

Aplicação de Realidade Virtual Para Visualizar Conceitos de Mecânica Quântica

Jorge Alberto Trindade

Instituto Politécnico da Guarda
Escola Superior de Tecnologia e Gestão
P-Guarda, Portugal
jtrindade@ipg.pt

Carlos Fiolhais

Departamento de Física da Universidade de Coimbra e
Centro de Física Computacional
P-Coimbra, Portugal
tcarlos@hydra.ci.uc.pt

Resumo

A disponibilização de micro-computadores com apreciáveis capacidades gráficas tem motivado o desenvolvimento de aplicações gráficas tridimensionais para visualizar e interpretar informação complexa tanto na investigação científica como no ensino das ciências. Exemplo disso é um ambiente virtual sobre moléculas de água que está a ser desenvolvido em colaboração entre o Instituto Politécnico da Guarda, o Departamento de Física da Universidade de Coimbra, o Exploratório Infante D. Henrique e o Centro de Computação Gráfica, também em Coimbra.

Uma parte desse ambiente dá ênfase à visualização de conceitos de mecânica quântica como orbitais moleculares e densidades electrónicas da água.

Uma razão que motivou o desenvolvimento deste trabalho foi o facto de a bibliografia e o novo conhecimento da realidade do ensino da Física e da Química apontar para situações de insucesso na aprendizagem dos alunos que se relaciona com a formação de modelos conceptuais incorrectos relativos ao mundo microscópico.

Abstract

The ready to use of microcomputers with appreciable graphics capabilities has motivated the development of graphical 3D applications for displaying and interprets complex information as much in scientific research as in science's teaching. One example that is a virtual environment about water molecules that is being developed in cooperation between the Instituto Politécnico da Guarda, the Departamento de Física da Universidade de Coimbra, the Exploratório Infante D. Henrique and the Centro de Computação Gráfica, also at Coimbra.

A portion of this environment gives emphasis to quantum mechanics concepts visualization as molecular orbitals and electron densities of water.

One reason that has caused the development of this project it was the fact of the bibliography and the new knowledge of teaching of Physics and Chemistry point at

difficulties in student's apprenticeship with the wrong concept models formation about the microscopic world.

Palavras chave: Realidade virtual, orbitais, densidades electrónicas

Introdução

O recurso à utilização de gráficos tridimensionais para visualizar e interpretar informação tem vindo a crescer na investigação e no ensino das ciências. A razão principal de tal interesse é o facto de ser mais fácil compreender certos conceitos a partir de modelos tridimensionais do que a partir da leitura de números ou fórmulas. É muito frequente, por exemplo, os alunos desenvolverem conceitos errados pela impossibilidade de associarem os conceitos que lhes são ministrados na sala de aula com modelos adequados [Cle82, Min82, Mcd84, Sty98]. Assim, os métodos gráficos imersivos no ensino, como os que são disponibilizados através de tecnologias de realidade virtual, são cada vez mais reconhecidos como úteis na formação de modelos conceptuais correctos [Ded95, TF96].

Até há pouco, a utilização de meios computacionais no ensino restringia-se a representações bidimensionais [Dis87, Den96, Tao97]. Contudo, a realidade virtual permite uma nova vertente na exploração desta nova tecnologia - o grafismo tridimensional e imersivo [FT98]. Com esse objectivo, 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 estrutura da água. Para além de incorporar outros conceitos, a componente essencial da aplicação está relacionada com a visualização de conteúdos básicos de mecânica quântica. Por exemplo, é possível "viajar" através das orbitais moleculares da água, analisar diversas densidades electrónicas e mesmo "experimentar" provocar a excitação de sistemas atómicos.

Objectivos e Descrição Geral

Desde os anos 60 que a utilização de práticas inovadoras, nomeadamente com o recurso às tecnologias computacionais, têm vindo a ser aplicadas no ensino das ciências e em particular da Física [Tei96]. A realidade virtual tem sido apontada como um poderoso instrumento de ensino e treino porque, entre outras razões, permite uma experiência vivida na primeira pessoa, a imersão num ambiente, a interacção com modelos tridimensionais, e uma experiência multisensorial [BB73, Eri93, Kal93].

