

Júlio César Alves

wxMol: um visualizador/editor 3D multi-plataforma de moléculas

Monografia de Graduação apresentada ao Departamento de Ciência da Computação da Universidade Federal de Lavras como parte das exigências da disciplina Projeto Orientado para a obtenção do título de Bacharel em Ciência da Computação.

Orientador
Prof. Bruno de Oliveira Schneider

Co-Orientador
Prof. Mauro dos Santos de Carvalho

Lavras
Minas Gerais - Brasil
2003

Júlio César Alves

wxMol: um visualizador/editor 3D multi-plataforma de moléculas

Monografia de Graduação apresentada ao Departamento de Ciência da Computação da Universidade Federal de Lavras como parte das exigências da disciplina Projeto Orientado para a obtenção do título de Bacharel em Ciência da Computação.

Aprovada em 12 de dezembro de 2003

Prof. Guilherme Bastos de Alvarenga

Prof. Bruno de Oliveira Schneider
(Orientador)

Prof. Mauro dos Santos de Carvalho
(Co-Orientador)

Lavras
Minas Gerais - Brasil

Resumo

Este projeto apresenta a construção de um programa livre, gratuito e multi-plataforma de edição e visualização tridimensional de moléculas. As suas principais características são: a possibilidade de edição e visualização de moléculas com doze tipos de átomos mais usualmente utilizados em modelagem molecular; a visualização pode ser feita nos modelos de Dreiding, Pau-e-Bola, Espaço-preenchido e de linhas; a possibilidade de salvar e carregar moléculas em arquivo; a correção da geometria da molécula desenhada, segundo o modelo teórico VSEPR; a possibilidade de rotacionar, arrastar, aproximar e afastar uma molécula e a seleção de átomos ou ligações. São descritos os procedimentos matemáticos para correção da geometria e para a visualização espacial das moléculas. O programa apresenta outras funcionalidades que visam facilitar a aplicação em ensino e pesquisa, como variação de cores de átomos e fundo de tela, além de apresentar uma interface intuitiva de fácil compreensão e utilização. O programa foi escrito em linguagem C++ e fez uso das bibliotecas *wxWindows*, *OpenGL* e *GLU*. Foram feitas algumas considerações sobre o método de correção de geometria implementado e apresentadas propostas para continuidade do desenvolvimento do programa.

Abstract

This work presents the construction of a multi-platform program for three-dimensional edition and visualization of molecules. The main characteristics of the software are: the possibility of edition and visualization of molecules using the twelve most used atoms types in molecular modeling; the visualization can be made in the models of Dreiding, Ball-and-Stick, Space-filled and line; the possibility to read and save the molecules data through a file; the correction of the geometry after the drawn of the molecule, according to theoretical model VSEPR; the possibility of rotate, dragging, to zoom in and out the molecule and the selection of desired atoms and bonds. The mathematical procedures for the geometry correction and the spatial visualization of molecules are described. The program presents other functionalities that facilitate its application in education and research, as the possibility of choose the atom and screen colors, besides presenting a very easy-to-use interface. The program has been written in C++ language and use the wxWindows, OpenGL and GLU libraries. Some considerations regarding the implemented geometry correction method has been made and some proposals for continuity of the development of the software has been presented.

Agradecimentos

Agradeço a todos aqueles que contribuíram para que eu cumprisse mais esta etapa da minha vida. Agradeço primeiro a Deus pelo dom da vida e aos meus pais, João Bosco e Marilene, pelo apoio incondicional e exemplo de dedicação; aos meus irmãos, Paulo Roberto e Ana Cláudia e à minha namorada, Jacqueline, pelo incentivo. Agradeço também aos professores Bruno e Mauro pela orientação neste trabalho e ao amigo Anderson pelos trabalhos em conjunto ao longo do curso; e a todos os professores e colegas de curso que não só me ajudaram como se tornaram novos amigos.

Dedico este trabalho aos meus pais, por serem para mim exemplos de vida, de luta, de fé, de esperança e de dedicação.

