

A INFORMÁTICA NO ENSINO: I. PROJEÇÕES DE GEOMETRIAS CRISTALINAS.

Léo Degève

Departamento de Química — FFCL de Ribeirão Preto - USP
Av. Bandeirantes, 3900; 14049-Ribeirão Preto (SP).

Recebido em 12/8/87

ABSTRACT

A program written in BASIC for IBM/PC compatible microcomputers to project elementary cells in a plane is presented. The elementary simple, body-centered, face-centered, tetrahedral and octahedral cells are accepted as well as the definition of the reticular parameters. One and two components cells may be shown. The atomic radius and a perspective parameter are defined by the user. The elementary cells may be tridimensionally rotated with the aid of the keyboard and the cartesian coordinates of the cell points may be listed. The Miller indices of the vision axe are given in the case of the cubic be used.

INTRODUÇÃO

A representação de figuras tridimensionais sempre apresenta sérias dificuldades para a maioria dos estudantes que se defrontam com a definição de estrutura cristalina, de geometria molecular ou de geometria de complexos. A procura e a enumeração dos elementos de simetria é ainda mais complicada. Os modelos tridimensionais e as projeções bidimensionais ajudam muito na elucidação destes problemas. Atualmente, os microcomputadores, já largamente difundidos, oferecem um recurso didático extra no sentido de se visualizar mais facilmente as projeções de qualquer forma geométrica bem como as alterações que ocorrem na projeção quando a forma geométrica é examinada sob diferentes ângulos. A definição e a localização dos elementos de simetria tais como eixos de rotação e planos de simetria tornam-se assim quase que imediatas. A seguir será apresentado o uso de um programa, desenvolvido para equipamentos compatíveis com os microcomputadores IBM-PC, que permite gerar e projetar algumas formas cristalinas simples.

INICIALIZAÇÃO

O programa apresentado é inicializado pelo fornecimento das informações sobre a manipulação das figuras que aparecerão na tela. Em seguida, o tipo de forma

geométrica é escolhido entre as seguintes opções: corpo simples, corpo centrado, face centrada, estrutura tetraédrica e estrutura octaédrica. Uma outra opção é a escolha de estruturas constituídas por pontos idênticos (AA) ou por 2 tipos de pontos (AB). No caso de se escolher uma estrutura simples com opção AB, ela será do tipo KCl (que é uma estrutura "pseudo cúbico simples"). Ao se escolher uma estrutura de face centrada com opção AB, automaticamente será apresentada a estrutura do tipo pechblenda (com a escolha dos parâmetros reticulares).

No presente programa, as figuras geométricas são obtidas a partir de paralelepípedos de oito vértices onde deverão ser escolhidos os valores de três ângulos e os comprimentos de três arestas sendo que no caso do sistema cúbico, os parâmetros reticulares são automaticamente selecionados.

DESENVOLVIMENTO

A projeção da figura é apresentada na tela onde as partículas aparecem com um raio que é inversamente proporcional à sua distância em relação ao observador. Tanto a profundidade de campo como o raio das partículas podem ser modificados a qualquer momento usando-se a tecla <M>. A rotação da figura geométrica é efetuada através das teclas X, Y, Z (rotação de 10° no sentido trigonométrico), A, B, C (rotação de 10° em sentido oposto), 1, 2, 3 (rotação de 1° no sentido trigonométrico) e 7, 8, 9 (rotação de 1° oposto). As novas coordenadas são então calculadas e a figura geométrica aparece na tela com a sua nova orientação. Através da tecla <P> é possível listar as coordenadas cartesianas atuais de todos os átomos da célula elementar. Afim de facilitar a compreensão das projeções, os índices de Miller da direção de observação são indicados no canto inferior esquerdo da tela se a célula elementar escolhida pertencer aos sistemas cúbico simples, de corpo centrado ou de face centrada. Estes índices que poderão apresentar valores fracionários são também os índices de Miller dos planos reticulares paralelos ao plano da tela. Caso se deseje reproduzir as figuras em uma impressora basta pressionar simultaneamente as teclas <SHIFT> e

<PR SC> (ou o par de teclas definido pelo fabricante do equipamento) após introduzir o utilitário GRAPHICS. As figuras 1, 2 e 3 mostram uma projeção de um cubo de face centrada, um cubo de face centrada visto pela direção [1 1 1] e a estrutura do KCl respectivamente. A sequência de análise de uma figura geométrica é interrompida apertando-se qualquer outra tecla reiniciando-se o programa. O quadro 1 resume as opções disponíveis.

