O Clube de Software da SPQ (1ª parte)

JOÃO PAULO LEAL*

A SPQ tem adquirido uma quantidade significativa de *software* na área da Química, com especial relevo para os programas educacionais. Sendo os programas adquiridos até ao presente mais de uma centena, não é possível fazer na rubrica de *Software* uma análise detalhada de cada um deles. Alguns serão comentados nesta rubrica mas, para que os sócios saibam quais os programas que se encontram na Sociedade, apresenta-se agora uma primeira lista dos programas existentes (relembra-se que estes programas estão instalados no Clube de *Software* na sede da SPQ, onde podem ser consultados pelos sócios). Nesta lista seguiu-se a seguinte metodologia: nome, classificação e breve resumo das potencialidades do programa. A classificação constará de três itens: qualidade do programa (5- Muito bom, 4- Bom, 3- Regular, 2- Fraco, 1- Muito Fraco); adequação escolar (A- 8º e 9º anos, B- 10º a 12º anos, C- Universitário) e conhecimentos de inglês necessários (III- Elevado, II- Médio, I- Fraco). Uma classificação deste tipo, embora muito geral e dependente da opinião do autor destas linhas, poderá elucidar sobre a adequação, ou não, de um dado programa às necessidades dos sócios. Devido à grande diversidade e quantidade dos programas apresentados pelo *Project Seraphim*, os mesmos serão divididos por temas, de modo a facilitar a sua consulta.

CHEMICAL EDUCATION SOFTWARE:

PROGRAMAS PARA IBM PS/2 OU PC COMPATÍVEIS.

HPLC-An Instrument Simulator (4,C,II) - Trata-se, tal como o nome indica, de um simulador de um sistema de HPLC. Proporciona de um modo simples, e económico, um acesso à maioria das funções de um aparelho real.

KC? Discoverer (4,B,II) - Tabela periódica com dados para bastantes propriedades dos elementos e permitindo uma muito variada representação das mesmas (p. ex. umas em função das outras).

The Acid-Base Package (3,B,II) - Conjunto de programas sobre titulações ácido-base e de complexação. Foi analisado em detalhe no "*Química*, 49, 42".

Spec20 (4,C,I) - Simulação de um espectrofotómetro Spectronic 20. Foi analisado em detalhe no "*Química*, 50, 67".

Notebook: A Column Calculator and Plotter (3,B,I) - Trata-se de uma pequena folha de cálculo e programa de gráficos de grande facilidade de utilização.

Mass Spec Simulator (4,C,I) - O programa efectua a simulação de um espectrómetro de massa Varian EM-600. O utilizador pode, como no aparelho real, ajustar os controlos habituais (amplitude do espectro, gama de massas, massa inicial, ...).

Alkimers (4,B,I) - Sobre o tema dos isómeros de alcanos o programa faz de tudo um pouco, desde tutoriais sobre nomenclatura e detecção de isómeros até exercícios para averiguar as capacidades do utilizador nesta matéria. Foi analisado em detalhe no "*Química*, 51, 63".

Equilibrium Calculator (3,B,I) - Calcula as concentrações no equilíbrio para um máximo de 5 reagentes e 5 produtos, sendo conhecidos os coeficientes estequiométricos, as concentrações iniciais e a constante de equilíbrio.

EPR Simulation (4,C,I) - Simula espectros de RPEE e efectua o respectivo tratamento.

PROJECT SERAPHIM:

PROGRAMAS PARA IBM PS/2 OU PC COMPATÍVEIS.

Medidas e Tratamento de dados:

Significant Figure Drill (3,B,I) - Exercícios de treino em que o utilizador pode rever e praticar o conceito de algarismos significativos.

Dimensional Analysis (3,B,I) - Possibilita ao estudante a revisão das unidades fundamentais no sistema métrico, usando o método do factor unitário.

Significant Figures and Rounding

(5,A,B,II) - Permite o treino de arredondamentos, contagem de algarismos significativos e medições e cálculo com algarismos significativos.

LSquare (3,B/C,I) - Efectua uma regressão linear pelo método dos mínimos quadrados com ponderação. Requer uma tabela de valores *t* de Student e estimativas do erro para os valores de *y*.