No entanto, subsistem ainda problemas relacionados com o uso desta tecnologia no ensino e aprendizagem. Por um lado, há que ver de facto até que ponto as representações tridimensionais têm uma mais valia em relação às bidimensionais. Por outro lado, há que testar o desempenho de dispositivos de interface, como os capacetes de visualização e as luvas de dados [Wic92].

Desta forma sentiu-se a necessidade de conceber um ambiente virtual tendo por objectivos:

- Permitir aos estudantes explorarem alguns conceitos microscópicos e abstractos de mecânica quântica, que são ensinados nas aulas, mas para os quais não existem modelos de referência acessíveis [Sty96]. Tomando-se por objecto de estudo a

molécula de água, os aspectos abordados no trabalho contemplam o estudo da sua geometria (Figura 1), das orbitais moleculares (Figuras 2) e densidades electrónicas (Figura 3). Dado que uma das matérias básicas na mecânica quântica é o estudo das funções de onda do hidrogénio, achou-se também conveniente enquadrar este assunto no ambiente virtual (Figura 4). Entre outras acções, é possível, por exemplo, "explorar" cada uma das orbitais (Figura 4-a) e analisar a sobreposição das mesmas (Figura 4 b e c).

- Contribuir para uma análise mais pormenorizada do uso da realidade virtual na educação. Existe algum optimismo relativamente às potencialidades que esta tecnologia oferece mas é necessário provar a sua utilidade.

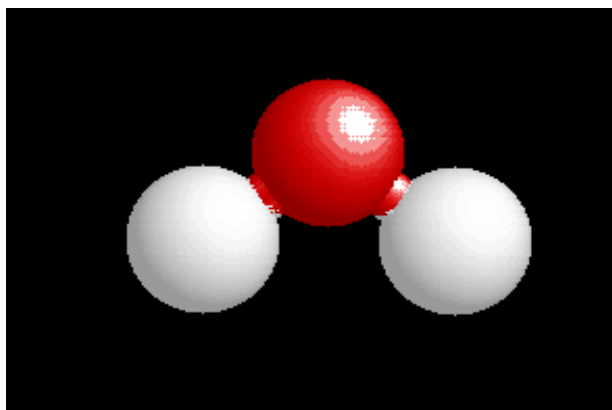
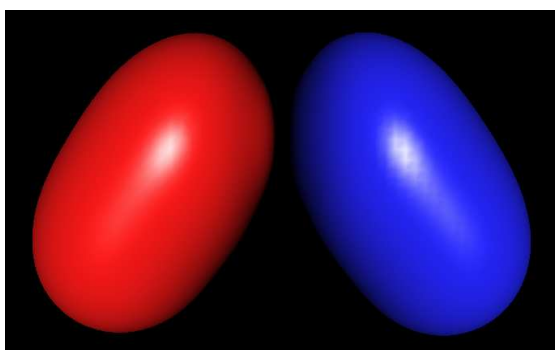
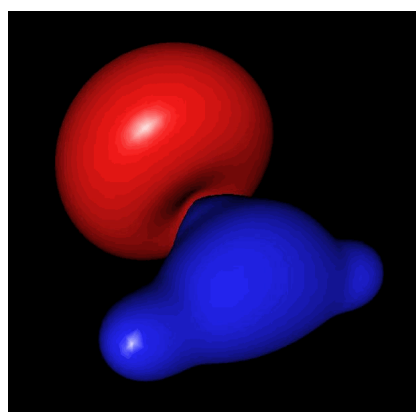


Figura 1 - Representação da molécula da água do tipo *ball and stick*. A esfera vermelha representa o oxigénio e as duas esferas brancas o hidrogénio.



a)



b)

Figura 2 - Representação das terceira (a) e quarta (b) orbitais moleculares da água.