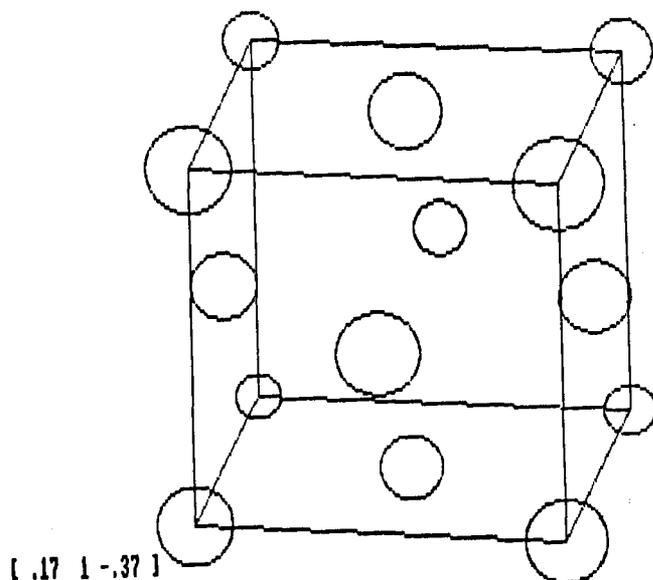


Figura 1. Uma projeção de um cubo de face centrada.

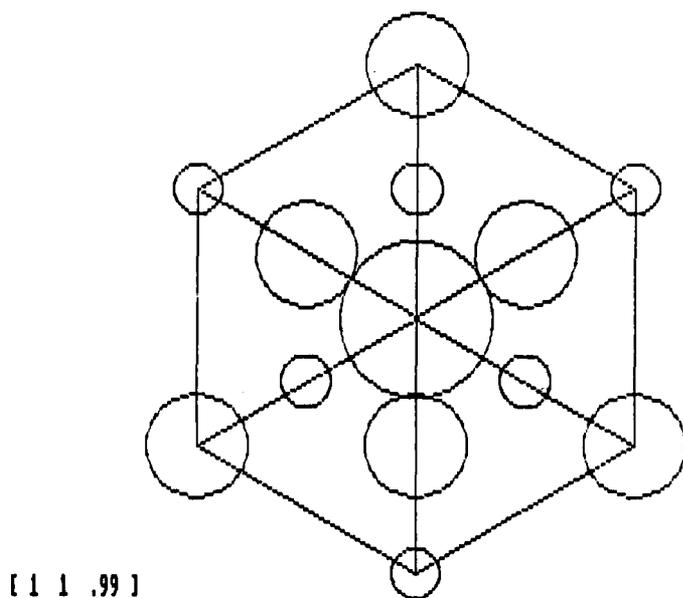


Figura 2. Cubo de face centrada visto da direção [111].

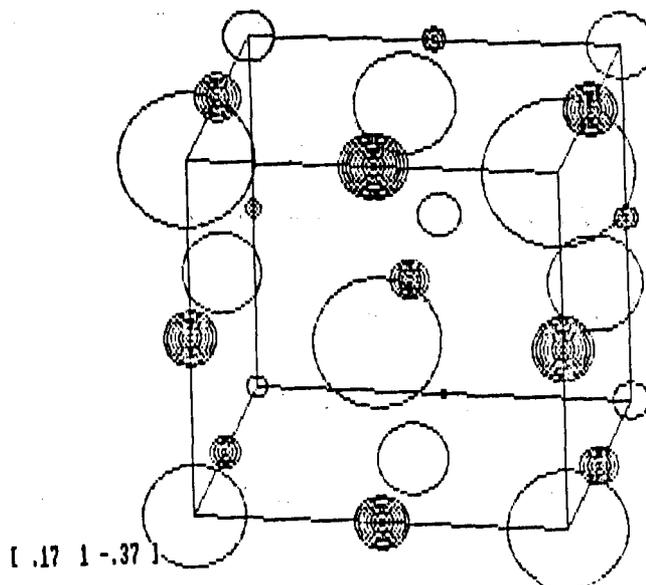


Figura 3. Estrutura do KCl.

Quadro 1 Opções do programa.

I. Opções iniciais.

- Estrutura: célula elementar simples, de corpo centrado, de face centrada, tetraédrica ou octaédrica.
- Células constituídas por átomos idênticos (AA) ou diferentes (AB).
- Raio dos círculos.
- Profundidade de campo.
- Parâmetros reticulares.