Nomenclatura e Fórmulas Químicas:

Empirical Formula (3,B,II) - Simulação laboratorial da determinação da percentagem de KClO_3 em várias amostras.

Name the Ions (3,B,III) - Vários exercícios sobre nomenclatura de iões.

Quiz on Molar Masses (2,A,I) - Exercícios em que, dados o nome e a fórmula de um composto se escolhe a sua massa molar de entre um conjunto de quatro possibilidades.

Valence Drill (2,B,I) - Exercícios em que dados os nomes dos iões é pedida a carga.

Nomen (4,B,III) - Tutorial sobre nomenclatura em Química Orgânica.

Molecular Weight Calculator (4,A/B,I) - Efectua o cálculo da massa molecular de compostos.

Equações Químicas e Estequiometria

Excess (3,B,I) - Dadas as quantidades de reagentes (ácido e base) determina o número de moles do reagente em excesso e o pH da solução final.

Mole Calculations (3,A,I) - Cálculo de átomos, moles, massas e volumes. Adequado para exercícios em grupo.

Moles in Space (2,A,I) - Exercícios sobre moles.

Mole Demo (3,A,I) - Cria uma pilha com uma mole de folhas de papel. Um relógio permite observar o tempo gasto na tarefa.

Mole Drill (2,A,I) - Cálculo de moles conhecendo as massa atómicas relativas.

Balancing Equations Drill (3,A,I) - Exercícios de acerto de equações

químicas. O programa indica se os coeficientes estequiométricos estão ou não correctos.

Limiting Reagent (3,B,I) - Exercícios sobre reagentes limitantes em reacções redox. O programa fornece auxílio e classifica o desempenho do utilizador.

Drill on Mole Concept (2/3,A,I) - Cálculo de número de moles, de moléculas, de átomos e respectivas massas.

Stoichiometry (3/4,A/B,I) - Programa tutor na resolução de problemas de cálculos estequiométricos.

Inorgm (4,A-B,II) - O programa apresenta pares de reagentes sendo pedido ao utilizador que indique a possibilidade de existir reacção, quais os produtos e que acerte a reacção que representa o processo.

Balance (3,A,I) - Indicando as fórmulas dos produtos e dos reagentes de uma reacção o programa fornece a reacção química certa.

Estrutura Atómica

Hydrogen (2,B,I) - Representação das soluções da equação de Schrodinger para o átomo de hidrogénio.

Black Box (3,B,I) - Simulação da experiência de Rutherford. O utilizador deve tirar conclusões baseado nas trajectórias de saída de projecteis que atravessam uma caixa negra.

Spectral Lines Experiment (2,B,I) - Calcula os comprimentos de onda das linhas espectrais do hidrogénio numa experiência simulada.

Milikan's Oil Drop Experiment (4,B,I) - Simulação do cálculo da carga elementar através do equilíbrio de uma gota de óleo carregada electricamente.

Dot Orbitals (5,B,I) - Representação gráfica da densidade de probabilidade associada aos vários tipos de orbitais atómicos.

Orbital Electron pensity Contours (5,B,I) - Representação dos contornos de densidade dos vários tipos de orbitais atómicos.

Electron Cloud Diagram (5,B,I) - Representação gráfica da núvem electrónica.

Soluções

PAN - Perrin's Avogadro's Number (3,B,I) - Simulação da experiên-

cia de Perrin que permite determinar o número de Avogadro a partir do movimento Browniano. (Para se tirar partido do programa é fundamental consultar a documentação anexa).

Concentration Quiz (3,B,I) - O utilizador é desafiado a colocar por ordem de concentrações várias soluções, para as quais os dados são fornecidos de diferentes modos.

Rast 2 (4,B,I) - Simula uma experiência para a determinação da massa molar através do abaixamento crioscópico.

Molarity (3,B,II) - Gera problemas para o cálculo da molaridade de soluções e verifica o resultado.

Solubility (3,B,I) - Jogo em que um ou mais utilizadores recebem cartas que representam iões em solução. A finalidade é combiná-las para formar precipitados ou libertar um gás da solução.

Gases

Boyle (4,B,I) - Simulação laboratorial de uma experiência sobre a lei de Boyle.

Boyle's Law Simulation (3,B,I) - Simulação laboratorial de uma experiência sobre a lei de Boyle usando livros e uma seringa. Permite a aquisição de dados para cada estudante.

