

# **Estrutura Atómica e Molecular - a ajuda do e-learning num curso introdutório à mecânica quântica**

Alexandre L. Magalhães

Universidade do Porto, Faculdade de Ciências, Porto, Portugal

## **Identificação da disciplina**

Nome: Estrutura Atómica e Molecular

Faculdade: Ciências

Ano/Semestre: 2ºano/1ºSem.

Plataforma: Moodle

Nº de Alunos: 109

## **1. Contextualização**

A *Estrutura Atómica e Molecular* é uma disciplina obrigatória do 2ºano do plano de estudos da licenciatura em Química e uma disciplina de opção do 4ºano da licenciatura em Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto, cujas características no ano lectivo 2006/2007 se encontram resumidas no Anexo1. O objectivo desta disciplina é proporcionar ao aluno conhecimentos de base sólidos sobre a estrutura da matéria que facilitar-lhe-ão a compreensão e aprofundamento de muitos outros assuntos da química e bioquímica. A interpretação dos fenómenos físicos e químicos à escala atómica e molecular exige o domínio de conceitos de mecânica quântica que são novos para os alunos e difíceis de apreender. Embora a linguagem que usamos para comunicar esteja, obviamente, bem adaptada aos fenómenos do mundo macroscópico que nos são familiares, ela revela-se ineficaz na descrição de efeitos puramente quânticos que se manifestam no mundo microscópico dos átomos e das moléculas. Esta limitação da linguagem, evidenciada pela primeira vez por Niels Bohr, dificulta o ensino da química quântica, e desafia o professor na procura constante de novas metodologias pedagógicas que despertem o interesse do aluno por estas matérias.

O programa da disciplina começa com um panorama histórico dos avanços teóricos e experimentais alcançados na viragem do século XIX, realçando, porém, a existência de factos ainda inexplicáveis à época e que constituíam uma ameaça à orgulhosa edificação da Física clássica. A procura de respostas a esses enigmas levou ao nascimento de uma nova Física, posteriormente designada por Mecânica Quântica, que tão radicalmente mudou a nossa visão do mundo real. A introdução aos fundamentos da Mecânica Quântica é de crucial importância para os estudantes, de modo a facilitar-lhes a compreensão de temáticas abordadas posteriormente na disciplina tais como a estrutura do átomo de hidrogénio, átomos polieletrónicos, ligação química e estrutura molecular, reactividade química e espectroscopia molecular (vibracional e rotacional).

Como já foi referido atrás, o ensino da mecânica quântica coloca desafios particulares pelo facto de introduzir conceitos e fenómenos que são imperceptíveis à nossa escala macroscópica. Qual então a melhor estratégia pedagógica para iniciar o estudo desta "nova" e contra-intuitiva teoria?

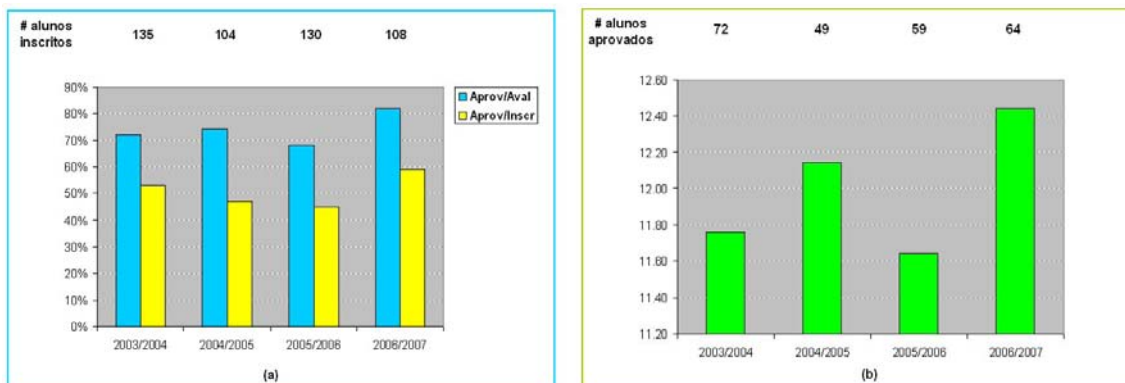
Num trabalho muito interessante, Richard Felder[1] mostrou que em muitos casos os estilos de ensino dos professores em escolas de engenharia não se compatibilizam com os estilos de aprendizagem dos estudantes. Isso pode ser verdade também no caso das ciências puras e talvez noutras áreas conhecimento. O autor divide em três categorias a forma como as pessoas recebem informações, nomeadamente visual, auditiva e cinestésica, dependendo da preferência e eficácia da aprendizagem se processar por, respectivamente, estímulos visuais (visão, fotos, diagramas, símbolos), explicações verbais (sons, palavras) e percepção sensorial (gosto, cheiro, toque, fazendo algo activo enquanto aprendem). Concluiu-se que cada pessoa tem o seu próprio sistema de aprendizagem e tende a ignorar as informações apresentadas em qualquer dos outros dois. A maioria dos estudantes na faculdade são aprendizes visuais, mas um professor deve estar consciente dos diferentes tipos de

alunos que integram um dado curso. Por isso, deve ser oferecida uma grande diversidade de elementos pedagógicos, a fim de proporcionar a adaptação a cada estilo próprio.

A curta duração de um semestre lectivo (que se traduz aqui em 42h teóricas e sensivelmente o mesmo número de aulas práticas, ver descrição da disciplina no anexo 1) não permite um grande aprofundamento metodológico e, portanto, penso que é mais útil para um futuro químico perceber a importância e utilidade da mecânica quântica através da exposição dos êxitos por ela alcançados na previsão e explicação dos fenómenos físico-químicos, e das aplicações tecnológicas que permitiu desenvolver. Neste contexto, por exemplo, o efeito de túnel, um fenómeno que não tem paralelo à nossa escala biológica, é utilizado na disciplina para explicar o decaimento radioactivo, a inversão da molécula de amoníaco, que está na base do *maser*, o precursor do *laser*, ou a importante técnica de microscopia de varrimento por efeito de túnel (STM), usada correntemente no estudo de superfícies de materiais. Mesmo antes de usar as potencialidades do e-learning, houve sempre a preocupação de proporcionar aos alunos um leque diversificado de suportes pedagógicos. Assim, o plano de estudos da disciplina inclui também 14 h de aulas de discussão e resolução de problemas, e 35 h de aulas práticas laboratoriais onde foram montados 10 trabalhos de índole diversa: 5 puramente laboratoriais e 5 puramente computacionais (ver descrição da disciplina no anexo 1). No primeiro conjunto de trabalhos os alunos podem, por exemplo, observar e medir espectros de riscas de emissão atómica do H, He, Hg e Na, interpretar e comparar a cor de compostos por espectroscopia UV/VIS de absorção e calcular a constante de Planck através de um trabalho sobre o efeito fotoeléctrico. No segundo grupo usufrui-se das crescentes capacidades gráficas e de cálculo dos actuais computadores pessoais para, em ambiente Windows e Linux, usar programas específicos de cálculo quântico e de visualização molecular que permitem interpretar e prever propriedades moleculares. Em particular, num dos trabalhos usa-se um programa interactivo especialmente concebido para este curso, *Particle in a Box*[2], baseado num modelo muito simples, versátil e didáctico que resolve a equação de Schrödinger para o caso de uma partícula em diferentes caixas de potencial. Através de uma interface agradável, o aluno pode ir mudando os valores de alguns parâmetros do sistema e visualizar imediatamente as respectivas soluções quânticas. A cada um destes 10 trabalhos corresponde um protocolo onde se apresenta uma breve introdução à matéria teórica em causa, os objectivos, execução laboratorial, bibliografia e endereços da *web* com informação útil, principalmente de bases de dados químicos. Os dados recolhidos em cada trabalho são tratados em folha de cálculo, e um relatório sucinto é elaborado na própria aula prática que inclui também respostas a algumas questões concretas que são formuladas.

