

A Investigação no Ensino Superior Politécnico

19-20 de Maio de 1999, Santarém

VISUALIZAÇÃO TRIDIMENSIONAL E INTERACTIVA DA DINÂMICA MOLECULAR DA ÁGUA

Jorge Alberto Fonseca Trindade

Escola Superior de Tecnologia e Gestão

Instituto Politécnico da Guarda

Guarda

jtrindade@ipg.pt

e

Carlos Fiolhais

Departamento de Física da Universidade de Coimbra e

Centro de Física Computacional

Coimbra

tcarlos@fteor5.fis.uc.pt

Resumo

É cada vez mais frequente o recurso às capacidades gráficas tridimensionais dos computadores para visualizar e interpretar informação complexa, quer na investigação científica quer no ensino das ciências (por exemplo, para ajudar a formar modelos conceptuais correctos).

O Instituto Politécnico da Guarda está a desenvolver, em colaboração com o Departamento de Física da Universidade de Coimbra, o Exploratório Infante D. Henrique e o Centro de Computação Gráfica, também em Coimbra, um ambiente virtual sobre a água.

Uma parte importante desse ambiente é a dinâmica molecular (clássica) das fases gasosa e líquida da água. As moléculas movem-se de acordo com condições iniciais que se podem escolher livremente e com forças baseadas no potencial de Lennard-Jones. Trata-se de uma visão simplificada da realidade pois simulações mais realistas têm de ser feitas com base na mecânica quântica, sendo as forças mais complicadas. No entanto, o nosso trabalho, que pode ser explorado usando capacete para visão imersiva e luva de dados, tem interesse pedagógico para o ensino secundário e primeiros anos do ensino superior.

A importância do estudo da água

A água é uma substância quimicamente simples mas fisicamente bastante complexa. Trata-se, segundo Gillan [Gil97], de um dos líquidos mais difíceis de compreender. De facto, possui algumas propriedades invulgares que o distinguem de um qualquer outro líquido (e.g., maior densidade na fase líquida do que na sólida - por isso é que o gelo flutua).

O estudo físico-químico da água realizado por numerosos investigadores ([JCM82], [Spr91], [Oja92], [LSP93], [Oja94], [Gil97], [Ham97], entre outros) conduziu à descoberta de novas propriedades da água, incluindo novas fases do gelo [LVL92], [LFK98].

O estudo da água é importante em áreas como a nucleação em fase gasosa, fenómenos de catálise, a física e química da atmosfera [BB75] e o comportamento de soluções aquosas em Biologia e Química. É necessário, em qualquer um dos casos, que o comportamento da água seja bem compreendido ao nível molecular. Simulações moleculares, mais simples ou mais sofisticadas, são essenciais nessa compreensão.

Podem ser consultadas várias páginas na Internet sobre a água contendo desde informação de carácter geral, com inegável interesse pedagógico [Mir], até informação mais específica, como a modelação da água pura baseada em potenciais *ab initio* ou em potenciais efectivos [Ciw], [Cor], [Nyu].

Meios gráficos computacionais

A utilização complexa de gráficos tridimensionais para visualizar e interpretar informação tem vindo a crescer na investigação e no ensino das ciências. Em particular, este recurso é importante em domínios onde a interpretação de informação é mais exigente tal como na modelação molecular.

Os motivos de tal interesse são claros: quer na investigação científica quer no ensino, é mais fácil compreender certos conceitos a partir de modelos tridimensionais do que a partir da leitura de números ou fórmulas. No ensino, a utilidade de métodos gráficos, em particular os imersivos, é cada vez mais reconhecida na formação de modelos conceptuais correctos [TF96].

Assim, é possível juntar uma simulação molecular da água com a respectiva visualização tridimensional e interactiva, com grandes possibilidades de exploração. Poder-se-ão, por exemplo, assistir a mudanças de fase de líquido para gás ou sólido, ou mesmo alterar a estrutura do gelo.

O Instituto Politécnico da Guarda está a desenvolver, em colaboração com o Departamento de Física da Universidade de Coimbra, o Exploratório Infante D. Henrique e o Centro de Computação Gráfica, também em Coimbra, um ambiente virtual sobre a água. Durante a simulação, por exemplo da fase gasosa, as acções provenientes do utilizador, através dos dispositivos de entrada/saída, são submetidas ao programa, devendo ser interpretadas em tempo real para minimizar o tempo de resposta (latência). O ambiente virtual desenvolvido é, portanto, visto em tempo real. A Figura 1 mostra o ciclo de simulação do sistema de desenvolvimento *WorldToolkit* (da Sense8), e que está a ser utilizado no desenvolvimento do software. As forças e condições iniciais das moléculas são utilizadas para actualizar a sua posição e velocidade de acordo com as leis da dinâmica clássica. A visualização acompanha os passos dessa dinâmica.