Charles (3,B,II) - Simulação laboratorial de uma experiência sobre a lei de Charles.

Gas Laws (4,B,II) - Tutorial sobre as leis dos gases.

Baloon (4,B,I) - Ilustra o efeito da variação da pressão e da temperatura no volume de um balão cheio com um gás ideal. Utiliza gráficos de barras para mostrar a proporcionalidade (directa ou inversa) entre as várias grandezas.

Gas Law 7 (3,B,II) - Simulação laboratorial de uma experiência em que o utilizador pode manipular o número de moles, o volume a temperatura ou pressão. Fixando duas destas variáveis pode-se então ver qual a relação entre as outras duas.

Boyle's Law - Lab Calculation (2,B,II) - Simulação laboratorial de uma experiência sobre a lei de Boyle utilizando uma seringa e livros (usa os resultados do programa "Boyle's Law Simulation". Determina valores médios a partir de medidas e inclui questões sobre desvio médio das medidas.

Dalton (4,B,II) - O utilizador mani-

pula um gás num contentor fechado de modo a atingir uma determinada pressão. Pode ser utilizado como uma simulação ou como um jogo.

Gas Law 542 (3,A,II) - Simulação laboratorial de uma experiência em que o utilizador pode manipular o número de moles, o volume a temperatura ou pressão. Fixando duas destas variáveis pode-se então ver qual a relação entre as outras duas. Sendo semelhante a "Gas law 7" foi concebido para níveis mais elementares.

Maxwell (4,B,I) - Um utilitário para desenhar distribuições de Maxwell-Boltzman para gases ideais. Permite sobreposição de gráficos.

Gas Laws (3, B, II) - Problemas práticos sobre as leis dos gases.

Molecular Speed Distributions (3,B,I) - Usando as equações da distribuição de Maxwell-Boltzman, mostra graficamente a variação da distribuição de velocidades moleculares com a temperatura.

Equilíbrio Químico

Equilibrium Simulation (3,B,II) - Simula equilíbrios químicos e traça as variações de concentração dos reagentes e produtos ao longo do tempo.

An Equilibrium Simulation (2,B,I) - Simulação gráfica usando o sistema $H_2 + I_2 \rightleftharpoons 2HI$. O utilizador fornece as concentrações iniciais das três espécies e observa a evolução para o equilíbrio.

Equilibrium Tic-tac-toe (3,B,I) - Jogo do galo entre dois jogadores em que questões sobre equilíbrio têm que ser respondidas acertadamente para que uma dada casa seja ocupada.

Reacções Redox - Electroquímica

Redox Game (3,B,I) - Jogo que possibilita a prática da leitura de tabelas de potenciais de eléctrodo de modo a descobrir reacções redox espontâneas.

Nernst (4,B,I) - O programa gera problemas de cálculo do potencial de células.

Faraday 2 (4,B,I) - Simula a lei de Faraday numa experiência laboratorial. É usado em conjunto com o programa "Faraday aid".

Faraday Aid (3,B,I) - Permite a análise dos resultados obtidos com o programa "Faraday 2".

Complexos de Metais de Transição

Relationship of Isomers (3,C,I) - Apresenta dois complexos de estrutura octaédrica com seis ligandos escolhidos aleatoriamente. O utilizador deve determinar se são idênticos, isómeros geométricos ou enantiómeros.

Isomers (4,C,I) - Desenha duas estruturas tetraédricas, trigonais, bipiramidais ou octaédricas. O utilizador deve determinar se são idênticas, isómeros geométricos ou enantiómeros.

Análise Qualitativa

Precipitation Game (3,C,I) - São fornecidos cinco cátions e dez aniões. Pretende-se formar precipitados de modo a se gastarem todos os cátions.

CANAL(1,2,3) (3,C,II) - Testes aos estudantes para os grupos 1, 2 e 3 do sistema QUAL.

CANAL(4,5) (3,C,II) - Testes aos estudantes para os grupos 4 e 5 do sistema QUAL.

Six Solution Problem (2,B-C,I) - Simula o problema de determinar a composição de seis soluções, misturando-as entre si. Pretende-se saber qual das soluções se encontra em que tubo.

