

PAINEL 23

Hipertexto Para Apresentação de Estruturas de Materiais

Patricia Mesquita Viana

Bolsista de Inic. Científica, Meteorologia, UFRJ

Peter Rudolf Seidl

Orientador, Químico Industrial, Ph.D..

1. INTRODUÇÃO

O presente trabalho está compreendido no quadro de produtos gerados pelo Projeto Especial Modelagem Molecular do CETEM como uma das pesquisas de metodologias de ensino direcionadas aos alunos da rede pública e privada de primeiro e segundo graus, graduação e pós-graduação em Química e áreas afins.

Esse hipertexto constitui um instrumento de informação multimídia, que expõe conceitos da estrutura de materiais, a nível de pós-graduação, na área.

2. OBJETIVO

O objetivo do presente trabalho é constituir-se num mecanismo de suporte teórico a todos os pós-graduandos e pesquisadores da área de materiais, quando da necessidade de relembrar conceitos úteis às aulas e pesquisas que possam recorrer às técnicas de modelagem molecular.

3. METODOLOGIA

A primeira etapa da metodologia empregada consistiu na preparação do texto e definição de imagens afins. O texto foi elaborado tomando por base o hipertexto: "Minerais: de Átomos a Cristais" (1, 2, 3, 4). Foram acrescentados conceitos mais profundos sobre os agentes da formação estrutural molecular, devido ao público alvo não ser o mesmo - estudantes do segundo grau - mas sim, alunos de pós-graduação. O texto compreende quatro grandes grupos: Microestrutura da matéria, Cristais, Determinação das Estruturas e Orgânica. O primeiro grupo compreende conceitos elementares, sobre elementos químicos, átomos, moléculas e todas as suas interações. O segundo grupo compreende conceitos sobre a estrutura e formação de cristais. O terceiro grupo compreende as forças e ligações que atuam na formação de uma dada estrutura. O último grupo compreende tabelas de orgânica para auxiliar as pesquisas que utilizem também processos orgânicos no tratamento de minérios. As imagens correlatas foram extraídas de material bibliográfico complementar (2, 5), passando por um tratamento através da utilização de um *scanner* de mesa (*HP ScanJet II*) e *softwares* de edição de imagens (*Paintbrush* e *PhotoFinish*).

A segunda etapa se constituiu da definição da árvore lógica do programa a ser criado (6, 7, 8). O hipertexto foi estruturado logicamente, de forma que o usuário possa recorrer a diferentes caminhos, ou ramificações, de acordo com as suas dúvidas e necessidades específicas. A esse processo de procura, denomina-se navegação, na qual o usuário parte de palavras-chave ou botões para alcançar seu objetivo final.

A terceira etapa realizada foi a definição estrutural do hipertexto. O mesmo é constituído por:

- a) nós - grupos de informações, subdivididos em janelas principais e janelas secundárias (Figura 1);
- b) palavras-chave ou botões - pontos que originam outros nós;

c) *links* - ligações lógicas entre os nós e botões.

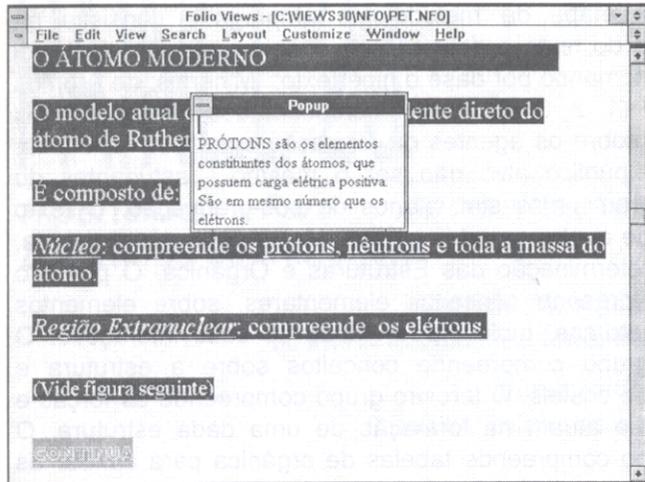


Figura 1 - Janela principal com janela secundária.