Na avaliação desta disciplina nunca se apelou a um esforço de memorização e privilegiou-se sempre o relacionamento de conceitos. Assim, no material permitido para exame final sempre constou um formulário pessoal numa folha A4. O objectivo é livrar o aluno da ansiedade normalmente sentida ao tentar memorizar o elevado número de fórmulas e, por outro lado, induzir-lhe o estudo e capacidade de síntese ao permitir a elaboração desse auxiliar de memória pessoal. O exame é constituído por duas partes: um questionário geral sobre a matéria versada nas aulas teóricas da disciplina que pesa 75% para a nota final, e um questionário sobre um dos trabalhos realizados nas aulas práticas com um peso de 25%.

A figura 1 resume as estatísticas de desempenho nos últimos quatro anos lectivos, que corresponde a um período em que a disciplina apresentou aproximadamente a estrutura actual. Estes resultados mostram que nos três anos lectivos imediatamente anteriores a 2006/2007 houve uma estabilização da percentagem de aprovações da ordem de 70% no grupo de alunos avaliados, mas uma percentagem de alunos que efectivamente se submeteu a avaliação que foi diminuindo de uma forma consistente ao longo dos três anos a uma taxa aproximada de 5%. Por outro lado, a média das classificações finais oscilou bastante entre um valor mínimo de 11.64 valores em 2005/2006 e um valor máximo de 12.14 valores em 2004/2005.



**Figura1.** Estatística de desempenho da disciplina nos últimos quatro anos lectivos: (a) percentagens de aprovações nos alunos inscritos e nos alunos avaliados; (b) médias das classificações dos alunos aprovados.

## 2. Motivação

O serviço de *Aulas na Web* baseado na plataforma Moodle está disponível no Infociências desde o ano lectivo 2006/2007. Esta nova plataforma revelou-se bastante versátil nas possibilidades de manuseamento de informação e gestão de recursos e, portanto, resolvi explorar as suas potencialidades ao serviço da disciplina de Estrutura Atómica e Molecular da qual fui regente no ano lectivo 2006/2007. Quando o sistema foi divulgado, oferecia-se a possibilidade de concentrar num só sítio da *web* informação diversa, notícias e avisos relativos à disciplina, documentos e textos, imagens, animações, exercícios interactivos de auto-correcção, folhas de cálculo, fórum de discussão, etc., pelo que a minha adesão foi imediata.

As minhas expectativas iniciais eram de que os alunos viessem a aderir em massa a este novo projecto e que, por o acharem útil, fizessem deste local da *web* um instrumento de utilização intensiva. Por outro lado, esperava que a resposta dos alunos a este novo desafio viesse a criar uma dinâmica estimulante de diálogo comigo e com os colegas, e que isso se traduzisse num interesse crescente pelas temáticas versadas na disciplina.

## 3. Objectivos

Dada a versatilidade da plataforma Moodle, o objectivo principal desta vertente *web* foi o de estimular o interesse dos alunos para o estudo da constituição da matéria ao nível atómico e molecular, e fomentar a sua participação nos temas de discussão lançados nas aulas presenciais e fóruns da *web*. Como consequência, esperava-se um aumento do desempenho médio dos alunos no processo de avaliação. Outro objectivo foi o de reunir num único espaço elementos úteis ao trabalho presente e futuro tanto de alunos como de docentes. Pretendia-se, também, que o aluno viesse a usar esta componente *web* intensivamente encarando-a como mais uma ferramenta de estudo ao seu dispor através da qual poderia encontrar elementos que, pela sua natureza distinta, complementariam a aprendizagem tradicional através dos livros de texto principal [3] e complementares [4] e as aulas presenciais (teóricas e práticas).

A plataforma Moodle permite a monitorização dos acessos aos diferentes elementos do módulo *web* através da funcionalidade “Administração-Relatórios”. Deste modo foi possível consultar não só a estatística geral dos acessos mas também saber o percurso e actividades que cada aluno em particular efectuou no módulo *web*.

## 4. Modelo/Estratégia

A componente *on-line* foi encarada na perspectiva de complemento do ensino presencial ministrado tradicionalmente nesta disciplina. Pretendeu-se que ela fosse reconhecida como mais um espaço de estudo e diálogo. Desta forma, além de ser usado como um repositório de todo o tipo de informação útil ao aluno nomeadamente avisos esporádicos, sumários das aulas teóricas disponíveis no próprio dia, afixação de notas e protocolos das aulas práticas, usufruiu-se das potencialidades da plataforma para criar um fórum para questões e respostas abertas a todos. Por outro lado, optou-se por disponibilizar elementos de estudo com uma grande variedade quanto à sua forma como por exemplo textos, exames de anos anteriores, animações, vídeos, aplicações informáticas interactivas e mini-testes com auto-correcção. Toda esta informação foi sendo divulgada gradualmente ao longo do semestre, de modo a articular a actualização da componente *on-line* com a dinâmica própria das aulas teóricas e práticas, e manter viva a consulta e participação de todos. Pretendia-se, como já foi referido, que o aluno sentisse a utilidade dos elementos de estudo complementar que este espaço lhe proporcionava, e que a ele recorresse sem qualquer tipo de obrigatoriedade uma vez que nenhuma actividade realizada no *site* seria usada como elemento para avaliação final.

Alguns modelos de *e-learning* quando cobrem exaustivamente todos os assuntos de um curso correm o risco de enfraquecer a componente de contacto professor/aluno. Essa não foi a estratégia seguida para a *Estrutura Atómica e Molecular 2006/2007*. Neste caso apostou-se na complementaridade com as aulas teóricas e práticas, tocando somente aspectos da matéria que, dada a sua maior dificuldade matemática e/ou conceptual, necessitavam de abordagens alternativas às das aulas presenciais. Os elementos de estudo disponibilizados têm uma natureza diversificada (possível com os meios informáticos actuais) de modo a que o aluno possa abordar os assuntos de diferentes facetas.

The screenshot displays the web interface of the 'Estrutura Atómica e Molecular (L.BQ, L.O)' course. The header includes the Faculty of Sciences logo and the course title. The main content area is a forum titled 'Fórum social - últimos tópicos' with a 'Todos serão inscritos neste fórum' notice. It contains three posts: two about exam results (12 Feb and 26 Jan) and one about challenges (23 Oct). A small image of a person thinking is included in the third post. The sidebar on the left lists various activities like 'Horário de Atendimento', 'Aulas', 'Exercícios', and 'Exames'. On the right, there is a calendar for November 2007 and an 'Administração' section with links for notes, reports, and file management.

