



APLICAÇÃO DE SISTEMAS DE ÁLGEBRA COMPUTACIONAL NO ENSINO DE QUÍMICA QUÂNTICA



Magnólia Águida Langge e Prof. Dr. Pedro Antonio Muniz Vazquez
INSTITUTO DE QUÍMICA

Álgebra computacional - Ensino de Química Quântica – Programa Maxima
magnolia.langge@hotmail.com

UNICAMP

INTRODUÇÃO

Um dos obstáculos da aprendizagem de mecânica quântica em cursos de graduação em Química é o uso de matemática sofisticada para resolver os problemas propostos. Ao passo que se despende boa parte do tempo na resolução desses problemas, fica prejudicada a compreensão dos conceitos importantes associados com a disciplina. Sistemas de álgebra computacional, por exemplo, Mathematica e Maxima¹, podem ser usados para auxiliar nestas resoluções. O programa Mathematica foi utilizado pela Profa. Márcia Miguel, deste Instituto, para gerar a visualização das funções de onda e energias em modelos elementares². Neste trabalho, foi desenvolvido um tutorial utilizando o programa Maxima, que propõe vários exemplos estudados na disciplina de Química Quântica.

METODOLOGIA

Foram abordados três tópicos, a saber, **Operadores, Partícula na Caixa e Átomo de Hidrogênio**. O tutorial apresenta uma explanação dos conceitos básicos de cada tópico e fornece as explicações e os comandos a serem utilizados para executar a resolução dos problemas. A apresentação do tutorial é *online*³ e foi utilizado o programa **latex2html** para gerar o arquivo *online*.

Seguem-se dois exemplos contidos no tutorial, os quais foram tirados do livro *Physical chemistry: a molecular approach*⁴.

EXEMPLO 3-4 Mostre que e^{ikx} é uma autofunção do operador

$$\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \text{ Qual é o autovalor?}$$

Solução:

Aplicando \hat{P}_x em e^{ikx} encontramos

$$\hat{P}_x e^{ikx} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{ikx} = \hbar k e^{ikx}$$

Podemos verificar os cálculos que nos forneceram este resultado digitando o operador, a função e o comando que aplica a operação no MAXIMA.

```
(%i1) px(:) := -%i*hb*diff(%,x,1)
```

```
(%i2) %:exp(%i*k*x)
```

```
(%i3) px(%)
```

Obteremos o resultado do operador \hat{P}_x como a seguinte linha de *output*:

```
(%o3) hb k exp(%i k x)
```

Outro exemplo é o cálculo da variância de x , como segue. O uso do programa Maxima para resolver a integral do problema permite que se dê atenção ao significado físico do mesmo e não se despenda tanta energia em sua resolução matemática.

Variância de x

Primeiro, calculamos $\langle x^2 \rangle$ que é dado por:

$$\langle x^2 \rangle = \int \psi_n^*(x) x^2 \psi_n(x) dx$$

Substituindo $\psi_n(x)$:

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^a x^2 \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{a} \right) dx$$

```
(%i31) integrate(x^2*(fx(x,1)*fx(x,1)),x,0,ax)
(%i32) ratsimp(%)
(%i33) expand(%)
```

A variância de x é dada por $\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$

```
(%i36) integrate(x^2*(fx(x,1)*fx(x,1)),x,0,ax) -
((integrate(x*(fx(x,1)*fx(x,1)),x,0,ax))^2)
(%i37) ratsimp(%)
```

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A primeira aplicação deste trabalho foi uma disciplina de Introdução à Química Quântica na Pós-Graduação, onde houve boa aceitação por parte dos alunos. Houve também uma primeira tentativa de inserir o programa Maxima acompanhado deste tutorial, numa disciplina de Química Quântica para Licenciatura em Química. No entanto, alguns alunos demonstraram certa resistência ao uso do computador, por não estarem familiarizados com programas diferentes daqueles comumente usados em seu dia-a-dia. Novamente, está se aplicando o programa Maxima na disciplina de Introdução à Química Quântica da Pós-Graduação. Os alunos estão tirando bastante proveito, pois vários deles vieram de cursos nos quais não houve ênfase em Cálculo, como o curso de Farmácia por exemplo, e assim eles conseguem resolver os problemas com o uso do programa.

CONCLUSÕES

O uso de programas como o Maxima possibilita aos alunos focalizarem sua atenção no problema físico em questão e não na resolução matemática do mesmo. Dessa forma, o proveito que tiram dessas disciplinas que utilizam matemática sofisticada é bem maior.

REFERÊNCIAS

1. Maxima, a Computer Algebra System. Disponível em: <http://maxima.sourceforge.net>
2. Ferreira, M. M. C.; Porto M. E. G.; *Quim. Nova*, **1993**, 16(6), 589.
3. Tutorial de Química Quântica utilizando o Maxima. Disponível em: <http://qf536.110mb.com>
4. MCQUARRIE, D. A.; SIMON, J. D.; *Physical chemistry: a molecular approach*. Sausalito, Calif.: University Science Books, c1997.