

Orbitário: Exploração de Orbitais Hidrogenóides com Realidade Aumentada

Trindade J.¹, Kirner C.² e Fiolhais C.¹

¹ Centro de Física Computacional,
Universidade de Coimbra, Coimbra – Portugal,
{alberto, tcarlos}@teor.fis.uc.pt

² Faculdade de Ciências Matemáticas da Natureza e Tecnologia da Informação,
Universidade Metodista de Piracicaba, S. Paulo – Brasil,
ckirner@unimep.br

Resumo. A aprendizagem da Mecânica Quântica é normalmente considerada difícil pelos alunos. Vários trabalhos não só o comprovam como apelam a novas metodologias de ensino e aprendizagem. A utilização de recursos computacionais é uma tendência crescente existindo já casos práticos da sua utilização em sala de aula. A realidade aumentada é uma tecnologia inovadora que permite misturar imagens de um ambiente real com modelos virtuais. Para avaliar as potencialidades deste recurso tecnológico na aprendizagem de conceitos de Mecânica Quântica, desenvolvemos o programa *Orbitário*, um ambiente de realidade aumentada para o estudo de orbitais hidrogenóides.

1 Introdução

A Mecânica Quântica, em conjunto com a teoria da Relatividade, é a pedra angular da Física do século XX. Sendo a base de sustentação da física das partículas elementares, nuclear, atômica, molecular e do estado sólido, os seus impactos foram consideráveis com desenvolvimentos tecnológicos como o microscópio electrónico de varrimento por efeito túnel (STM), o relógio atómico do sistema de posicionamento global (GPS), a produção de imagens por ressonância magnética (NMR) e a tomografia por emissão de positrões (PET). Desta forma, a inclusão da Mecânica Quântica nos currículos do ensino secundário parece-nos aconselhável. Contudo, a sua aprendizagem é normalmente considerada difícil pelos alunos, devido ao carácter axiomático que é dada à Mecânica Quântica.

Algumas dificuldades associadas à aprendizagem da Mecânica Quântica prendem-se com a necessidade de ver o invisível. A utilização de modelos bidimensionais nos livros de texto e a manipulação de modelos matemáticos (em geral mal compreendidos) não facilitam a compreensão, sobretudo para alunos com menores aptidões espaciais [1]. Isto explica a afirmação comum entre estudantes de que a Mecânica Quântica é difícil, pois “é tudo matemática”. De acordo com Hurwitz *et al.* [2], um aluno com maiores dificuldades de raciocínio espacial estará em desvantagem face a outros mais dotados desse ponto de vista.

Diversos trabalhos têm evidenciado algumas dificuldades na aprendizagem da Mecânica Quântica. Por exemplo, num estudo realizado com 57 estudantes ingleses do último nível da escola secundária (17-18 anos), Masshadi [3] refere que os alunos usam indiferentemente os conceitos de movimento e trajectória nas suas explicações sobre as proprieda-

propriedades atômicas. Além disso, os alunos tendem a usar o conceito de probabilidade para se referirem a algo que não conhecem exactamente. Também Fischler e Lichtfeldt [4], num estudo realizado com 240 estudantes do último nível do ensino secundário alemão, verificaram que os alunos têm uma ideia mecanicista do movimento dos electrões ao considerarem que eles “voam” em órbitas fixas em redor do núcleo a alta velocidade. No ensino universitário também se registam estas dificuldades. Por exemplo, Johnston, Crawford e Fletcher [5] elaboraram um estudo com 33 alunos do terceiro ano da licenciatura em Física da Universidade de Sydney, na Austrália, que já tinham frequentado disciplinas incluindo temas de Mecânica Quântica. Nesse trabalho procuraram detectar os modelos mentais usados pelos estudantes para compreenderem determinados tópicos (partícula, onda, indeterminação, incerteza). Os autores referem que os estudantes utilizaram uma terminologia científica mas, por vezes, sem qualquer relação com as perguntas. Estas evidências indicariam que o conhecimento que esses estudantes (todos eles considerados bons estudantes segundo os critérios usuais do Departamento de Física) têm de Mecânica Quântica é muito superficial, não passando de uma colecção de factos isolados, úteis apenas para obter aprovação nos cursos. Os autores destacam também que os mesmos questionários foram distribuídos informalmente a estudantes de cursos superiores e de pós-graduação, e que as respostas obtidas não foram muito diferentes das encontradas no grupo de trabalho.