Figura2. Página de entrada da componente *online* da disciplina Estrutura Atómica e Molecular 2006/2007.

## 5. Organização e Implementação

Este projecto *e-learning* foi sendo construído ao longo do primeiro semestre lectivo 2006/2007, explorando as potencialidades oferecidas pela plataforma Moodle. Todos os 109 alunos inscritos na disciplina tiveram acesso integral aos conteúdos; para os visitantes ficaram disponíveis somente as funcionalidades que não estão directamente relacionadas com funcionamento interno da disciplina, como por exemplo o acesso às notas finais. Entretanto, no âmbito do concurso “Prémio Excelência e-learning UPorto” foi criada a conta *eamvisit* a que corresponde a palavra-chave: *visitante* com privilégios de aluno. A página de entrada (ver visão do administrador na figura 2 que, exceptuando algumas ferramentas de gestão, coincide com a visão do aluno) mostra no corpo central informações actualizadas e, ao lado esquerdo, uma lista das actividades disponíveis.

No módulo Sumários, o resumo de cada aula teórica pode ser consultado, e uma versão em formato pdf incluindo todos os sumários pode ser automaticamente gerada. Como já foi referido anteriormente, estes resumos foram sendo disponibilizados de forma gradual e sempre no próprio dia da aula teórica. No final de cada sumário são referidas as páginas do livro de texto principal que correspondem aos assuntos abordados (ver figura 3).

**Sumários :: Preencher**

**Estrutura Atômica e Molecular (L-BQ, L-Q) (2006/2007)**

NOTA: Para visualizar um sumário preenchido, clique na data do sumário.

Listar Sumários  
Administração  
Adicionar Sumário

Datas	Preenchidos	Tipo	Editar	Apagar	Criação
2006-12-15	✓	T			Sistema
2006-12-13	✓	T			Sistema
2006-12-11	✓	T			Sistema
2006-12-06	✓	T			Sistema
2006-12-04	✓	T			Sistema
2006-11-29	✓	T			Sistema

**Sumário:** Regras de selecção nas transições vibracionais. Momento dipolar de transição. Vibrações activas e inactivas no infra-vermelho. Regra de selecção segundo a aproximação harmónica: variação do número quântico tem de ser +1 ou -1. Influência do factor (du/dq) (variação do momento dipolar da molécula u, com a coordenada associada à vibração) na intensidade de transição. Frequência de vibração da banda fundamental. Cálculo de constantes de força de algumas moléculas diatómicas. (Pág. 475-479)

Criado em: 2006-09-11 17:10:21 Actualizado em: 2006-12-04 14:41:01 Actualizado por: almagalh

2006-11-27	✓	T			Sistema
2006-11-24	✓	T			Sistema

Figura3. Administração dos Sumários

No módulo **Dispensas**, surge a lista dos alunos que, tendo frequentado com sucesso as aulas práticas nos dois anos lectivos imediatamente anteriores obtiveram dispensa dessas aulas em 2006/2007, desde que a tenham solicitado.

Na **Ficha da disciplina**, obtém-se informação sobre as características da disciplina nomeadamente, unidades de crédito, programa, bibliografia, método de avaliação e estatística de desempenho.

A resolução de exames prévios sempre foi uma boa prática de estudo por permitir ao aluno aperceber-se do tipo de conhecimentos que são exigidos numa disciplina. No módulo **Exames** estão acessíveis em formato pdf os enunciados de alguns exames já realizados na disciplina em anos lectivos anteriores, assim como os resultados da avaliação do corrente ano lectivo.

Na actividade **Aulas** o aluno pode encontrar material essencial às aulas presenciais, designadamente o conjunto das sete folhas de problemas propostos e os protocolos dos dez trabalhos práticos laboratoriais. Além disso, são abordados tópicos que, por se saber serem de mais difícil apreensão por parte dos alunos, são apresentados de forma alternativa (ver figura 4). De facto, como foi referido anteriormente na *Contextualização*, há assuntos que os alunos costumam lidar com mais dificuldade, quer pela sua complexidade matemática quer por envolverem fenómenos quânticos que são imperceptíveis à nossa escala biológica e que, portanto, são contra-intuitivos. Nesta actividade apresentam-se abordagens alternativas tanto do ponto de vista de conteúdo como de suporte informático utilizado.

**FC FACULDADE DE CIÊNCIAS UNIVERSIDADE DO PORTO**

**Aulas » Est. Ató. e Mol. (L-BQ, L-Q) » Aulas**

Aqui são colocadas aulas da disciplina

**Inserir aula...**

Discussão	Iniciado por
Acoplamento spin-orbital	 Alexandre Lopes de Magalhães
Princípio variacional aplicado ao átomo de H	 Alexandre Lopes de Magalhães
Teoria das Orbitais Moleculares e Princípio variacional	 Alexandre Lopes de Magalhães
Efeito de túnel	 Alexandre Lopes de Magalhães
Princípio da Correspondência	 Alexandre Lopes de Magalhães
POSTULADOS DA MECÂNICA QUÂNTICA	 Alexandre Lopes de Magalhães
Experiência da fenda dupla : por onde passa o electrão?	 Alexandre Lopes de Magalhães
A EMERGÊNCIA DA MECÂNICA QUÂNTICA	 Alexandre Lopes de Magalhães
FOLHAS DOS TRABALHO PRÁTICOS	 Alexandre Lopes de Magalhães
FOLHAS DOS EXERCÍCIOS DAS AULAS TP	 Alexandre Lopes de Magalhães
INTRODUÇÃO À DISCIPLINA	 Alexandre Lopes de Magalhães

**Figura4.** Lista dos elementos disponibilizados na actividade **Aulas**.

A figura 5 mostra dois exemplos ilustrativos. Um é o caso paradigmático do tratamento do efeito de túnel. Este efeito puramente quântico revela-se à escala atómica e consiste na transposição de uma barreira que uma partícula encontra no seu percurso mesmo que esta possua energia inferior à da barreira. O efeito de túnel é, de facto, um fenómeno que o aluno ou qualquer pessoa tem muita dificuldade em compreender, pois equivaleria a reconhecer que um esquiador que começa a descer uma encosta conseguirá atingir uma cota mais elevada do que aquela de onde partiu. Nesta entrada, além de deduzir os resultados matemáticos e fórmulas envolvidas, mostram-se também exemplos da importância deste fenómeno, como por exemplo a importantíssima aplicação tecnológica usada hoje em dia no estudo de superfícies de materiais e que é a microscopia de varrimento por efeito de túnel (STM). Outro elemento desta actividade é uma animação bastante didáctica da célebre experiência da passagem de um feixe de electrões através de uma fenda dupla e os fenómenos de interferência que são observados, mostrando desta forma que os “corpúsculos” electrões apresentam também características de natureza ondulatória (ver imagem em último plano da figura5).





**Figura5.** Detalhes de dois exemplos de material complementar disponível no módulo **Aulas**.

Na actividade **Exercícios** propõem-se actividades de apoio ao estudo com recurso a variadas aplicações interactivas (ver figura6). Neste tipo de exercícios o aluno pode alterar o valor de parâmetros importantes de um sistema quântico em estudo e visualizar imediatamente o resultado, o que permite ganhar sensibilidade para a influência desses parâmetros nas soluções quânticas. Os tópicos abordados foram seleccionados de acordo com a dificuldade que geralmente os alunos apresentam nas aulas presenciais. Pretendeu-se usufruir das vantagens que um tratamento informático pode acrescentar ao processo de aprendizagem e, portanto, privilegiaram-se as aplicações rápidas, de aspecto gráfico claro e de utilização intuitiva.