Sumário

1	Introdução	2
1.1	Objetivos	3
2	Modelagem Molecular	4
2.1	Definição	4
2.2	Abordagem Histórica	5
2.3	Aplicações da Modelagem Molecular	6
2.3.1	Predizer Propriedades Moleculares	6
2.3.2	<i>Design</i> de Novas Drogas	7
3	Geometria Molecular	8
3.1	Considerações Iniciais	8
3.2	Teoria da Repulsão dos Pares Eletrônicos de Valência	8
4	Representação Gráfica de Moléculas	13
4.1	Visualização de Moléculas	13
4.2	Modelos Estruturais Moleculares	14
4.3	Sistemas de Coordenadas	15
4.4	Aspectos Relativos à Computação Gráfica	16
5	Metodologia	17
5.1	Implementação	19
5.2	Divulgação	20
6	<i>wxMol</i> - Resultados e Discussões	21
6.1	Considerações Iniciais	21
6.2	Estrutura e Representação dos Dados	22

6.2.1	Organização das Classes	22
6.2.2	Representação de uma Ligação	23
6.2.3	Representação de um Átomo	23
6.2.4	Representação de uma Molécula	25
6.2.5	O Canvas Tridimensional <i>OpenGL</i>	27
6.3	Correção da Geometria Molecular	29
6.3.1	Posições Padrão dos Átomos Ligantes	30
6.3.2	Posições Reais dos Átomos Ligantes	36
6.3.3	Algoritmo de Correção da Geometria Molecular	41
6.4	Implementação dos Modelos Estruturais Moleculares	45
6.4.1	Desenho de um Átomo	45
6.4.2	Desenho de uma Ligação	46
6.5	Implementação das Transformações de Visualização	49
6.5.1	Rotacionar uma Molécula	49
6.5.2	Arrastar uma Molécula	50
6.5.3	Aproximar e Afastar uma Molécula	51
6.6	Seleção de Átomos e Ligações	51
6.6.1	Seleção de um Átomo	52
6.6.2	Seleção de uma Ligação	52
6.7	O Aplicativo desenvolvido	53
7	Considerações Finais	54
7.1	Propostas para Trabalhos Futuros	54
8	Equipe	56
9	Referências Bibliográficas	57

Lista de Figuras

3.1	(a) Geometria tetraédrica, (b) estrutura de Lewis da molécula de metano e (c) sua forma tridimensional. Os hidrogênios ocupam os quatro vértices de um tetraedro e o ângulo entre quaisquer ligações é de $109,47^\circ$	9
3.2	Geometria de uma molécula de amônia, (NH_3). (a) Estrutura de Lewis e (b) a forma tridimensional (a região roxa representa o par de elétrons não compartilhado). O ângulo entre as ligações é de $107,3^\circ$, ligeiramente menor que os ângulos de ligação do metano.	10
3.3	A geometria de uma molécula de água (H_2O). (a) Estrutura de Lewis e (b) geometria tridimensional. Os pares de elétrons não compartilhados (regiões roxas) repelem os pares de elétrons adjacentes, fazendo com que o ângulo da entre as ligações seja de $104,5^\circ$	10
3.4	Em (a) tem-se a Geometria Trigonal Planar, em (b) e (c) a molécula de metanal, CH_2O , e em (d) e (e) a molécula de etino, C_2H_2	11
3.5	(a) Geometria Linear, (b) geometria da molécula de dióxido de carbono, CO_2 , e (c) geometria do acetileno, C_2H_2	12
3.6	Geometrias (b) Octaédrica: seis regiões de densidade de elétrons e (b) Trigonal Bipiramidal: cinco regiões de pares de elétrons	12
4.1	Molécula de etano. (a) Representação bidimensional e (b) Representação Tridimensional	14
4.2	Molécula de propano representada nos modelos de: (a) Dreiding (varetas) (b) Espaço Preenchido e (c) Pau-e-Bola	15
6.1	Diagrama das principais classes implementadas no <i>wxMol</i>	22
6.2	Exemplo de arquivo para a molécula de etano no formato WXM, utilizado pelo <i>wxMol</i>	27

