

Roberto Andrea Müller\*

Departamento de Química - Universidade Federal de Viçosa - 36570-000 - Viçosa - MG

Eduardo Jaime Quirós Batres

Central de Processamento de Dados - Universidade Federal de Viçosa - 36570-000 - Viçosa - MG

Recebido em 2/2/94; aceito em 30/3/95

Computer simulation was used to enable thirty six undergraduate students of the Chemistry Course at the Federal University of Viçosa, Brasil, to work on an individual single crystal x-ray diffraction experiment using the simulated Buerger precession camera. Actually 64% of the students are in the class mean or above, considering the minimum of trials demanded to perfectly set a single crystal originally in a general mis-setting position.

Keywords: simulation; crystallography; education.

## INTRODUÇÃO

A simulação por computador permitiu que trinta e seis estudantes do curso de Bacharelado em Química da Universidade Federal de Viçosa trabalhassem numa experiência individual de difração de raios-x de um monocristal utilizando a câmara de precessão de Buerger. Aproximadamente 64% dos estudantes estão na média ou acima, numa escala de mínimo de tentativas demandadas para ajustar perfeitamente o monocristal que estava inicialmente numa posição geral. Cada estudante trabalhou com um composto diferente, com o cristal numa posição diferente.

## DESCRIÇÃO DA EXPERIÊNCIA

Para se obter diagramas de difração de Buerger orienta-se o monocristal com dois dos seus três eixos cristalográficos perpendiculares ao feixe de raios-x, isto é conseguido mediante deslocamentos em três arcos, a saber: azimutal, horizontal e vertical. Estes deslizam sobre planos perpendiculares entre si, sendo o azimutal aquele que gira o bloco no qual se localizam os outros dois arcos<sup>1</sup>.

O simulador funciona com o conhecimento da posição do monocristal, armazenada num arquivo invisível para o estudante, junto com outras constantes<sup>2</sup>. Para o posicionamento escolhido neste trabalho, o simulador apresenta um desenho semelhante ao da fig. 1, porém sem os números (43mm, 18mm, etc.) pois eles são medidos com uma régua milimetrada. Nota-se de imediato a existência de um desalinhamento ao observar a fig. 1, na qual o asterisco está fora do centro de massa dos quatro sinais positivos. Nesta ocasião o estudante desliga o simulador para fazer as medidas.

Para o posicionamento do arco azimutal substituem-se as medidas milimétricas na equação da correção em graus<sup>2</sup>, obtendo-se a eq. 1

$$\text{correção} = 14 \cdot (64 - 20) \cdot 60^{-1} = 10,3 \quad (1)$$

No caso do posicionamento do arco horizontal obtém-se a eq. 2

$$\text{correção} = 14 \cdot (43 - 18) \cdot 60^{-1} = 5,8 \quad (2)$$

O estudante aciona o simulador. O problema é sempre reiniciado na posição original ao ser ligado o aparelho. Ao digitar a correção de 10,3° em sentido horário no simulador, ele fornece o diagrama melhorado, semelhante à fig. 2. Sem sair do programa, digita-se a correção de 5,8° no sentido horário e o

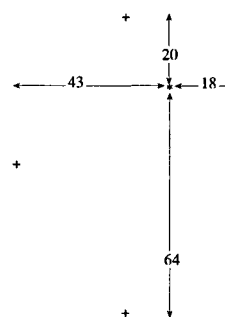


Figura 1. Desalinhamento no arco azimutal e no arco horizontal.

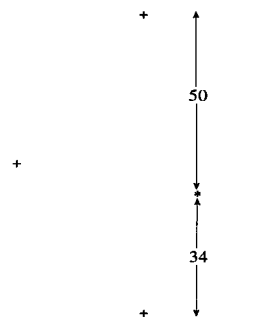


Figura 2. Após o primeiro ajuste do arco azimutal.

simulador desenha algo semelhante à fig. 3, sem poupar o experimentador de fazer as medidas com a régua milimetrada, assim como ocorreria com o equipamento real e filme fotográfico.

Agora o simulador é desligado novamente para efetuar as medidas. O ajuste fino é calculado de modo análogo ao visto acima, obtendo-se as correções: 3,7° de rotação no sentido anti-horário para o arco azimutal e rotação de 1,2° no sentido horário para o arco horizontal.

Ao ligar novamente o aparelho, os valores das correções são fornecidas ao programa em combinação linear adequada, ou seja, 6,6° de deslocamento no sentido horário para o arco azimutal (obtido pela diferença entre 10,3 e 3,7) e 7,0° no mesmo sentido para o arco horizontal (resultado da soma de 5,8 e 1,2). Isto completa a etapa de ajuste do monocristal, o programa fornece a resposta final. Um total de 11 diagramas são fornecidos pelo aparelho, desde o início até a parte final deste exemplo.

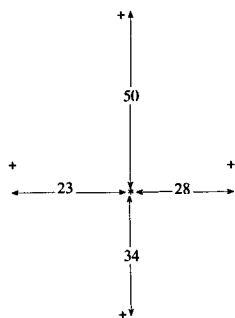


Figura 3. Obtenção do ajuste final.