FC FACULDADE DE CIÊNCIAS UNIVERSIDADE DO PORTO	
Aulas » Est. Ató. e Mol. (L.B.O, L.O) » Exercícios	
Aqui são colocados todos os exercícios da disciplina	
Discussão	Iniciado por
VIBRAÇÕES MOLECULARES	Alexandre Lopes de Magalhães
Atomo de H - Visualização de orbitais	Alexandre Lopes de Magalhães
Lei de Planck da radiação do corpo negro	Alexandre Lopes de Magalhães
Probabilidade de túnel	Alexandre Lopes de Magalhães
PARTÍCULA NA CAIXA (software)	Alexandre Lopes de Magalhães
TABELA DE FÓRMULAS E INTEGRAIS	Alexandre Lopes de Magalhães

**Figura6.** Lista de elementos do módulo **Exercícios**.

Não querendo ser exaustivo na exposição dos elementos propostos nesta actividade seguem-se somente três exemplos ilustrativos. Na entrada *Probabilidade de túnel* apresenta-se uma folha de cálculo onde é determinada a probabilidade de partículas penetrarem uma barreira de potencial que encontram no seu caminho (aqui tratado a uma única dimensão para simplificar o modelo). Neste exercício o aluno pode variar a largura e potencial da barreira, e também a massa da partícula que choca com a barreira. A aplicação mostra automaticamente um gráfico comparativo do valor da probabilidade de túnel em função da energia cinética para duas partículas cujas massas são definidas pelo aluno em unidades de massa atómica (ver figura 7).

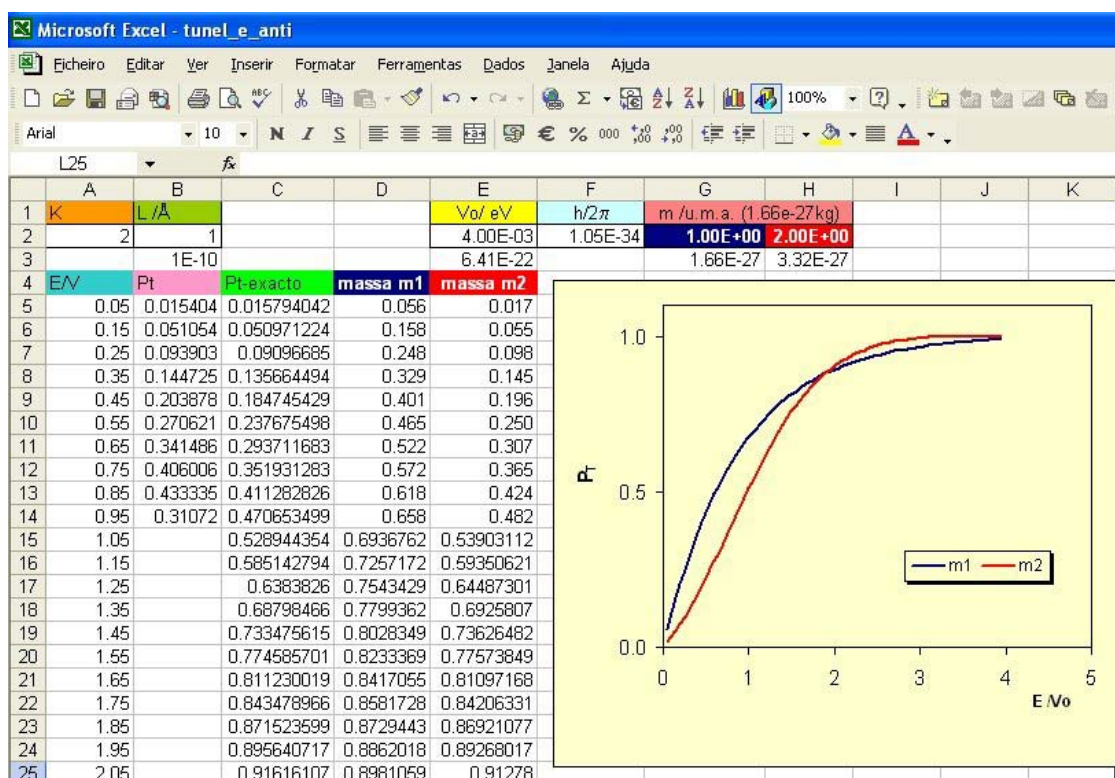


Figura7. Detalhe da folha de cálculo da entrada *Probabilidade de túnel* da actividade **Exercícios**.

A abordagem dos modos de vibração molecular, apesar de não constituir um tema particularmente difícil para os alunos, pode beneficiar muito de animações que evidenciem os distintos modos normais de vibração que uma molécula pode possuir. Assim, na entrada *Vibrações moleculares*, são colocadas questões relacionadas com este assunto e que são acompanhadas dos modos de vibração animados de algumas moléculas simples (ver figura 8). As imagens animadas permitem identificar as alterações estruturais que estão em jogo num dado modo de vibração e, portanto, facilita a selecção dos modos que são activos em espectroscopia de infra-vermelho e a avaliação do efeito de substituição isotópica nos valores das frequências de vibração.



FC FACULDADE DE CIÊNCIAS UNIVERSIDADE DO PORTO

Estrutura Atômica e Molecular (L-BO, L-O)

Aulas » Est. Ató. e Mol. (L-BO, L-O) » Fóruns » Exercícios » VIBRAÇÕES MOLECULARES

Mostrar respostas em forma hierárquica

Procurar nos fóruns


Mover esta discussão para...

**VIBRAÇÕES MOLECULARES**  
por Alexandre Lopes de Magalhães - Sexta, 6 Outubro 2006, 23:03

Recorde o modelo do oscilador harmónico que permite descrever a modo como as moléculas vibram. Com base neste modelo responda às seguintes questões:

1. Na molécula diatómica HF, se o prótio for substituído por um deutério a energia do ponto zero (ZPE) diminui. Porquê?

$^1\text{HF}$        $^2\text{HF}$



$E_{\text{ZPE}} = 24768 \text{ Jmol}^{-1}$     $E_{\text{ZPE}} = 17940 \text{ Jmol}^{-1}$

2. Qual é o nome de cada um dos modos normais de vibração da molécula de água apresentados abaixo?

a)  $1595 \text{ cm}^{-1}$  b)  $3652 \text{ cm}^{-1}$  c)  $3756 \text{ cm}^{-1}$




Figura8. Detalhe do exercício dinâmico sobre vibrações moleculares.

Na entrada *Partícula na caixa (software)*, pode ser carregado localmente um programa interativo que corre em ambiente Windows, designado *Particle in a Box* [2], e que foi especialmente concebido para esta disciplina (ver figura 9). Esta aplicação é baseada no modelo teórico com o mesmo nome que permite a resolução da equação de Schrödinger para o caso de uma partícula em diferentes caixas de potencial. Este modelo, por ser muito simples e versátil, é profusamente usado em livros de texto de introdução à mecânica quântica. Ao conciliar o seu mérito didáctico com as potencialidades gráficas e de cálculo de um computador pessoal, pretendemos obter um poderoso meio de estudo de iniciação à linguagem da mecânica quântica.

