes aos valores introduzidos, por forma a evitar a armazenagem de dados incorrectos, permitindo a alteração destes em caso de erro. Contudo, a correcção do ficheiro, após introdução, só pode ser efectuada através do sistema operativo ou «software» equivalente.

Os sócios da S.P.Q. que desejarem possuir o banco de dados em causa, incluindo um pequeno manual de utilização, devem enviar uma disquete de 5" 1/4 para um dos autores.

n-C H SH 3 7	Vap=32.0 (0.1) kJ/mol
n-C H SH 4 9	Vap=36.6 (0.1) kJ/mol
n-C H SH 5 11	Vap=41.1 (0.1) kJ/mol
n-C H SH 6 13	Vap=45.8 (0.2) kJ/mol
n-C H SH 7 15	Vap=50.6 (0.2) kJ/mol
n-C H SH 10 21	Vap=64.5 (0.4) kJ/mol

Fig. 1

«Output» de uma busca selectiva da entalpia de vaporização dos tióis de cadeia linear

Fig. 2

Correlação entre as entalpias de vaporização da Fig. 1 e o número de átomos de carbono (N). Os valores experimentais para N=8 e 9 não constam no banco de dados, mas, como se vê, a sua estimativa pode ser feita com rigor

^a Centro de Química Estrutural, Complexo I, Instituto Superior Técnico, 1096 Lisboa Codex, Portugal.