Barton [6] refere que os livros de texto usuais (tanto os de nível introdutório como mais avançado) possuem deficiências, uma vez que “fornecem esplêndidos métodos para realizar qualquer cálculo sobre átomos ou sobre campos quantizados, mas, no que se refere a princípios e à interpretação da Mecânica Quântica, são, quase sem excepção, simplistas e obscuros ao mesmo tempo”. Story [7] afirma que a abordagem formal, ainda que possibilite aos estudantes uma aplicação muito rápida da Mecânica Quântica, cria uma barreira para a compreensão, pois “muitos dos conceitos fundamentais (amplitude de probabilidade, operadores representando observáveis como energia e momento linear, o conceito global de um “estado”, etc.) poderiam aparecer magicamente”. Contudo, alguns autores já se aperceberam do poder da imagem para ajudar à compreensão de certos conceitos. Referimos o livro de Brandt e Dahmen “The Picture Book of Quantum Mechanics” [8], que revela a importância dada hoje à visualização no ensino da Física. Esta obra utiliza várias figuras tridimensionais para representar, por exemplo, superfícies com densidade de probabilidade constante do átomo de hidrogénio.

Vários autores [9, 10] defendem o uso regular de ferramentas computacionais de simulação e visualização no ensino, com particular destaque para a utilização de *software* que permita a interactividade [11]. Com efeito, a utilização de recursos computacionais no ensino introdutório da Mecânica Quântica é uma tendência que tem vindo a crescer rapidamente nos últimos anos. Existem já vários programas cujo objectivo é auxiliar os estudantes a visualizar alguns aspectos do mundo microscópico. *Atomic Orbitals CD*, por exemplo, é um *software* multimédia desenvolvido por Y. Wong que permite visualizar a três dimensões as formas das orbitais do hidrogénio e as densidades electrónicas, entre outros aspectos. Rebello e Zollman [10] também desenvolveram um projecto denominado *Visual Quantum Mechanics*, cujo objectivo é introduzir tópicos de Mecânica Quântica, com a ajuda de simulações, de actividades interactivas e de laboratórios, recorrendo a um mínimo de ferramentas matemáticas. Alguns casos práticos começaram mesmo já a ser

incorporados no contexto de sala de aula, no ensino secundário [12] e no universitário.¹ Por exemplo, Shotsberger e Vetter [13], da Universidade de North Carolina, Wilmington, nos EUA, referem a utilização frequente do *HyperChem* (*software* de modelação e visualização de estruturas moleculares) por alunos, em aulas de Química no ensino secundário, para criar, modificar e medir estruturas moleculares. Aqueles autores defendem que os alunos devem ter um papel activo na utilização das ferramentas computacionais.

Com efeito, a utilização de ambientes gráficos no contexto educativo é um meio inestimável para desenvolver diversas capacidades e melhorar a compreensão conceptual [14]. A utilização de ambientes virtuais, mais do que a transmissão de conteúdos, privilegia o desenvolvimento de capacidades cognitivas e da criatividade. A principal razão do desenvolvimento de ambientes virtuais no ensino é o facto de a utilização de métodos gráficos, como os que são oferecidos pelas tecnologias de realidade virtual, se revelarem cada vez mais úteis na formação de modelos conceptuais correctos [15]. Num ambiente virtual o utente observa cuidadosamente o que o rodeia, tentando identificar objectos, compreender situações e entender relações. A observação torna-se, assim, a primeira capacidade intelectual a ser desenvolvida, de forma diversa e muito mais apurada do que no mundo real onde, frequentemente, se olha despreocupadamente e não se vê aquilo que é realmente importante. A percepção visual é treinada ao mesmo tempo que a percepção auditiva. Paralelamente à observação, o aluno analisa a situação em que ele se insere, colocando questões e levantando hipóteses sobre o conteúdo, navegando no ambiente virtual desenvolve o seu raciocínio, avançando com ideias que terão de ser confirmadas.