FC FACULDADE DE CIÊNCIAS UNIVERSIDADE DO PORTO

Aulas » Est. Ató. e Mol. (L-BO, L-O) » Fóruns » Exercícios » PARTÍCULA NA CAIXA (software)

Listagem de respostas, com a mais velha primeiro

**PARTÍCULA NA CAIXA (software)**  
por Alexandre Lopes de Magalhães - Terça, 20 Março 2007, 09:48

Part\_in\_Box.exe

O ficheiro em anexo é um programa que corre em Windows, não requer instalação (basta copiá-lo) e a resolução recomendável do ecrã é de 1024 por 768 pixels.

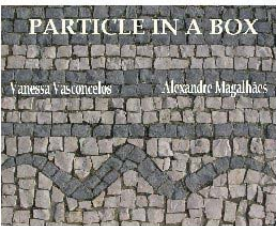
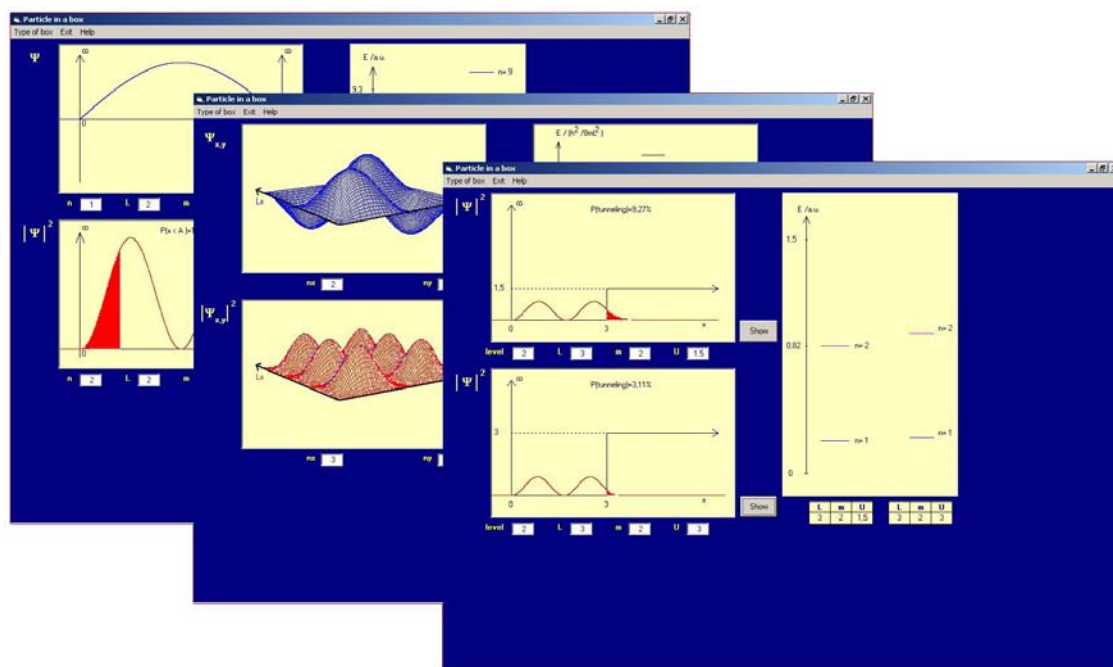


Figura9. Programa *Particle in a Box* disponível na actividade Exercícios.

Assim, através de uma interface gráfica simples e clara, o aluno pode ir mudando os valores de alguns parâmetros do sistema e visualizar imediatamente as respectivas soluções quânticas (ver figura 10).



**Figura10.** Alguns exemplos do ambiente gráfico apresentado pelo programa *Particle in a Box*.

O aluno tem à escolha três poços de potencial distintos cujas funções de onda e respectivas energias resultantes da resolução da equação de Schrödinger são apresentadas graficamente, e têm a capacidade de revelar conceitos puramente quânticos. Por exemplo, no poço de potencial unidimensional com ambas as paredes infinitas o aluno pode constatar a quantificação da energia permitida ao sistema e a existência de pontos nodais na função de onda. Além disso, pode observar o efeito nas soluções de variações nos valores do número quântico principal, comprimento da caixa e massa da partícula (ver ambiente gráfico em último plano da figura 10). Por outro lado, o poço de potencial com uma das paredes finitas permite ao aluno introduzir os valores das variáveis massa da partícula, comprimento da caixa e potencial da parede finita, para os quais a probabilidade de penetração por efeito de túnel é calculada (ver ambiente gráfico em primeiro plano da figura 10). O programa apresenta gráficos comparados das funções de onda, energias permitidas e probabilidade de túnel para dois conjuntos de valores, de modo a facilitar a compreensão do efeito das variáveis nas soluções da equação de Schrödinger. A extrapolação do modelo de paredes infinitas para o caso bidimensional é também abordado de modo a permitir introduzir o conceito de funções de onda degeneradas, isto é, funções distintas mas que apresentam a mesma energia (ver ambiente gráfico intermédio da figura 10). Este programa apresenta ainda uma opção de *Help* onde é apresentado um resumo do formalismo matemático para cada poço.

Na actividade **Fórum da disciplina** lançaram-se seis desafios aos alunos na forma de problemas ou questões de solução simples mas não imediata, e que ajudam a consolidar conceitos abordados nas aulas teóricas. As minhas respostas e as dos alunos eram disponibilizadas a todos os participantes, se assim eu achasse conveniente e útil a todos. Pretendia-se que este fórum viesse ainda a funcionar como uma espécie de FAQ (*frequently asked questions*) pois existem dúvidas comuns que os alunos sentem perante certos assuntos. Como exemplo refira-se uma questão relacionada com um dos trabalhos práticos, nomeadamente o do espectro de emissão do hidrogénio, e cujo resultado se encontra na figura 11.



Figura11. Detalhes do Fórum da disciplina no caso do Desafio3-Espectro de emissão do hidrogénio.

Durante o semestre, e coordenado com o ritmo de exposição dos assuntos nas aulas teóricas, foram sendo lançados na componente *web* seis mini-testes de escolha múltipla e com auto-correcção posterior. Apesar dos resultados não contribuírem para avaliação final, os alunos foram aconselhados a participar de modo a irem testando os seus conhecimentos ao longo do período lectivo. A administração desta actividade permite saber quem respondeu, quando e que nota obteve, além de ser possível consultar as estatísticas gerais do mini-teste. Na figura 12 é mostrado um exemplo da estatística de desempenho do primeiro mini-teste.