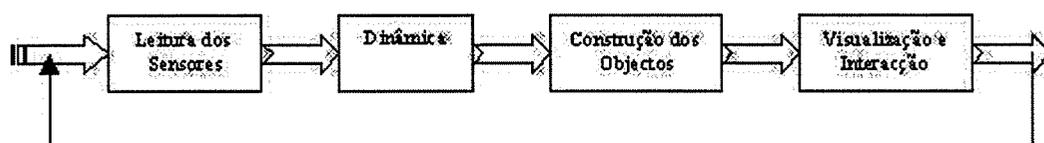


Figura 1: Ciclo de Simulação do WorldToolkit

Simulação da dinâmica clássica

No caso em estudo, os efeitos quânticos na dinâmica das moléculas são tão pequenos que a dinâmica baseada nas leis de Newton se revela suficientemente realista. As equações de Newton são resolvidas para cada uma das moléculas da amostra, a partir de posições e velocidades iniciais e do conhecimento da força que actua em cada molécula num determinado instante. Calculam-se assim as posições e velocidades de cada molécula ao fim de intervalos de tempo sucessivos, ou seja, obtém-se a evolução temporal do sistema. Considerando um grande número de condições iniciais, podem efectuar-se médias estatísticas.

Vejamos em pormenor qual é o algoritmo que preside à dinâmica. Consideramos moléculas de água esfericamente simétricas e quimicamente inertes. Supõe-se que a energia potencial total é a soma das interacções entre pares de partículas:

$$U = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n u(r_{ij}) \quad (1)$$

em que $u(r_{ij})$ apenas depende da distância r_{ij} entre as partículas i e j .

Frequentemente, basta escolher uma forma simples de $u(r)$. As suas características mais importantes são a forte repulsão para pequenos valores de r e a fraca atracção para valores grandes de r .

Uma das formas mais comuns de $u(r)$ é o potencial de Lennard-Jones:

$$u(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2)$$

onde ϵ mede a profundidade do potencial e σ é o diâmetro molecular (Figura 2). O termo r^{-6} caracteriza a atracção de longo alcance entre duas moléculas, enquanto o termo r^{-12} caracteriza a repulsão de curto alcance.

Os parâmetros deste potencial para a água são $\epsilon = 1.031$ kJ/mol e $\sigma = 3.41$ Å [Mir].

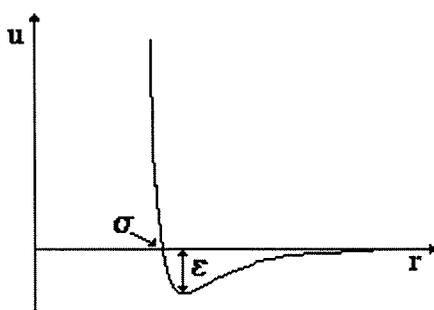


Figura 2: Potencial de Lennard-Jones

As forças que actuam em cada par de moléculas podem ser assim obtidas:

$$\vec{F}(r) = -\vec{\nabla}u(r) = \frac{24}{r} \epsilon \left[2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \hat{r} \quad (3)$$

com \hat{r} o versor na direcção da linha entre as duas moléculas e apontando de uma molécula para a outra.

As configurações do sistema ao fim de incrementos de tempo sucessivos Δt são calculadas a partir das equações de Newton para cada molécula de massa m :

$$m \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = -\vec{\nabla}_i \sum_j u(r_{ij}) \quad (4)$$

Existem vários métodos numéricos para resolver as equações (4). Um dos mais simples e fiáveis é o método de Verlet [Ver67]:

$$x_i(t + \Delta t) = 2x_i(t) - x_i(t - \Delta t) + \frac{F_{x,i}(t)}{m} \Delta t^2 + 0(\Delta t^4) \quad (5)$$

$$v_{x,i}(t) = \frac{x_i(t + \Delta t) - x_i(t - \Delta t)}{2\Delta t} + 0(\Delta t^3) \quad (6)$$

em que $O(\Delta t^n)$ designa os termos de ordem superior. O valor de $x_i(t - \Delta t)$ é dado por:

$$x_i(t - \Delta t) = x_i(t) - v_{x,i}(t)\Delta t + O(\Delta t^2) \quad (7)$$

O incremento de tempo Δt deve ser suficientemente pequeno de modo a obter conservação da energia total.

Visualização gráfica

Na Figura 3 está representada uma imagem da dinâmica da fase gasosa e o respectivo equipamento utilizado. O capacete permite uma visualização imersiva do cenário. Este é modificado sempre que o utilizador executa movimentos com a cabeça, graças a um sensor de posição. Com a luva, o utilizador pode interagir com as moléculas, agarrando-as ou pode elevar o valor médio da velocidade (temperatura). O impacto pedagógico deste tipo de ferramentas para o ensino secundário e superior está a ser investigado.