No entanto, subsistem algumas questões relativas ao desta tecnologia no ensino e aprendizagem. Por um lado, há que ver até que ponto as representações tridimensionais com ou sem a componente imersiva, proporcionam 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.

Segundo Mark Billinghurst, pesquisador de interfaces que combinam o real e o virtual para auxiliar a colaboração, os educadores deveriam trabalhar com os pesquisadores do campo da realidade aumentada para compreender melhor as aplicações computacionais no ambiente de aprendizagem [16].

2 Realidade Aumentada

Uma das tecnologias computacionais recentes é a realidade virtual. Apontada como um poderoso instrumento de ensino e treino, esta tecnologia disponibiliza uma vertente inovadora, quer através da interacção com modelos tridimensionais quer através de experiências multisensoriais [17]. O grande interesse por esta área permitiu a sua especialização em vários sectores e a possibilidade de diferentes combinações (Fig. 1). Uma dessas possibilidades é a realidade aumentada.

¹ <http://www.umich.edu/~chem215>, consultado em Julho de 2000.

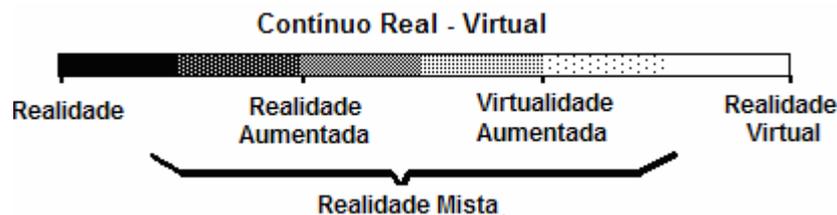


Fig. 1. Os diversos níveis de realidade virtual de acordo com Drascic [18]. Enquanto num sistema de realidade virtual o cenário é totalmente artificial, num ambiente de realidade mista é possível juntar imagens reais com imagens ou modelos virtuais. Esta técnica, (realidade aumentada) permite maior realismo

Considerada uma variante da realidade virtual, a realidade aumentada disponibiliza um tipo não convencional de interface, que permite misturar imagens de um ambiente real, obtidas por câmara de vídeo ou por outro processo, com objectos 3-D virtuais, enriquecendo a visão do utilizador. No ambiente assim gerado, o utilizador tem a sensação de que os objectos reais e virtuais coexistem no mesmo espaço na medida em que os objectos virtuais são passíveis de visualização e de interacção como se existissem no mundo real. Desta forma, a realidade aumentada enfatiza a visualização em conjunto com a interacção, pois, com o auxílio de dispositivos de visualização mais ou menos imersivos, objectos virtuais podem ser sobrepostos ao ambiente real, de maneira altamente realista, incrementando a percepção do utilizador [15].

Vários trabalhos têm sido desenvolvidos com o intuito de avaliar as potencialidades da realidade virtual no ensino e na aprendizagem das ciências.² Por exemplo, o Centro de Física Computacional da Universidade de Coimbra, em colaboração com o Exploratório Infante D. Henrique e o Departamento de Matemática da Universidade de Coimbra, desenvolveram um ambiente virtual sobre a estrutura da água denominado *Água Virtual*. Trata-se de um programa que aborda conceitos relacionados com fases de água, transições de fase, agregados moleculares, estruturas de gelo para além da visualização de elementos básicos de mecânica quântica como orbitais atómicas do átomo de hidrogénio e orbitais moleculares da água. O programa é vocacionado para alunos dos anos terminais do ensino secundário e do primeiro ano do ensino superior e pode ser disponibilizado gratuitamente a pedido.³

De uma forma geral, os trabalhos neste domínio têm evidenciado resultados positivos e têm incentivado à aplicação da realidade virtual no ensino e na aprendizagem das ciências. Por exemplo, na avaliação do programa *Água Virtual*, efectuada junto de uma população de 20 estudantes de ciências do primeiro ano da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra, verificámos que a utilização de ambientes virtuais, com possibilidade de interacção e navegação, se mostrou bastante útil para a compreensão de concei-

² No domínio das ciências veja-se, por exemplo, o projecto *ScienceSpace* (<http://www.virtual.gmu.edu>, consultado em Maio de 2004) e alguns exemplos on-line de simulações de experiências de Física com realidade virtual em <http://heebok.kongju.ac.kr/VRPS/> (consultado em Maio de 2004).