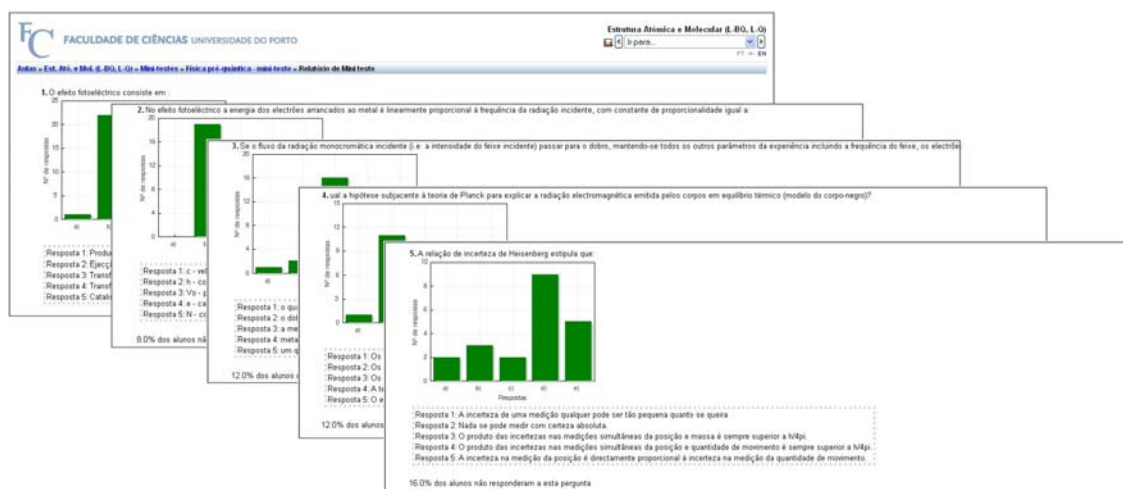


Figura12. Estatística de desempenho no mini-teste sobre Física pré-quântica.

## 6. Resultados

Até ao final de Julho de 2007 foram contabilizados 16895 acessos às actividades da componente *web*. Todos os 109 alunos inscritos na disciplina usaram esta ferramenta o que dá uma média aproximada de 150 acessos por aluno. Obviamente, a participação foi muito heterogênea e concentrada no período lectivo que foi de 11 de Setembro de 2006 até à data do último exame a 7 de Fevereiro de 2007 (ver figura 13). O gráfico evidencia alguns picos de acesso atingidos em pontos críticos do semestre e que têm uma explicação lógica. Assim, o primeiro pico a 16 de Novembro coincide com a divulgação dos primeiros exercícios e desafios no fórum da disciplina. Os alunos, depois de tomarem conhecimento nas aulas presenciais de que esses elementos de estudo iriam ser disponibilizados, sentiram curiosidade o que provocou um pico de acesso. O pico seguinte, sensivelmente a 12 de Dezembro, é causado pela disponibilização dos enunciados de exames da disciplina de anos anteriores, uma vez que o período de aulas se aproximava do seu final a 16 de Dezembro. O número de acessos manteve-se então relativamente baixo até subir novamente durante a época de exames. O exame da época normal realizou-se a 18 de Janeiro de 2007 e, portanto, verificou-se um pico nos dias que o antecederam; o exame da época de recurso realizou-se a 7 de Fevereiro, verificando-se um último pico sensivelmente uma semana mais tarde para consulta dos resultados. Após esse período, como seria de esperar, os níveis de acesso caíram para valores residuais causados fundamentalmente por visitantes anónimos. A figura 14 mostra os acessos para o mesmo período mas segmentado nas quatro actividades **Exercícios**, **Fórum da disciplina**, **Aulas** e **Exames**, onde os picos de acesso acima mencionados são novamente encontrados. No caso particular da actividade **Aulas**, verifica-se um interesse constante dos alunos no primeiro mês do semestre, causado pela curiosidade nos novos elementos de estudo, que decresce para um valor médio constante até ao fim do período mas com carácter intermitente. Houve um total de 586 acessos aos seis mini-testes, o que mostra que praticamente todos os 109 alunos visitaram este tipo de actividade. Surpreendentemente, houve apenas 118 respostas validadas, o que revela, por outro lado, que os alunos sentiram curiosidade pelos mini-testes, provavelmente para tomarem conhecimento do tipo de questões, mas não se sentiram à vontade para validarem as respostas, apesar de saberem que estes resultados não seriam contabilizados na avaliação final.

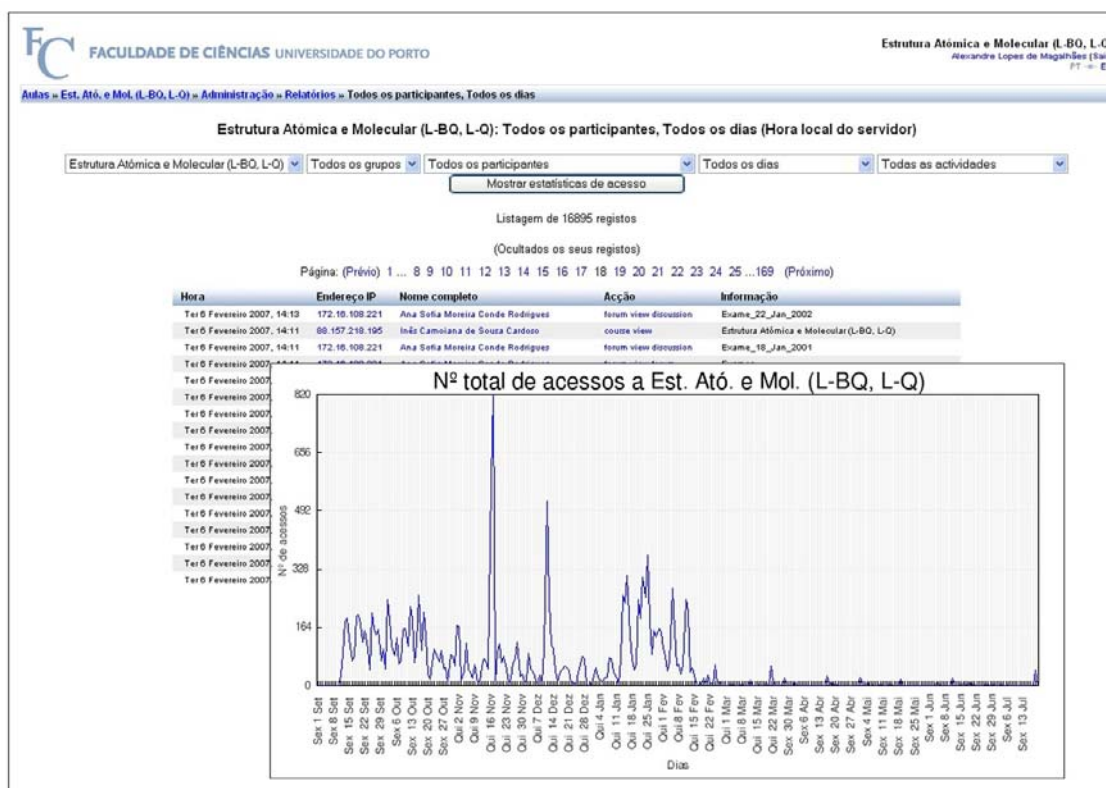
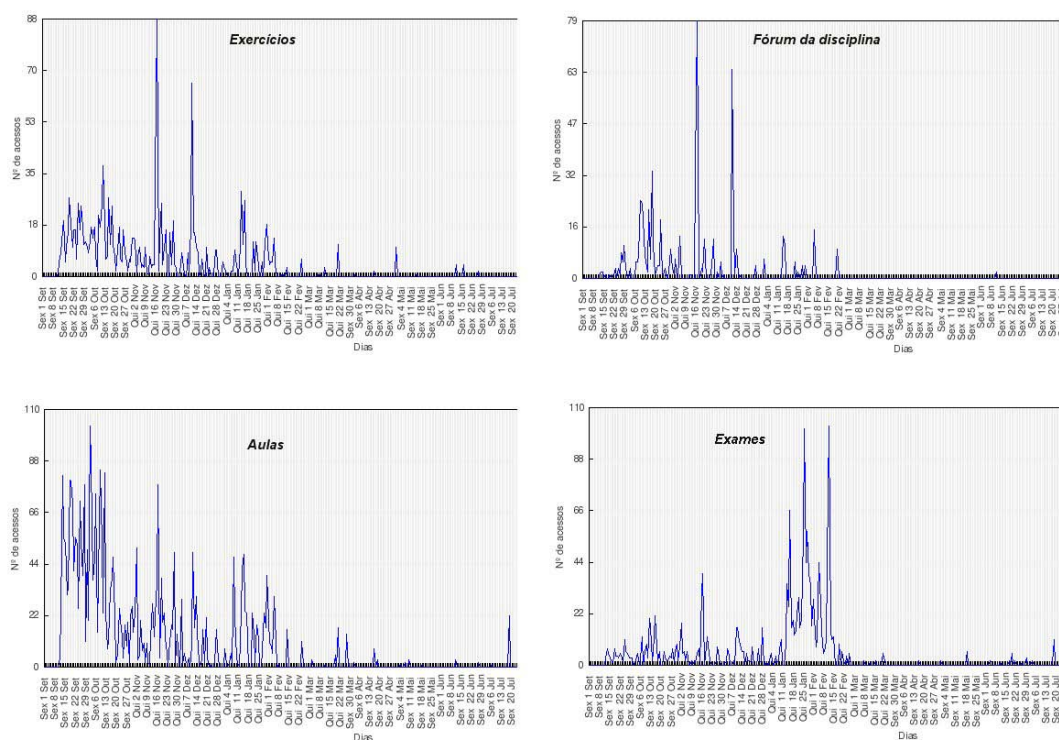