II. Opções automáticas.

- Escolha do sistema cúbico.
- Célula elementar simples com a opção AB resulta em estrutura do tipo do KCl.
- Célula elementar de face centrada com a opção AB resulta em estruturas do tipo da pechblenda.
- Indicação na tela dos índices de Miller da direção de observação se a célula elementar for cúbica simples, de corpo centrado ou de face centrada.

III. Opções de rotação.

- Teclas X, Y e Z: rotação de 10° em torno do eixo correspondente.
- Teclas A, B e C: idem para rotações de -10°.
- Teclas 1, 2 e 3: idem para rotações de 1°.
- Teclas 7, 8 e 9: idem para rotações de -1°.

IV. Outras opções.

- <M>: modificação do raio das partículas e do parâmetro de profundidade de campo.
- <P>: impressão na tela das coordenadas atuais dos átomos da célula elementar.
- <...>: reiniciação do programa através da introdução de qualquer outro símbolo.

EXTENSÃO DO PROGRAMA E TEMPO DE RESPOSTA

Para maior rapidez, é aconselhável compilar o programa. Se a compilação for efetuada com o Microsoft Basic Compiler gráfico com as opções /E e /O usando BASCOM.LIB² o programa executável ocupará 51.072 bytes. Neste caso uma rotação com um sistema de 8 pontos demora 0,65s e com um sistema de 14 pontos 1,1s aproximadamente.

CONCLUSÃO

A grande popularização dos computadores de uso pessoal oferece novos recursos, entre os quais os recursos gráficos, que deverão no futuro próximo modificar radicalmente as técnicas de ensino. De fato, esta instrumentação coloca ao alcance do professor e ao mesmo tempo ao alcance dos seus estudantes uma ferramenta

de grandes potencialidades que obriga ambas as partes a participar ativamente da aprendizagem. Para o estudioso, a procura pessoal de informações é mais eficiente que a sua absorção passiva. Deste modo, programas didáticos que se baseiam em representações gráficas, como o apresentado aqui, são de grande utilidade didática. A adaptação deste programa à observação de estruturas moleculares será apresentada brevemente bem como um programa apto a representar qualquer função.

Os interessados poderão solicitar o programa diretamente com o autor.

REFERÊNCIAS

- ¹ W.J. Moore, "Físico-química", Ed. E. Blücher Ltda. e Edusp (1976) p.738.
- ² Microsoft BASIC Compiler, Microsoft Corp. (1983).

EDUCAÇÃO

O USO DO MICRO-COMPUTADOR NO ENSINO E NA PESQUISA: REPRESENTAÇÃO E SIMULAÇÃO DE VOLTAMOGRAMAS CÍCLICOS

Julien F.C. Boodts, Ana M. Galli* e Otávio L. Bottecchia*

Departamento de Química — FFCL Rib. Preto/USP — Av. Bandeirantes n.º 3900; 14049-Ribeirão Preto (SP).

Recebido em 19/2/87; cópia revisada em 6/1/88

ABSTRACT

The use of the micro-computer in education and research is discussed. The representation of the basic equations in CV, and the influence of the parameters on the voltammograms, are discussed as an aid in graduate studies. The basic principles underlying digital simulation of cyclic voltammograms, using the explicit finite difference method, for uncomplicated electron transfers are exposed. Programs for both applications are proposed. Practical application of the method are presented.

I. INTRODUÇÃO

Recentemente, tem-se assistido a um esforço, cada

vez maior, de introduzir a informática, nos seus mais diversos aspectos, no cotidiano do ensino e da pesquisa em química. Tal esforço não se tem limitado apenas ao ensino universitário, tendo-se estendido também ao ensino do segundo grau. Um exemplo bem sucedido a nível mundial é o da França, que através de uma reciclagem do corpo docente, conseguiu sucessos apreciáveis na informatização do ensino de segundo grau.

Obviamente, a comunidade científica brasileira não podia ficar alheia a esta tendência mundial irreversível. Deste modo, vários grupos de pesquisa se lançaram à tarefa de introduzir e divulgar a informática na educação e pesquisa brasileira. Assim, entre outros, grupos de pesquisa sediados na UFRJ e no IQUSP¹ são ativos na área da automatização de técnicas de análise, desenvolvendo tanto o "soft" quanto o "hard".

Outros têm se dedicado ao desenvolvimento de pro-

* Bolsistas da FAPESP.