³ Está em curso uma versão on-line deste programa, mais simplificada, que se encontra, provisoriamente, em <http://aguavirtual.mediaprimer.pt>.

conceitos sobre transições de fase. O mesmo já não se verificou para a compreensão de orbitais atômicas. Tal facto deixou claro a necessidade de uma melhor adequação das tecnologias computacionais aos conteúdos curriculares. Desta forma, levantam-se questões como descobrir os meios de interacção e de representação gráfica computacional mais adequadas à aprendizagem dos conceitos.

Foi exactamente com este intuito, para além do objectivo de trazer para o terreno da educação tecnologias inovadoras, que o Centro de Física Computacional da Universidade de Coimbra iniciou um projecto com o Grupo de Realidade Virtual, da Faculdade de Ciências Matemáticas da Natureza e Tecnologia da Informação, da Universidade Metodista de Piracicaba, de S. Paulo, no Brasil. O projecto consiste no desenvolvimento de aplicações para o ensino e aprendizagem das ciências utilizando a realidade aumentada, designando-se por Ensino de Ciências em Realidade Aumentada e Melhorada (ECRAM).

3 O Orbitário

Um dos trabalhos, que integra o projecto ECRAM, designa-se por *Orbitário*. É destinado ao nível introdutório de conceitos de Mecânica Quântica não relativista incluindo a interpretação probabilista da função de onda, as propriedades das soluções da equação de Schrödinger, os princípios da incerteza e de exclusão de Pauli, etc. Também são ilustradas algumas experiências importantes como a de difracção de Rutherford, a de Thompson sobre a razão e/m para um electrão, etc. A escolha da Mecânica Quântica encontra a sua justificação nas razões anteriormente invocadas, nomeadamente a exploração de conceitos abstractos, que são ensinados nas aulas, mas para os quais não existem modelos de referência acessíveis (conceitos de orbital e de densidade electrónica) [6,7].

O programa foi desenvolvido com o *ARToolKit*, que é o software livre normalmente utilizado para desenvolver aplicações de realidade aumentada. Trata-se de uma ferramenta de código aberto com frequentes actualizações, encontrando-se acessível em vários sites.⁴

Um procedimento fundamental no desenvolvimento da aplicação consiste na sobreposição dos modelos virtuais (as orbitais) com o ambiente real (por exemplo, o manual). Para tal, é preciso obter a posição e a orientação dos objectos da cena real e associá-los com os modelos previamente armazenados no computador. Isto é normalmente conseguido com o recurso a determinados padrões, isto é, placas com marcas fiduciais que contém símbolos para se diferenciarem uma das outras, tornando-as singulares.

Tomemos como exemplo a associação do modelo da orbital $2p_x$ à respectiva marca fiducial (Fig. 2). A imagem da placa fiducial, captada por uma *webcam*, é convertida para um formato binário. Uma vez reconhecido o padrão, é calculada a posição e orientação do marcador relativamente à *webcam*. O modelo da orbital associado ao padrão é identificado e é feito o *rendering* do modelo virtual no vídeo. O modelo da orbital (estático ou dinâmico) irá aparecer sobreposto ao respectivo padrão e a sua representação poderá ser feita de forma imersiva (num capacete de visualização ou óculos com ou sem estereoscopia) ou de forma não imersiva no monitor do computador (Fig. 3). Ao manipular a placa (que pode

⁴ <http://www.hitl.washington.edu/artoolkit/download.htm>, consultado em Março de 2004.

a placa (que pode estar incorporada num livro de texto), o objecto virtual realizará os mesmos movimentos da placa, como se a ela estivesse preso.