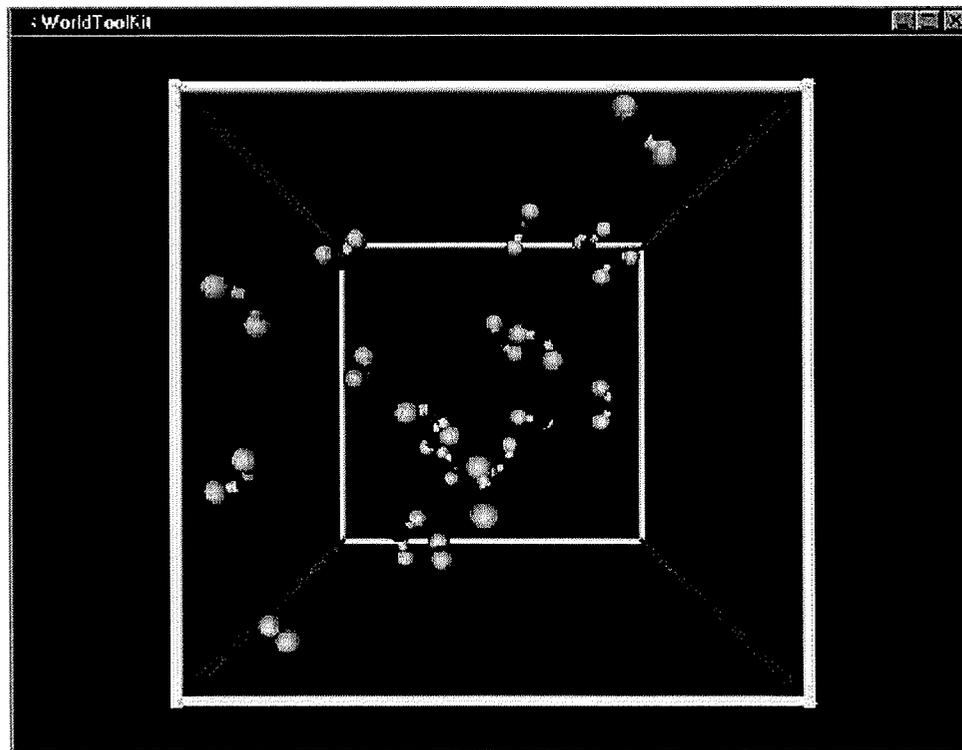


Figura 3: Cenário da dinâmica molecular da água

Agradecimentos

Agradece-se a André Dias a valiosa colaboração prestada no desenvolvimento do código de dinâmica molecular. Agradece-se ao Prof. Dr. José Carlos Teixeira, do Centro de

Computação Gráfica, todas as facilidades concedidas.

Referências

[BB75] - C. Briant e J. Burton. 1975. *J. Chem. Phys.* **63**. 2045.

[Ciw] - <http://www.ciw.edu/CIW-news-ice.html>.

[Cor] - <http://www.tc.cornell.edu/Edu/SPUR/SPUR96/Peter/report.html>

[FT98] - C. Fiolhais e J. Trindade. 1998. in *Proceedings of the "Euroconference'98 – New Technologies for Higher Education"*. Univ. Aveiro: ed. A. Ferrari, Aveiro.

[Gil97] - M. Gillan. 1997. *Contemporary Physics* **38**. 115.

[GT96] - H. Gould e J. Tobochnik. 1996. "An Introduction to Computer Simulation Methods. Applications to Physical Systems.", 2nd Edition, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts.

[Ham97] - D. Hamann. 1997. *Phys. Rev. B* **55** (16). 55

[JCM82] - W. Jorgensen, J. Chandrasekhar e J. Madura. 1982. *J. Chem. Phys.* **79**. 650.

[LFK98] - C. Lobban, J. Finney e W. Kush. 1998. *Nature* **391**. 268.

[LSP93] - M. Laasonen, M. Sprik, e M. Parrinelo. 1993. *J. Chem. Phys.* **99**. 9080.

[LVL92] - C. Lee, D. Vanderbilt, K. Laasonen *et. al.*. 1992. *Phys. Rev. Lett.* **69**. 462.

[Mir] - <http://miranda.bu.edu/~fstarr/water.html>

[Nyu] - http://cwis.nyu.edu/pages/mathmol/modules/water/info_water.html

[Oja92] - L. Ojamäe. 1992. *Chem. Phys. Lett.* **191**. 500.

[Oja94] - L. Ojamäe. 1994. *J. Chem. Phys.* **100**. 2128.

[Spr91] - M. Sprik. 1991. *J. Chem. Phys.* **95** (9). 6762.

[TF96] - J. Trindade e C. Fiolhais. 1996. *Gazeta da Física* **19** (2). 11.

[Ver67] - L. Verlet. 1967. *Phys. Rev.* **159**. 98.