Figura13. Resumo do relatório de acesso de todos os participantes a todas as actividades até Julho de 2007.



**Figura14.** Relatórios de estatística de acesso desde o início do semestre até Julho de 2007 referentes às actividades *Exercícios*, *Fórum da disciplina*, *Aulas* e *Exames*.

## 7. Conclusão

Apesar de ter havido experiências anteriores na utilização de e-learning para apoio a esta disciplina, foi somente no ano lectivo 2006/2007 que se criou uma componente *web* com consistência e sofisticação mercê das potencialidades da plataforma Moodle que, pela primeira vez, foi disponibilizada pelo serviço *Aulas na Web* do Infociências. Este facto levou-me, como docente, a desenvolver e adaptar elementos de estudo para a componente *web* que conseguissem motivar os alunos a participar e cativá-los para estes assuntos da química quântica, considerados geralmente como exotéricos. O objectivo último da componente *web* foi, portanto, o de aumentar o interesse do aluno pelos assuntos do programa da disciplina. Tomei-a sempre como instrumento didáctico de apoio e complemento às aulas presenciais. Assim, em vez de acumular demasiada informação que pudesse de alguma forma contribuir para o esvaziamento das aulas presenciais, privilegiei a disponibilização de elementos de estudo alternativos que complementassem a abordagem dos assuntos feita nas aulas e nos livros de texto. A componente *online* revelou-se também muito útil como local de repositório e organização de todo o tipo de informação e documentos essenciais ao bom funcionamento da disciplina. Foram disponibilizados cerca de quarenta documentos em formato pdf, três vídeos/animações, duas folhas de cálculo, seis mini-testes e um programa próprio desenvolvido para esta disciplina e designado *Particle in a Box* [2].

Comparando as estatísticas de desempenho da disciplina no ano lectivo 2006/2007 com as dos três anos imediatamente anteriores (ver figura 1) verifica-se que houve um aumento na percentagem de alunos aprovados que se submetem à avaliação (82%). Considerando todo o universo dos alunos inscritos, a percentagem de aprovações subiu para 59%, contrariando desta forma a tendência de diminuição sistemática nos últimos três anos e que atingira os 45% em 2005/2006. Um rápido teste estatístico às proporções amostrais revela que estes aumentos no ano lectivo 2006/2007 são considerados significativos, com valores-p inferiores a 2%, e, portanto, não são explicados por fenómenos aleatórios. Além disso, também é gratificante verificar que a média das classificações dos alunos aprovados subiu consideravelmente para 12.44 valores. Estes resultados sugerem,



portanto, que houve causas para a efectiva melhoria do desempenho dos alunos neste ano lectivo a que, espero, a componente *web* não tenha sido alheia.

A sensação que ficou no final do semestre é de que, em geral, a componente *web* foi bem recebida por parte dos 109 alunos inscritos, tendo sido contabilizados 16895 acessos às diversas actividades até final de Julho de 2007. Este número revela, sem dúvida, curiosidade dos alunos por esta nova ferramenta de estudo mas não se reflecte na participação efectiva que, sinceramente, esperava que fosse maior. Por exemplo, apesar dos 586 acessos aos seis mini-testes houve apenas 118 respostas validadas. Este resultado mostra que praticamente todos os 109 alunos sentiram curiosidade em visitar esta actividade mas, por outro lado, não se sentiram suficientemente seguros para validarem as respostas, apesar de saberem que estes resultados não seriam contabilizados na avaliação final. Outro exemplo de participação que ficou aquém das minhas expectativas foi na actividade *Fórum da disciplina*. De facto, apesar de terem sido contabilizados cerca de 600 acessos a esta actividade, eles representam na sua esmagadora maioria visitas passivas, pois somente três alunos colocaram opiniões e questões abertas em dois dos seis desafios propostos.

A experiência com a gestão da componente *web* desta disciplina foi muito positiva para mim, e facilitou, sem dúvida o funcionamento da disciplina e o contacto com os alunos. Além de usarem a via *email* para me contactarem, muitas vezes, no final das aulas teóricas, os alunos colocavam-me pessoalmente questões e sugestões sobre as actividades disponibilizadas *online*. O suporte Moodle revelou-se um instrumento de apoio muito importante e poderoso e, portanto, tenciono no futuro completar e melhorar actividades já apresentadas. Será necessário também criar incentivos que levem a um aumento da participação activa dos alunos particularmente nas actividades *Fórum da disciplina* e *mini-testes*.

## 8. Bibliografia

- [1] a) Felder, R.M., Silverman, L.K.: Learning and teaching styles in engineering education. *Engineering Education* (1988) 78, 7, 674-681; b) Felder, R. M.: Active-inductive-cooperative learning - An instructional model for chemistry? *Journal of Chemical Education* (1996) 73, 9, 832-836.
- [2] Magalhães A.L., Vasconcelos V.P.S.: Particle in a Box - software for computer-assisted learning in introductory quantum mechanics courses. *European Journal of Physics* (2006) 27, 1425-1435.
- [3] Atkins P.W.: Physical Chemistry, 6ed, Oxford Univ. Press, Oxford (1998)
- [4] a) Levine I.N.: Physical Chemistry, McGraw-Hill, NewYork (1995); b) Teixeira-Dias J.J.C.: Química Quântica-Fundamentos e métodos, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa (1982); c) Gil, V.M.S.: Orbitais em átomos e moléculas, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa (1996).