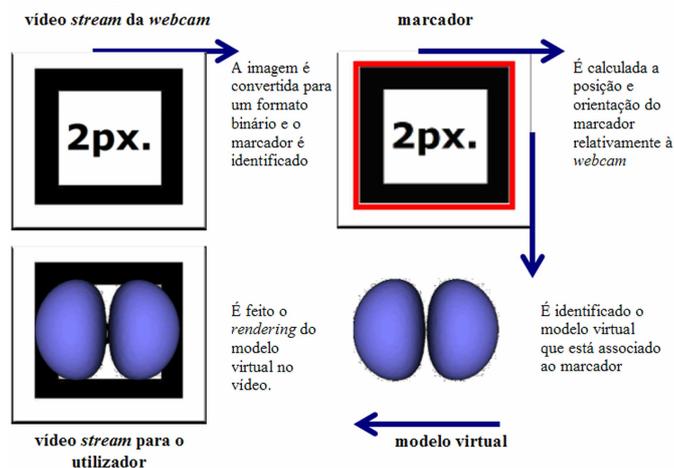


Fig. 2. Sobreposição do modelo virtual ao objecto real tomando como exemplo a orbital $2p_x$. A webcam capta o padrão pré-definido e converte-o para um formato binário para reconhecimento. O modelo da orbital associado ao padrão é identificado e é calculada a posição e a orientação do marcador relativamente à webcam. Finalmente efectua-se o *rendering* do modelo virtual no vídeo que aparecerá sobreposto ao respectivo marcador.



Fig. 3. a) Uma vez reconhecido o padrão, o modelo da orbital (estático ou dinâmico) irá aparecer sobreposto ao respectivo marcador e a sua representação poderá ser feita, por exemplo, de forma não imersiva no monitor do computador; b) Ao manipular a placa (que pode estar incorporada num manual), o objecto virtual realizará os mesmos movimentos do marcador, como se a ele estivesse preso.

Como o *ARToolkit* usa código aberto, foi possível desenvolver recursos adicionais no código referentes à interacção da aplicação e à implementação de som.

No que toca à interacção, é possível alterar o modelo virtual, a partir da introdução de uma placa adicional de controlo. A alteração dinâmica do objecto virtual, a partir da introdução de uma placa adicional de controlo, consiste na utilização de uma placa que possa interferir no objecto virtual de outra placa, de modo a trocá-lo ou alterá-lo, o que viabiliza a associação de mais objectos virtuais a uma só placa, de acordo com a necessidade da aplicação. Isto permite, por exemplo, que se possa visualizar a mesma orbital mas para

orbital mas para diferentes orientações espaciais ou para diferentes distribuições de densidade electrónica.

Esta (simples) interacção, que consiste apenas na troca de uma placa de controlo, é acompanhada de som que explica as alterações visíveis no modelo, como por exemplo a variação da densidade electrónica. A inserção do som consegue-se com a modificação do *ARToolKit* para que seja executado o arquivo de áudio com o surgimento do objecto virtual quando se introduz a placa em frente à câmara.

2 Conclusões

Com o objectivo de analisar a aplicação de novas formas de interacção e de representação gráfica computacional ao ensino e aprendizagem das ciências desenvolvemos o programa *Orbitário* para o estudo de orbitais atómicas do hidrogénio. Trata-se de uma matéria com reconhecidas dificuldades de aprendizagem por parte dos alunos devido ao grau de abstracção. O trabalho encontra-se numa fase inicial de avaliação, junto de alunos de Física e de Química do primeiro ano do ensino universitário, pelo que não dispomos ainda de resultados sobre a efectiva utilidade.

A tecnologia de suporte a este trabalho foi a realidade aumentada, que permite combinar imagens reais com modelos virtuais. As vantagens são evidentes:

- É possível combinar num ambiente o melhor do grafismo bidimensional (dos manuais) com o grafismo computacional (através de modelos 3-D) apelando-se a uma utilização conjunta do livro de texto e do computador, contrariamente ao que habitualmente acontece com a utilização do software.
- A construção do ambiente gráfico fica muito mais simplificada e rápida, reduzindo-se exclusivamente ao que é essencial: os modelos que se pretendem explorar no ensino e aprendizagem.
- A tecnologia envolvida desempenha um papel muito menos dominante e distractiva para o aluno. Tal como referido por Cornu [19] “as novas tecnologias apenas estarão integradas no ensino quando elas não forem ferramentas suplementares mas sim quando elas se tornarem ‘naturais’ e ‘invisíveis’ como o telefone, o televisor e as calculadoras de bolso. As novas tecnologias só estarão realmente integradas na pedagogia quando, dessa união, surgirem novos métodos pedagógicos bem sucedidos”.