Foi de importância inestimável a utilização do sistema MUSIC, Multy User System for Interactive Computing, desenvolvido pela Universidade de Mc Gill, Montreal, Canadá e processado num equipamento IBM. Este sistema permitiu distribuir uma taxa simbólica de US\$ 50 igual para cada estudante como forma de avaliação de despesa de utilização do sistema. Assim sendo, o sistema recusou a continuidade de dois estudantes após terem excedido a taxa. Esta interrupção permitiu o reforço de informações mediante colóquio com aqueles dois estudantes, levando ao término com sucesso após o acréscimo de apenas 10% sobre o valor da taxa.

## RESULTADOS

Os resultados que interessam aos objetivos deste trabalho são aqueles que relacionam o grau de dificuldade nas diversas etapas do experimento, revelando assim as seções da teoria que demandam melhores explicações. É relevante informar que os estudantes não viram uma câmara de precessão de Buerger real, a mais próxima está localizada a algumas centenas de quilômetros de distância da cidade de Viçosa.

A menor dificuldade está no início da tarefa, para manipular o eixo azimutal do simulador do método de precessão de Buerger. A maioria, isto é, 86% dos estudantes precisaram de 1 a 3 tentativas para ajustar este arco, conforme mostra a fig. 4. O acerto dos outros dois arcos foi a parte mais problemática. Houve dificuldade a nível operacional para entender que o arco vertical passa à posição horizontal ao se girar o azimutal de 90° com implicações diferentes para o sentido horário ou anti-horário de rotação. Isto pode ser deduzido pelos altos números de figuras demandadas para a resolução da tarefa total, segundo a fig. 5. A maior parte dos estudantes, ou seja, 64% está na média ou acima, com até 30 figuras para completar a tarefa. Devido à dificuldade em atender ao procedimento experimental, 47% da classe tentou indevidamente prosseguir o

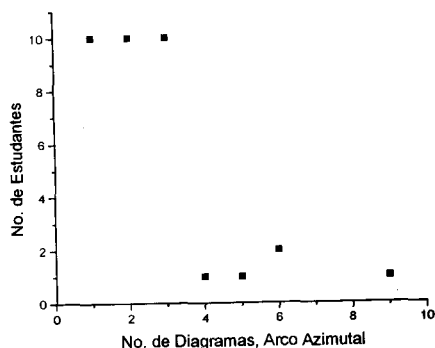


Figura 4. Número de ajustes no arco azimutal por aluno.

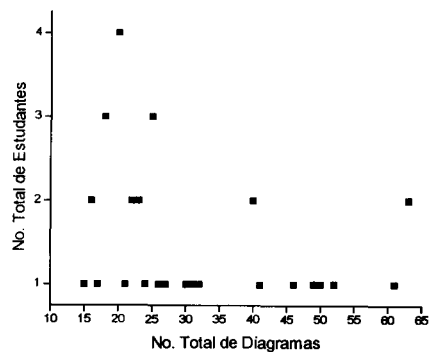


Figura 5. Número de diagramas por aluno.

trabalho mesmo após o seu término, conforme revelou uma variável contadora do programa. A diversidade de graus de dificuldade enfrentada pelos estudantes é indicada pelo desvio padrão<sup>3</sup> da taxa de utilização igual a 13.

## DISCUSSÃO

A vantagem na utilização do simulador para o ensino é a possibilidade de experimentação individual, tal como se existisse um aparelho dedicado exclusivamente para cada estudante. Pelo trabalho concomitante estimula-se a troca de informações, aprimorando-se a incipiente comunicação científica, sem perda de originalidade pois não houve tarefas iguais. O professor sabe exatamente o tipo de problema oferecido com todos os detalhes e pode acompanhar a evolução do trabalho da turma à vontade, mediante observação de informações registradas no arquivo oculto aos estudantes, coletadas sempre que o aparelho é utilizado. Isto seria muito difícil ou impossível no caso real.

Em ocasião oportuna pode-se revelar a identidade do cristal simulado. Caso não o seja, então o experimento tem a mesma característica do tratamento de uma amostra desconhecida.

A medida de parâmetros de cela unitária, como foi explicada em trabalho anterior para a antimônita<sup>2</sup>, complementa o estudo cristalográfico.

Em aplicações futuras, o valor da taxa será estipulado em US\$ 23,8 que é o valor médio utilizado pela classe, de modo a aumentar a interação professor-aluno e aumentar com isso o rendimento do aprendizado.

Esta tarefa de análise cristalográfica estrutural básica antecede possíveis problemas mais complexos que o estudante poderá enfrentar numa etapa futura.

O programa de ensino de cristalografia precisa ser seqüencial e ininterrupto para que a aplicação deste simulador possa lograr êxito. Não se conseguiu atingir esta meta durante os diversos semestres quebrados por greves nos últimos anos.

## AGRADECIMENTOS

Ao CNPq pela bolsa de doutoramento N° 141128/93-3 oferecida a R.A.M. durante o ano que esteve matriculado no Instituto de Química da UNESP, em Araraquara - SP - Brasil.

## REFERÊNCIAS

1. Woolfson, M. M.; X-ray Crystallography, Cambridge at the University Press, (1970).
2. Müller, R. A.; *Quím. Nova*, (1989), **12**, 31.
3. Miller, J. C.; Miller, J. N.; Statistics for Analytical Chemistry, John Wiley & Sons, Chichester, (1988).