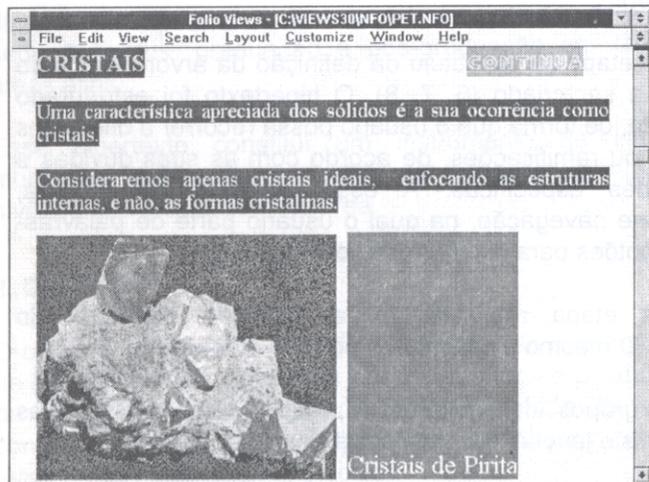


Figura 2 - Janela principal com botão.

Todos esses itens foram definidos e criados utilizando-se os recursos do software gerador de hipertextos *Folio Views 3.0*.

A última etapa promoveu a programação visual do hipertexto "Estrutura de Materiais". Após a conclusão das etapas anteriores foram realizados os seguintes acertos: definição de cores de tela e de fontes, definição das fontes; e tamanhos de letras; e adequação de imagens em tamanho e local.

4. RESULTADOS OBTIDOS

Este trabalho promove um mecanismo de suporte teórico compatível com a informação atual em processo mundial e com o uso cada vez maior da análise química computacional a modelagem molecular.

Sua primeira versão está finalizada, estando agora na fase de transposição para o software *Neobook*, no qual serão implementados recursos multimídia de sons e animações.

5. CONCLUSÃO

Percebeu-se o que o mundo moderno atual observou: a importância dos recursos da Multimídia e computação gráfica para uma assimilação mais rápida, atrativa e eficaz, de conceitos anteriormente teóricos e, por isso mesmo, cansativos e ineficazes para compreensão total do tema proposto.

A pesquisa de novas metodologias de ensino na área de materiais, mostra-se extremamente importante, uma vez que o material disponível é escasso e difuso.

BIBLIOGRAFIA

1. VIANA, P. M.; SEIDL, P. R. Hipertexto para Apresentação de Fundamentos Mineraiis. In Jornada de Iniciação Científica, 3, 1995, Rio de Janeiro. Anais. Rio de Janeiro: CETEM, 1995.
2. RUSSELL, J. B. General Chemistry. MacGraw-Hill, 1982.
3. GRAY, H. B.; HAIGHT, G. P. JR. Princípios Básicos de Química. Editorial Reverté, S. A., 1975.
4. ALLINGER, N. L. Molecular Mechanics. American Chemical Society, 1992.
5. HOFFMANN and TORRENCE. Chemistry Imagined. Smithsonian, 1993.
6. SANTOS, G. C. Hipertexto & Inteligência Artificial e Suas Aplicações. Rio de Janeiro: Departamento de Ciência da Computação/ UFRJ, 1994. Tese (Projeto Final de Curso).
7. RIBEIRO, A. B. Hiperbase - PC/DOS. Módulo de Navegação. Rio de Janeiro: Departamento de Ciência da Computação/ UFRJ, 1992. Tese (Projeto Final de Curso).
8. SALGADO, A.; SIMÕES, E.; MEIRA, S. Sistemas Hipermídia: Hipertexto e Banco de Dados. Gramado: Departamento de Informática/ UFPE, 1992. Tese (Bolsa de Pesquisa).

PAINEL 24

Propriedades Estruturais de Extratantes

Luiz Claudio Kock Cerqueira

Bolsista de Inic. Científica, Eng. Química, UFRJ

Peter Rudolf Seidl

Orientador, Químico Industrial, Ph.D.

1. INTRODUÇÃO

A modelagem molecular é uma área da química que procura visualizar as estruturas de determinadas espécies, analisando a posição no espaço dos átomos que as compõe, podendo com isso compreender e prever certas propriedades físicas e químicas dessas moléculas.

Fatores como distâncias de ligação, ângulos de ligação, ângulos de torção, entre outros, podem ser traduzidos como funções que ditam o comportamento da energia interna de moléculas, cujos parâmetros dependem dos átomos que estão ligados. O conjunto de tais informações compõe um determinado campo de forças, que deve adaptar-se a cada situação em particular. De posse de um campo de forças, pode-se moldar uma estrutura, visando minimizar a energia dos diversos tipos de interações entre os átomos que a compõe e analisá-la, relacionando sua estrutura com propriedades que o composto possa ter.

O gálio é um metal cujo interesse na indústria eletro-eletrônica se torna cada vez maior, devido às propriedades de um *chip* de arseneto de gálio, muito mais eficiente que os tradicionais de silício. Um método muito usado na obtenção de gálio é a