Agradecimentos

Este trabalho é co-financiado pela Fundação para a Ciência e a Tecnologia (projecto POCTI/FIS/14188/1998).

References

1. Allendoerfer, R.: Teaching the shapes of the hydrogenlike and hybrid atomic orbitals. *Journal of Chemical Education*, 67 (1990) 37-40

2. Hurwitz, C., Abegg, G., Garik, P., Nasr, R.: High school students' understanding of the quantum basis of chemistry. *Journal of Research in Science Teaching*, 34 (1998) 535-545
3. Masshadi, A.: Students' conceptions of quantum physics. In G. Welford et al. (Eds.), *Research in science education in Europe*. The Falmer Press, London (1996)
4. Fischler, H., Lichtfeldt, M.: Learning quantum mechanics. In *International Workshop in Research in Physics Learning, Theoretical Issues and Empirical Studies*, Bremen (1992)
5. Johnston, I., Crawford, K., Fletcher, P.: Student difficulties in learning quantum mechanics. *International Journal of Science Education*, 20 (1998) 427-446
6. Barton, G.: Quantum dynamics of simple systems. *Contemporary Physics*, 38 (1997) 429-430
7. Story, R.: Bridging a quantum-mechanical barrier. *IEEE Transactions on Education*, 41 (1998) 54-60
8. Brandt, S., Dahmen, H.: *The Picture Book of Quantum Mechanics*. Springer, New York (2000)
9. Redish, E., Bao, L.: Student difficulties with energy in quantum mechanics. In *AAPT Winter Meeting*, Phoenix (<http://www.physics.umd.edu/perg/cpt.html>, consultado em Outubro de 2000)
10. Rebello, N., Zollman, D.: Conceptual understanding of quantum mechanics after using hands on experiments and visualization instructional materials. In *Annual Meeting National Association for Research in Science Teaching*, Boston (<http://www.phys.ksu.edu/perg/papers/narst>, Novembro de 2000)
11. Boyce, W.: Interactive Multimedia Modules in Mathematics, Engineering, and Science. *Computers In Physics*, 11 (1997) 151-157
12. Jones, L.: Learning Chemistry through design and construction. *UniServe Science News*, 14 (1999) 3-7
13. Shotsberger, P., Vetter, C.: Teaching and learning in the wireless classroom. *Computer*, 34 (2001) 110-111
14. Johnson, A., Moher, T., Ohlsson, S., Leigh, J.: Exploring multiple representations in elementary school science education. *Proceedings of IEEE Virtual Reality 2001*, Yokohama, Japan (2001)
15. Trindade, J., Fiolhais, C., Gil, V., Teixeira, C.: Virtual environment of water molecules for learning and teaching science. *Computer Graphics Topics*, 5 (1999) 12-15
16. Dede, C.: *Educational Technology*, 35 (1995) 46-54
17. Trindade, J., Fiolhais, C., Gil, V.: Virtual Water, an application of virtual environments as an education tool for physics and chemistry. In G. Cumming, T. Okamoto, e L. Gomez (Eds.), *Proceedings of ICCE'99, 7th International Conference on Computers in Education*, Chiba, Japão, (1999) 655-658
18. Drascic, D., Paul Milgram, P.: Perceptual Issues in Augmented Reality, (http://gypsy.rose.utoronto.ca/people/david_dir/SPIE96/SPIE96.full.html, consultado em Maio de 2004)
19. Cornu, B.: New technologies: integration into education. In D. Watson e D. Tinsley (Eds.), *Integrating Information Technology into Education*. Chapman & Hall, New York (1995)