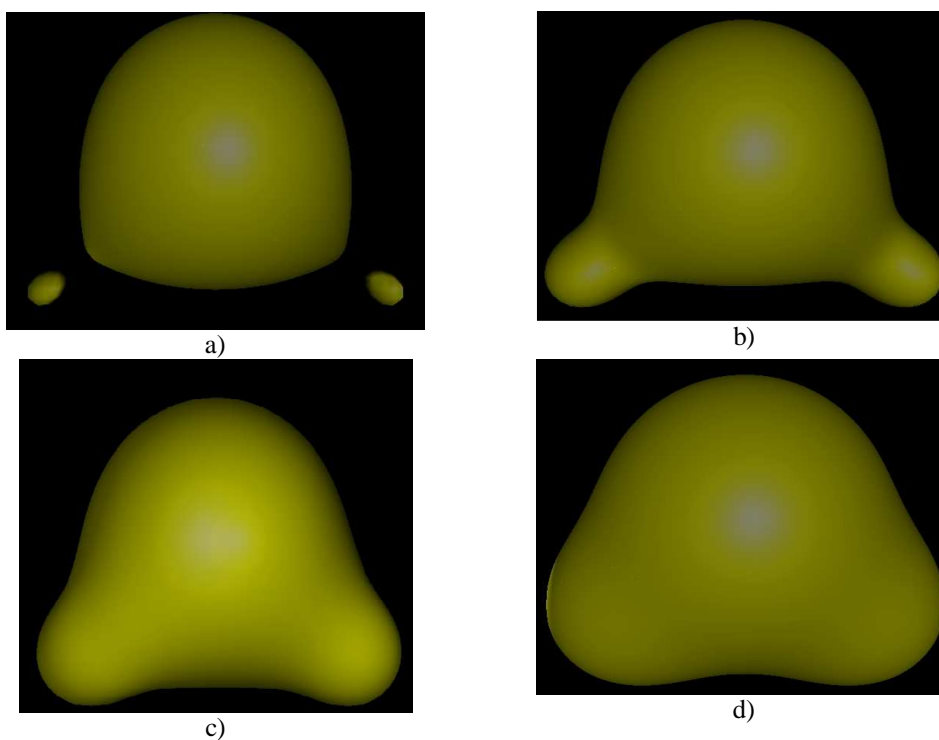


Figura 3 - Representações da densidade electrónica da molécula de água. As figuras a), b), c) e d) representam superfícies de igual densidade correspondentes a valores decrescentes da densidade.

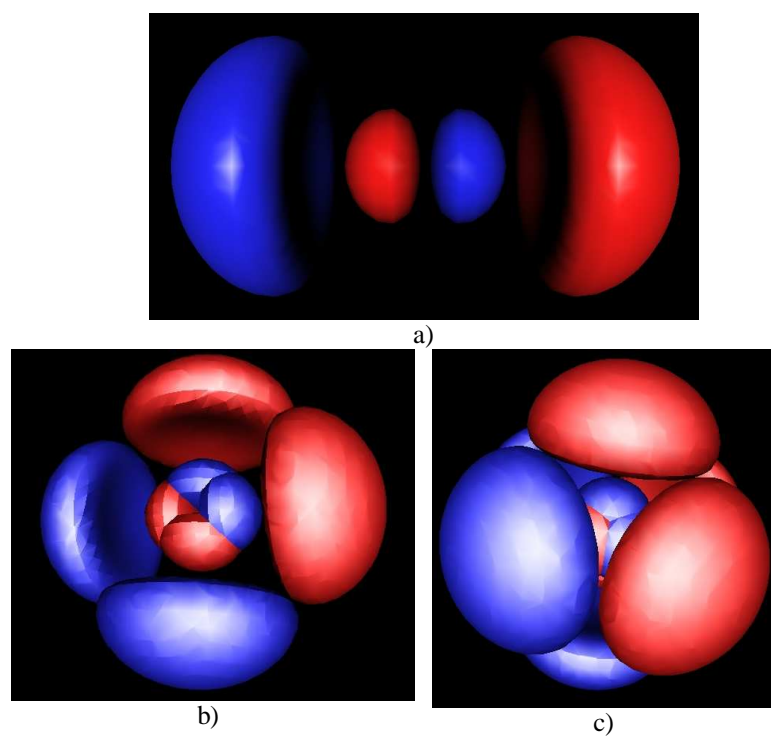


Figura 4 - Representação tridimensional das orbitais atómica 3p do átomo de hidrogénio: a) orbital 3px; b) sobreposição das orbitais atómicas 3px e 3py; c) sobreposição das orbitais 3px, 3py e 3pz. A cor azul corresponde à parte negativa da função de onda e a cor vermelha à parte positiva.