## Anexo1

A informação contida neste anexo complementa o documento principal *Estrutura do Caso de Estudo do Projecto: Estrutura Atómica e Molecular - a ajuda do e-learning num curso introdutório à mecânica quântica*.

Disciplina: **Estrutura Atómica e Molecular**

Código da disciplina: **42762**

Código do docente: **202640**

Ano lectivo: **2006/2007**

Escolaridade semanal: **3T** (aulas teóricas), **2.5P** (aulas práticas), **1TP** (aulas teórico-práticas)

Componentes lectivas: **T** – Alexandre L. Magalhães

**TP** – Pedro A. Fernandes

**P** – André S. Melo

**e-learning** - Alexandre L. Magalhães

Acesso à componente *on-line*: Qualquer visitante tem acesso parcial aos conteúdos. Contudo, no âmbito deste concurso “Prémio excelência e-learning UPorto” foi criada uma conta especial com privilégios de aluno. Para aceder à componente *web* da disciplina deve ser usado o seguinte endereço: <http://elearning.fc.up.pt/aulasweb0607/login/index.php>, e entrar com o Nome de utilizador: **eamvisit** e palavra-chave: **visitante**. Algumas funcionalidades podem por vezes não funcionar se o acesso for efectuado fora do subdomínio fc.up.pt.

## Resumo do programa

### - Aulas teóricas : 42h

1. Dificuldades da Física pré-quântica na descrição de certos fenómenos.
  - 1.1. Introdução
  - 1.2. Radiação do corpo-negro
  - 1.3. Hipótese da quantificação da energia
  - 1.4. Dualidade onda-partícula
2. A linguagem da Mecânica Quântica (M.Q.).
  - 2.1. Introdução - Operadores e outros tópicos matemáticos
  - 2.2. Equação de Schrödinger; Hamiltoniano e Função de Estado
  - 2.3. O Princípio de Incerteza de Heisenberg
  - 2.4. Interpretação de Born da Função de Estado
  - 2.5. Características gerais de uma Função de Estado
  - 2.6. Postulados da M.Q.
  - 2.7. Aplicações didácticas da equação de Schrödinger
3. Átomo de Hidrogénio
  - 3.1. Revisão das suas propriedades e estrutura electrónica.
  - 3.2. Relacionamento dessas propriedades com as soluções encontradas pela M.Q.
  - 3.3. Regras de selecção nas transições electrónicas
  - 3.4. Spin electrónico
  - 3.5. Acoplamento spin-orbital
  - 3.6. Estrutura fina do espectro de emissão
  - 3.7. Diagramas de Grotrian
4. Átomos polieletrónicos
  - 4.1. Aproximação orbital
  - 4.2. Revisão das suas propriedades e estrutura electrónica (energias orbitais, energia electrónica total, configuração electrónica, energia de ionização, afinidade electrónica)
  - 4.3. Impossibilidade de soluções analíticas da equação de Schrödinger
  - 4.4. Soluções apresentadas pela M.Q.
  - 4.5. Modelos para a resolução numérica equação de Schrödinger
  - 4.6. Correlação electrónica
  - 4.7. Transições electrónicas

- 4.8. Termos electrónicos
- 5. Estrutura Molecular
- 5.1. Aproximação de Born-Oppenheimer
- 5.2. Curvas, superfícies e hipersuperfícies de energia potencial
- 5.3. Teoria das Orbitais Moleculares
- 5.4. Modelo de combinação linear de orbitais atômicas (LCAO)
- 5.5. Molécula de  $H_2^+$
- 5.6. Moléculas diatômicas homonucleares
- 5.7. Moléculas diatômicas heteronucleares
- 5.8. Orbitais híbridas
- 5.9. Princípio Variacional.
- 5.10. Método das orbitais moleculares de Hückel
- 6. Espectroscopia
- 6.1. Interação entre matéria e radiação electromagnética
- 6.2. Espectro vibracional
- 6.3. Espectro rotacional
- 6.4. Aplicações da espectroscopia em química e astrofísica
- 7. Modelos Teóricos em Química Computacional
- 7.1. Importância do computador para um químico
- 7.2. Alguns métodos de cálculo de propriedades moleculares e suas aplicações

### - Aulas práticas : 35h

O número máximo de alunos em cada aula prática é 15, e estes são distribuídos por cinco grupos fixos ao longo do semestre de não mais de 3 elementos. Os trabalhos realizados são os seguintes:

- I - Efeito fotoelétrico (*montagem laboratorial*)
- II - Partícula na caixa (*programa de computador*)
- III - Espectro atômico monoelétrico - H (*montagem laboratorial*)
- IV - Espectro atômico polieletrónico - He, Hg (*montagem laboratorial*)
- V - Espectro electrónico de sistemas conjugados (*montagem laboratorial*)
- VI - Estrutura fina do espectro de emissão do Na (*montagem laboratorial*)
- VII - Estudo quântico de vibrações moleculares em espécies químicas (*programa de computador*)
- VIII - Estudo de superfícies de potencial em sistemas moleculares conformacionalmente flexíveis (*programa de computador*)
- IX - Estudo quântico de reacções de associação molecular (*programa de computador*)
- X - Estudo quântico de sistemas conjugados planares usando o método de Hückel (*programa de computador*)

No laboratório estão montados simultaneamente os cinco trabalhos, e cada grupo executa um diferente por aula. Nos trabalhos de índole puramente computacional cada trabalho é realizado simultaneamente por todos os alunos numa sala equipada com dezasseis computadores pessoais. Os trabalhos são finalizados com a elaboração de um pequeno relatório por grupo onde se tratam os resultados obtidos e se responde a algumas questões relacionadas com o trabalho. Os protocolos dos trabalhos são previamente disponibilizados aos alunos na componente *web* da disciplina.

### - Aulas teórico-práticas : 14h

Nestas aulas o número máximo de alunos é 35. Este é um tipo de aula de acompanhamento onde a única hora semanal é utilizada para discutir questões e esclarecer dúvidas relacionadas com as sete folhas de problemas propostos e que são previamente disponibilizados aos alunos na componente *web* da disciplina.

## Normas de avaliação

O exame final é constituído por duas partes:

Parte I : Questionário geral sobre a matéria versada nas aulas teóricas da disciplina e que tem um peso de 75% para a nota de exame.

Parte II : Questionário sobre um dos trabalhos realizados nas aulas práticas e que tem um peso de 25% para a nota de exame.

A nota final é aferida com informação contínua obtida nos trabalhos práticos.

Material permitido para o exame:

Calculadora de bolso

Tabela periódica

Formulário pessoal numa folha A4 (2páginas)

## Bibliografia aconselhada

**Texto principal:** Atkins P.W.: Physical Chemistry, 6ed, Oxford Univ. Press, Oxford (1998)

**Textos complementares:** **a)** Levine I.N.: Physical Chemistry, McGraw-Hill, NewYork (1995); **b)** Teixeira-Dias J.J.C.: Química Quântica-Fundamentos e métodos, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa (1982); **c)** Gil, V.M.S.: Orbitais em átomos e moléculas, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa (1996).