6.3	Importância do sistema de iluminação para um ambiente tridimensional. A mesma molécula: em (a) com o sistema de iluminação utilizado no <i>wxMol</i> , e em (b) com o sistema de iluminação <i>OpenGL</i> desabilitado	30
6.4	Ao desenhar uma molécula no <i>wxMol</i> à mão livre ela pode não estar na geometria correta. Em (a) temos uma molécula de metano desenhada à mão livre e em (b) a sua geometria corrigida.	30
6.5	Ângulos e posições padrão para a geometria trigonal planar	32
6.6	Posições padrão dos átomos da primeira e segunda ligações de uma geometria tetraédrica	33
6.7	Posições padrão dos átomos ligantes em uma geometria trigonal bipiramidal. As posições dos átomos da segunda e terceira ligações são as mesmas da geometria trigonal planar.	35
6.8	Posições padrão dos átomos ligantes em uma geometria octaédrica	36
6.9	Posições padrão dos átomos ligantes em uma molécula de água.	37
6.10	Sistemas de coordenadas: da molécula (SC_m), do átomo (SC_a), e da situação ideal ou padrão (SC_p , em vermelho). SC_a tem origem na posição do átomo central e eixos na mesma direção dos eixos de SC_m . Já no SC_p , o eixo Y tem a mesma direção da primeira ligação, l_1 ; o eixo X é paralelo ao plano XY de SC_a ; e o eixo Z deverá ser encontrado pelo produto vetorial entre os eixos X e Y	38
6.11	Ao corrigir as posições dos átomos ligantes, um algoritmo de correção da geometria molecular deve levar em conta as suas posições atuais. Na figura, o ideal é que o átomo A seja colocado na posição possível mais próxima p_2 , e o átomo B , na posição p_3 . Isso evitaria mudanças bruscas na molécula desenhada.	42
6.12	Segundo o modelo VSEPR, em uma molécula os átomos tendem a se posicionar de maneira que seus elétrons fiquem o mais distante possível. Deste modo a geometria dos átomos centrais de uma molécula depende em maior ou menor escala de todos os átomos da molécula. Em (a) tem-se a geometria correta de uma molécula e em (b) a mesma molécula em uma solução encontrada pelo <i>wxMol</i> . Como se vê, em tal solução, apesar de todos os átomos centrais possuírem uma geometria correta, a molécula como um todo não possui.	44

6.13	O modelo estrutural criado por Corey, Pauling e Koltun (CPK) definiu, também, as cores nas quais cada átomo deveria ser representado. A figura traz as cores dos átomos suportados pelo <i>wxMol</i> . Fonte: http://www.inrp.fr/Access/biotic/rastop/help/colour.htm . . .	46
6.14	O método de desenho da biblioteca <i>GLU</i> sempre desenha um cilindro a partir da origem no sentido positivo do eixo <i>Z</i> . Deste modo, para que um cilindro represente uma ligação, deve ser aplicar transformações geométricas que o levem à posição correta.	48
6.15	O <i>wxMol</i> sendo executado no sistema Conectiva-Linux e ambiente KDE	53

Capítulo 1

Introdução

A simulação computacional tem tido um papel de suma importância no desenvolvimento das mais diversas áreas de conhecimento, nos últimos anos. Através dela, um sistema pode ser modelado, permitindo, através da manipulação destes modelos, que testes sejam realizados em um computador antes de serem aplicados ao sistema real, facilitando e tornando mais barato o processo de aprendizagem de um dado sistema.

Esta possibilidade tem sido aplicada também em química. A criação e a proposição de novos materiais tem crescido vertiginosamente, com o desenvolvimento das técnicas computacionais de Modelagem Molecular. Tais técnicas têm possibilitado, por exemplo, a criação de novas drogas, que são utilizadas na cura de enfermidades que atingem a população.

Torna-se, então, cada vez mais necessário que profissionais, especialmente das áreas de química e ciência da computação, estejam envolvidos na área de Modelagem Molecular; tanto no que diz respeito ao desenvolvimento de novas técnicas como no aperfeiçoamento e busca de novas aplicações. Deste modo, a humanidade poderá se aproveitar cada vez mais dos benefícios trazidos pela Modelagem Molecular.

Neste intuito, foi desenvolvido um programa que permite a edição e a visualização de moléculas tridimensionais. Chamado *wxMol*, o programa é gratuito e multi-plataforma, ou seja, pode ser utilizado em diversos sistemas operacionais, permitindo uma grande liberdade em sua utilização.

Deste modo, além de ser uma ferramenta de pesquisa, o aplicativo poderá ser utilizado para facilitar o processo de ensino-aprendizagem dos alunos da área de química, comprovando a aplicabilidade da informática na educação. Tais alunos,

ao entrarem em contato com a Modelagem Molecular desde cedo, poderão se sentir motivados a enveredar por esta área e contribuir com o seu desenvolvimento.

