

Aplicação de computação científica no ensino de Química.

Stéfano Araújo Novais (IC)¹, Fabio da Silva Miranda (PQ)^{1*}. miranda@vm.uff.br.

¹Laboratório de Fotoquímica Molecular, Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Niterói, RJ, 24020-140.

Palavras Chave: MAPLE, química quântica, função de onda, orbitais atômicos, superfícies 3D.

Introdução

A utilização de programas computacionais, como o MAPLE, o MATHEMATICA e o MATLAB para a resolução de problemas matemáticos na rotina do aluno de química faz com que o mesmo adquira uma formação diferenciada. A necessidade de alunos com experiência para tratar dados complexos em fotoquímica e química computacional motivou a busca por talentos com vocação simultânea em matemática e química. Para isso tem sido desenvolvido um tutorial para uso dos softwares MAPLE e MATLAB aplicado a problemas químicos das disciplinas de química inorgânica. O tema escolhido para iniciar essa atividade foi a construção de superfícies de duas ou três dimensões dos orbitais atômicos, bem como resolver as funções onda radiais e angulares. Com isso, espera-se apresentar uma alternativa para o desenvolvimento acadêmico do aluno, principalmente em disciplinas teóricas e experimentais que apresentem cálculos complexos. Por exemplo: o software em questão permite ao aluno obter uma análise mais interativa dos orbitais gerados, manipulando-os de forma mais confortável de acordo com as ferramentas do programa. Por conta disso, o tutorial que está sendo desenvolvido busca fazer com que o aluno tenha interesse em resolver problemas matemáticos de uma maneira mais versátil e dinâmica.

Resultados e Discussão

As funções de ondas de átomos hidrogenóides são provenientes do produto entre as funções de onda radial e angular.¹⁻³ A função de onda radial é responsável pelo tamanho da superfície, enquanto a angular é responsável pelo formato desta. Também estão sendo gerados dados referentes à função de distribuição radial, a qual traduz com mais clareza as regiões nodais dos orbitais. Uma vantagem do MAPLE é que as autofunções radiais (relacionadas aos polinômios associados de Laguerre) e as autofunções angulares (relacionadas aos polinômios associados de Legendre) já fazem parte da biblioteca interna e original do programa. A função de onda, Ψ , pode ser calculada através de comandos específicos do MAPLE, gerando as superfícies dos orbitais atômicos desejados.

Exemplo disto é a superfície do orbital $5f_{xyz}$, apresentado na Figura 1.

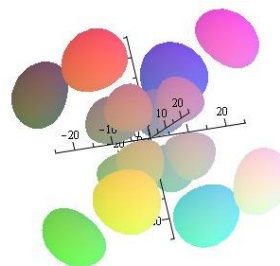


Figura 1. Superfície do orbital $5f_{xyz}$ gerada a partir do MAPLE 13.

Outro tema que está sendo trabalhado é o efeito de blindagem, podendo ser mostrado através da sobreposição das funções de distribuição radial de orbitais de energia próxima. (ver Figura 2).

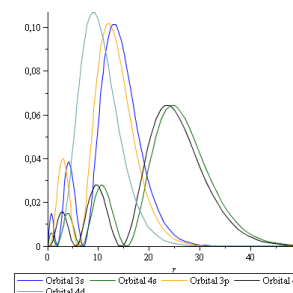


Figura 2. Efeito de blindagem analisado através da sobreposição das funções de distribuição radial.

Conclusões

Os resultados preliminares mostram a viabilidade na disseminação do uso de ferramentas como MAPLE e MATLAB pela comunidade química através do uso na resolução de problemas e exercícios de sala de aula, em especial os de química inorgânica.

Agradecimentos

À FAPERJ, UFF.

¹ Ferreira, M. M. C.; Porto, M, E, G.; *Química Nova*. **1993**, *16*, 589.

² The Orbitron: a gallery of atomic orbitals and molecular orbitals <<http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/>> Acesso em 01 de outubro de 2010 às 17:49

³ Keeler, J.; Wothers, P. *Chemical Structure and Reactivity: An integrated approach*. 1ª ed. Oxford University Press, Nova Iorque, Estados Unidos, 2008