

## ESTUDO DE ORBITAIS ATÓMICAS DO HIDROGÉNIO E ORBITAIS MOLECULARES DA ÁGUA EM AMBIENTES VIRTUAIS

J. A. Trindade<sup>a#</sup>, C. Fiolhais<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Instituto Politécnico da Guarda, Escola Superior de Tecnologia e Gestão, Av<sup>a</sup> Dr. Sá Carneiro n.º 50, 6300-Guarda

<sup>b</sup> Centro de Física Computacional e Departamento de Física da FCTUC, Universidade de Coimbra, Rua Larga, 3000-Coimbra

Desde os anos 60 que práticas inovadoras, nomeadamente com o recurso às tecnologias computacionais, têm vindo a ser aplicadas no ensino das ciências em geral e da Física em particular. Contudo, até há pouco, a utilização de meios computacionais no ensino restringia-se a representações bidimensionais. A realidade virtual permite uma nova vertente na exploração do computador no ensino e aprendizagem - o grafismo tridimensional e imersivo [1]. De facto, esta nova tecnologia tem sido apontada como um poderoso instrumento de ensino e treino porque, entre outras razões, permite a interacção com modelos tridimensionais e uma experiência multisensorial vivida pelo próprio [2].

A principal razão do desenvolvimento de ambientes virtuais no ensino é o facto da utilização de métodos gráficos, como os que são oferecidos pelas tecnologias de realidade virtual, serem cada vez mais reconhecidos como úteis na formação de modelos conceptuais correctos [3]. 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 com ou sem a componente imersiva, 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 e averiguar a justeza de algumas críticas quanto ao desconforto proporcionado.

Com esse objectivo, o Departamento de Física da Universidade de Coimbra está a desenvolver, em colaboração com o Instituto Politécnico da Guarda, o Exploratório Infante D. Henrique e o Departamento de Matemática da Universidade de Coimbra, um ambiente virtual sobre a estrutura da água denominado "Água Virtual". Para além de incorporar outros conceitos, uma componente da aplicação está relacionada com a visualização de elementos básicos de mecânica quântica como orbitais atómicas do átomo de hidrogénio e orbitais moleculares da água.

Estes cenários têm por objectivo permitir aos estudantes dos anos terminais do ensino secundário e do primeiro ano do ensino superior explorarem alguns conceitos abstractos de mecânica quântica, que são ensinados nas aulas, mas para os quais não existem modelos de referência acessíveis [4,5]. São exemplos disso os conceitos de função de onda, orbital e densidade electrónica. Entre outras acções, é possível, por exemplo, ver e "explorar" orbitais atómicas do hidrogénio (Figura 1-a) e/ou das orbitais moleculares da água (Figura 2-a) e analisar a sobreposição das mesmas (Figuras 1-b e 2-b). Fazendo uso de uma luva de dados é possível "navegar" no interior dos modelos e "agarrar" nas orbitais para fazer várias sobreposições. Pode-se observar os modelos de várias posições, fazer estudos de simetria espacial e distinguir entre a noção de orbital e de densidade electrónica.

A plataforma de desenvolvimento do ambiente virtual é 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 os 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* [6], que permite efectuar os cálculos das orbitais, densidades

<sup>#</sup>Contacto: E-mail: jtrindade@ipg.pt

electrónicas, optimização da geometria da molécula de água, etc. e o *Molden* [7], para a representação tridimensional dos modelos.

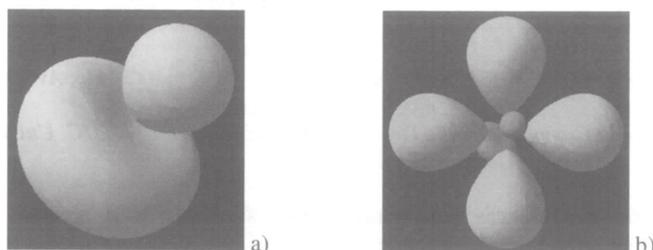


Fig.1 – Visualização de algumas orbitais atómicas do átomo de hidrogénio: a) orbital 2sp3; b) sobreposição das orbitais 3sp3 (ao centro) e 3dx2y2 (com quatro lóbulos).

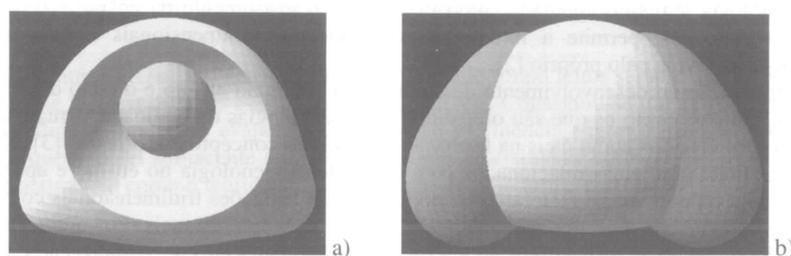


Fig.2 – Navegação através de orbitais moleculares da água: a) entrando na 2ª orbital molecular ocupada com a 1ª orbital (esférica) ao centro; b) sobreposição das 2ª e 3ª (lóbulos laterais) orbitais moleculares.

#### Agradecimentos

Os autores agradecem ao Prof. Dr. Victor Gil, do Departamento de Química da Universidade de Coimbra, pelas suas preciosas sugestões, e ao Prof. Dr. José Carlos Teixeira, do Departamento de Matemática da mesma Universidade, pelo apoio técnico. Também agradecemos o apoio dos alunos Nuno Pereira e Eduardo Coutinho pela sua colaboração no desenvolvimento de alguns cenários do projecto "Água Virtual". Este trabalho é parcialmente apoiado pela Fundação para a Ciência e a Tecnologia (projecto PRAXIS/FIS/14188/1998).

#### Referências

- [1] J. A. Trindade e C. Fiolhais, *Gazeta da Física*, 19 (1996) 11.
- [2] "Virtual Water, an application of virtual environments as an education tool for physics and chemistry", por J.A. Trindade, C. Fiolhais e V. Gil, Comunicação apresentada na 7<sup>th</sup> International Conference on Computers in Education, Chiba, Japão, 4 -7 de Novembro de 1999, Livro de resumos, pág. 655-658.
- [3] J. A. Trindade et al., *Computer Graphics Topics*, 5 (1999) 12.
- [4] D. Styer, *Am. J. Phys.* 64 (1996) 31.
- [5] C. Dede, *Educational Technology*, 35 (1995) 46.
- [6] PC Gamess, a program for ab initio quantum chemistry, written by Alex. A. Granovski, Moscow State University.
- [7] Molden, a package for displaying MOLEcular DENsity, written by G. Schaftenaar, CAOS/CAM Center Nijmegen, Toernooiveld, Nijmegen, The Netherlands.