Além disso, o código-fonte do programa é aberto, podendo ser utilizado e aperfeiçoado livremente. Com isso, ele pode ser adaptado para a implementação de novos conceitos, tanto da área de química quanto de computação, tornando-se, portanto, uma ferramenta flexível e de grande utilidade.

1.1 Objetivos

Os principais objetivos deste trabalho foram:

- análise e implementação de necessidades de interface para edição/visualização de moléculas;
- análise de formatos de representação de moléculas;
- implementação de uma versão inicial do programa que começou a ser desenvolvido por [Freire (2002)].

Capítulo 2

Modelagem Molecular

2.1 Definição

Antes de se apresentar a Modelagem Molecular é necessário que se saiba da importância do conceito de estrutura molecular. Segundo [Tostes (1998)], a ciência química, aos menos nos últimos cem anos, desenvolveu-se em torno de um grande e fundamental conceito unificador: a estrutura molecular. O químico vem, nesse mesmo período, identificando química com estrutura molecular. O químico é como um profissional das moléculas, e quando “pensa” nelas tem como objeto um arranjo tridimensional muito bem definido dos átomos que constituem cada molécula em particular no espaço. Exemplos: o arranjo planar e angular de dois hidrogênios e um oxigênio na água, o arranjo tetraédrico dos quatro hidrogênios em torno do carbono no metano, etc.

Assim, esse conceito fundamental de estrutura molecular permite descrever cada uma das mais de dez milhões de moléculas conhecidas atualmente como um arranjo tridimensional específico, a partir de apenas pouco mais de cem átomos.

É necessário ainda que se defina bem o que é modelagem. A palavra modelagem deriva da palavra modelo, cujo significado é idealização de um sistema ou de um processo real, traduzindo-o em expressões ou representações analíticas que permitam descrever com precisão especificada o fenômeno real. Modelagem, em ciência, se refere a técnicas que envolvem um conjunto de equações matemáticas sendo usadas para representar fielmente algum fenômeno científico específico [Smith (1998)].

Assim [SantAnna (2002)] define a Modelagem Molecular como a investigação das estruturas e das propriedades moleculares usando a química computacional e

as técnicas de visualização gráfica visando fornecer uma representação tridimensional, sob um dado conjunto de circunstâncias. Ela engloba várias técnicas, como: Gráficos Moleculares, a Mecânica Molecular, a Dinâmica Molecular a Mecânica Quântica, entre outras, formando a chamada Química Computacional.

Conforme pode ser visto em [Cenapad (2003)], a Modelagem molecular tem como principais objetivos a construção, representação, manipulação, simulação e análise de estruturas moleculares, e o cálculo de suas propriedades.

Na prática ela pode ter enfoques diferentes. Enquanto algumas metodologias são dedicadas ao estudo de estruturas simples de poucos átomos, utilizando cálculos sem aproximações, possivelmente utilizando um supercomputador, outras estão interessadas na descrição de moléculas mais complexas, utilizando cálculos aproximados e parametrizados, podendo para isso utilizar um simples computador pessoal. Há ainda outras metodologias que utilizam a Modelagem Molecular para estudar proteínas, visando à determinação computacional da estrutura tridimensional formada por milhares de átomos, ou ainda para cálculos de energia e estabilidade termodinâmica resultantes da interação de polímeros biológicos com outras estruturas moleculares.

Percebe-se então como são importantes as técnicas computacionais de modelagem molecular. Tanto a possibilidade de visualização como os cálculos proporcionados pela utilização dos computadores auxiliam os pesquisadores, possibilitando o avanço tecnológico em várias áreas, contribuindo para o desenvolvimento da humanidade.

2.2 Abordagem Histórica

A representação de moléculas através de fórmulas estruturais foi estabelecida pela primeira vez com a descoberta do arranjo tetraédrico dos átomos de carbono em compostos orgânicos por van Hoff e Lê Bel em 1874. Com a introdução da análise conformacional foi estabelecido que moléculas podem ser representadas por diferentes arranjos atômicos espaciais, possuindo energias características [Freire (2002)].

Com o desenvolvimento da cristalografia de raios X, foi possível obter valores das estruturas das moléculas até então impossíveis com outras técnicas experimentais, como o comprimento e o ângulo de uma ligação, além de propriedades atômicas como o raio de *van der Waals* [Santos (2001)]. Isto possibilitou a criação de modelos estruturais moleculares simples, que serão apresentados em 4.2.