Nine Solution Problem (3,B-C,I) - Simula o problema de determinar a composição de nove soluções, misturando-as entre si. Pretende-se saber qual das soluções se encontra em que tubo.

Química Orgânica

Hydroc (2,B,I) - Dado o nome IUPAC de um dado hidrocarboneto, o programa desenha a sua fórmula estrutural.

Organic Qualitative Analysis (3,B,II) - Simula o processo de identificação de compostos desconhecidos através de testes, medidas e análises.

Stereochemistry (4,B,I) - Introduz de uma maneira simples os conceitos de isomeria óptica, centros quirais, etc. Possui um programa tutor que sugere exercícios para a prática dos conceitos ensinados.

Cyclohexane Stereochemistry (3,B,I) - Introduz a distinção entre as posições equatoriais e axiais no ciclohexano e propõe exercícios para a prática desta classificação.

Phenyl Bromide (2,C,I) - Progra-

ma para prevêr quais as reacções que o brometo de fenilo sofre em determinadas condições ou com determinados reagentes.

Benzene Chemistry (4,C,I) - Permite praticar a estratégia da síntese de derivados benzénicos, desde sínteses com um único passo até cinco passos.

Química de Polímeros

Polymerlab (4,C,III) - O utilizador deve identificar um polímero desconhecido através de experiências tais como espectros de infravermelhos, calorimetria diferencial de varrimento (DSC), dispersão da luz, etc. (Requer GW-BASIC ou BASICA.) Apresenta-se como um jogo de aventuras.

Química Nuclear

Dice Throw Simulation (2,C,I) - Simulação laboratorial sobre decaimento radioactivo com cinética de ordem 1.

AGRADECIMENTO

O autor agradece ao professor João Carlos Sousa (Pólo DEFCUL do Projecto Minerva) as sugestões sobre a classificação da adequação escolar.

* Dep. Química, ICEN-INETI,
Sacavém

UMA GRANDE ESCOLA;
UMA GRANDE LIVRARIA:

Barata Técnica

Av. Rovisco Pais . 1000 Lisboa . Telf. 847 34 21 (ext 1853)
De Segunda a Sexta das 9 às 21 horas

Que ciência mais útil?

O motivo mais forte por que os homens se entregam ao estudo de qualquer ciência, é a sua utilidade. (...) As artes químicas, que dependem da nossa ciência, são as de fazer azulejos, louça grossa, fina e a porcelana, que consistem na preparação, e mistura de diferentes argilas, dando-lhes ao fogo uma dureza conveniente; a arte de fazer vidros, arte preciosa, cujo descobrimento tem sido para os homens da maior utilidade; a Metalurgia, arte de extrair, fundir, purificar e ligar os metais uns com os outros; a arte de fazer vinho, não só das uvas mas de outras muitas substâncias vegetais; de fazer o vinagre e de extrair o espírito de vinho; as partes aromáticas e corantes dos vegetais, que nos servem de tinta: a Tinturaria, arte de tingir diferentes corpos; as artes de surrar e curtir peles, de chapeleiro, etc., a arte da panificação, e até a mesma arte de cozinhar; a Mineralogia, ciência que ensina a conhecer perfeitamente todas as substâncias minerais; a Agricultura; o Comércio, pois ensina a conhecer a melhoria, cultura e factura dos géneros; a Farmácia, que ensina a preparar os medicamentos; enfim a Medicina, ciência inapreciável que trata da nossa conservação. O Médico não pode conhecer a natureza das partes sólidas, e fluídas do nosso corpo, nem a virtude de um grande número de medicamentos, nem aplicá-los, sem o socorro da Química. Que ciência mais útil?

in "Elementos de Química" de Vicente Coelho de Seabra, Coimbra, 1788

Os Nossos Produtos são o Seu Sucesso

- LiChroGraph® – *Sistemas de HPLC de acordo com as GLP*
- LiChrolut® – *Extracção sólido-líquido*
- LiChrospher® – *Colunas de HPLC para todas as aplicações*
- LiChrosolv® – *Solventes de HPLC de qualidade gradiente*

MERCK... O seu parceiro de Qualidade

Merck Portuguesa Lda.
R. Alfredo da Silva 3-C
1300 Lisboa
Telf. 362 14 34
Fax. 362 14 45