Configuração do Sistema de RV

A plataforma de desenvolvimento do ambiente virtual é formada por um PC com processador *Pentium II* e com uma placa gráfica aceleradora 3D. Para a navegação e imersão no ambiente virtual, é utilizado um capacete de visualização V6 da *Virtual Research*, uma luva de dados (*Cyberglove*) da *Virtual Technologies*, e ainda um sensor magnético de posição, *Polhemus Isotrack II*, para dois receptores.

Em relação ao *software*, é utilizado o *WorldToolkit* (da Sense8), que permite o desenvolvimento e programação dos cenários. Relativamente à concepção dos modelos tridimensionais foram usados dois tipos de software: o *PC Gamess* [Gam], que permite efectuar os cálculos das orbitais, densidades electrónicas, optimização da geometria da molécula de água, etc. e o *Molden* [Mol] para a representação tridimensional dos modelos.

Conclusões

A utilização de gráficos tridimensionais parece ser uma ferramenta eficaz para a visualização e compreensão de informação complexa e/ou abstracta. A possibilidade de imersão e interacção com esses modelos gráficos, em ambientes virtuais, parece promissora mas terá de ser ainda devidamente explorada em contextos pedagógicos específicos.

Agradecimentos

Agradecemos ao Prof. Dr. Victor Gil, do Exploratório Infante D. Henrique, as sugestões para a realização deste trabalho e ao Prof. Dr. José Carlos Teixeira, do Centro de Computação Gráfica, as facilidades operacionais concedidas.

Referências

- [BB73] M. Bricken and C. Byrne. Summer students in virtual reality. In Wexelblat, A. (Ed.), *Virtual Reality: Applications and Exploration*, p. 199, New York: Academic Press, 1993.
- [Cle82] J. Clement. Student's preconceptions in introductory mechanics. *Am. J. Phys.* **50** (1982) 66.
- [Ded95] C. Dede. The evolution of constructivist learning environments: Immersion in distributed virtual worlds. *Educational Technology*, **35** (1995) 46.
- [Den96] R. Dengler. Computers in Physics education - general aspects and examples of hardware and software in Oblak S. *et al.* (ed) *Proceedings of New Ways of Teaching Physics*, GIREP/ICPE, International Conference, Ljubljana, Slovenia, (1996).

- [Dis87] A. DiSessa. The third revolution in computers and education, *J. of Research in Science Teaching*, **24** (1987) 343.
- [Eri93] T. Erickson. Artificial realities as data visualization environments. In Wexelblat, A. (Ed.), *Virtual Reality: Applications and Exploration*, p. 1, New York: Academic Press, 1993.
- [FT98] C. Fiolhais and J. Trindade. 1999. in *Proceedings of the "Euroconference'98 – New Technologies for Higher Education"*. Univ. Aveiro: ed. A. Ferrari, Aveiro.
- [Gam] PC Gamess, a program for ab initio quantum chemistry, written by Alex. A. Granovski, Moscow State University.
- [Kal93] R. Kalawsky. *The Science of Virtual Reality and Virtual Environments. A Technical, Scientific and Engineering Reference on Virtual Environments*. Addison-Wesley Publishing Company, 1993.
- [Mcd84] L. McDermott. Research on conceptual understanding in mechanics, *Phys. Today* **37** (7) (1984) 24.
- [Min82] J. Minstrell. Explaining the "at rest" condition of an object. *The Phys. Teacher* **10** (1982) 10.
- [Mol] Molden, a package for displaying MOLEcular DENsity, written by G. Schaftenaar, CAOS/CAM Center Nijmegen, Toernooiveld, Nijmegen, The Netherlands.
- [Sty96] D. Styer. Common misconceptions regarding quantum mechanics. *Am. J. Phys.* **64** (1996) 31.
- [Tao97] P. Tao. Confronting students' alternative conceptions in mechanics with the force and motion microworld, *Comp. in Phys.*, **11** (1997) 199.
- [Tei96] J. Teixeira. Environments for teaching computer graphics: an experience. *Comput. & Graphics* **20** (1996) 927.
- [TF96] J. Trindade e C. Fiolhais. A utilização da realidade virtual no ensino e na aprendizagem da Física e da Química. *Gazeta da Física* **19** (2) (1996)11.
- [Wic92] C. Wickens. Virtual Reality and Education. *Proceedings of the IEEE International Conference on Systems, Man, and Cybernetics, 1*, p. 842, New York: IEEE Press, 1992.