



E0587

APLICAÇÃO DE SISTEMAS DE ÁLGEBRA COMPUTACIONAL NO ENSINO DE QUÍMICA QUÂNTICA

Magnólia Águida Langge e Prof. Dr. Pedro Antonio Muniz Vazquez (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

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, p. ex. Mathematica e Maxima, podem ser usados para auxiliar nestas resoluções. Neste trabalho, foi desenvolvido um tutorial utilizando o programa Maxima, que propõe vários exemplos estudados na disciplina de Química Quântica. 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. Houve 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. Outros tópicos estão sendo desenvolvidos, entre eles, Método Variacional e Teoria da Perturbação.

Álgebra computacional - Ensino de química quântica - Programa maxima