Tais estruturas, num primeiro momento forneciam informações qualitativas e semi-quantitativas das propriedades de uma molécula. Mas, segundo [Boyd (2001)], uma nova abordagem das estruturas de moléculas surgiu nos anos 60 e se tornou o principal método em química farmacêutica e medicinal. No coração desta abordagem estavam as correlações que foram encontradas entre uma ampla variedade de propriedades moleculares e as descrições matemáticas baseadas na estrutura molecular. Os modelos estatísticos descrevem uma relação entre uma função (atividade biológica ou propriedades físicas) de uma molécula e uma forma (estrutura) de uma molécula. Os modelos, dessa forma, constituíram as Relações Estrutura-Atividade Quantitativas (*Quantitative Structure-Activity Relationships - QSAR*). Dadas estas correlações, o químico computacional já era capaz de avaliar modelos de estruturas e fazer previsões em tais estruturas visando melhorar uma determinada propriedade.

Desde então a Modelagem Molecular tem-se desenvolvido muito. Prova disso foi em 1998, quando John Pople e Walter Kohn ganharam o Prêmio Nobel de Química, por suas contribuições no desenvolvimento da Química Computacional e da Modelagem Molecular. Tal fato tornou-se um marco no reconhecimento da área de Modelagem Molecular no meio científico [Freitas (1998)].

2.3 Aplicações da Modelagem Molecular

A Modelagem Molecular tem inúmeras aplicações nos dias atuais. A seguir destacamos duas: prever propriedades moleculares e *design* de novas drogas.

2.3.1 Prever Propriedades Moleculares

Antes da Modelagem Molecular, o único meio de prever as propriedades de uma substância molecular era fazendo uso de aproximações na teoria quântica que possibilitasse a descrição de sistemas formados por um número reduzido de partículas, devido às limitações computacionais. Tais aproximações eram inevitavelmente imprecisas e limitavam-se a sistemas de pouca aplicabilidade descritos por modelos teóricos limitantes como o modelo de gás ideal e do cristal harmônico. Com isso, muitas propriedades de materiais reais foram preditas com base em teorias aproximadas (por exemplo a equação de *van der Waals* para gases densos) [Frenkel & Smit (2001)].

Evidentemente, seria bom se pudessem ser obtidos resultados precisos para um dado sistema sem as limitações impostas por teorias mais fundamentais. A simu-

lação computacional, utilizando-se a Modelagem Molecular, permite exatamente isto. Por exemplo, é realmente muito mais fácil medir o ponto de fusão da água do que extraí-la de uma simulação computacional; mas isso em condições normais de temperatura e pressão. Medir as propriedades de materiais reais em condições de alta temperatura ou pressão é muito difícil, e conseqüentemente caro. Neste caso seria melhor utilizar a simulação computacional.

Além disso, segundo [Frenkel & Smit (2001)], pode-se comparar as propriedades calculadas de um sistema modelo com aquelas de um sistema experimental: se as duas discordarem, o modelo é inadequado. Por outro lado, pode-se comparar o resultado de uma simulação de um dado sistema modelo com as predições de uma teoria analítica aproximada aplicada ao mesmo modelo. Se teoria e simulação discordarem, sabe-se que a teoria é falha. Então, neste caso, a simulação computacional faz a função do experimento definido para testar tal teoria.

O procedimento de simular em computador um evento real é chamado de “experimento computacional”. Outro procedimento comum em simulação é o teste de teorias num experimento computacional, antes de verificá-las no mundo real. Esta aplicação de simulação computacional é de tremenda importância. Ela tem conduzido à revisão de algumas teorias muito respeitadas. Hoje em dia, sempre que possível, uma nova teoria é sempre testada por simulação computacional.

2.3.2 *Design de Novas Drogas*

Uma área em que a modelagem molecular tem sido particularmente útil é o *design* de novas drogas. Embora haja um grande número de drogas disponíveis, novas drogas estão sendo constantemente procuradas. Algumas doenças têm surgido ou tem sido reconhecidas apenas recentemente, logo não há medicação efetiva para elas. E mesmo para doenças para as quais existem medicação, novas drogas precisam ser pesquisadas, seja para a diminuição de efeitos colaterais, seja porque vírus ou bactérias tornaram-se resistentes.

Até pouco tempo atrás, a sorte representava uma importante função na descoberta de remédios. Produtos naturais eram simplesmente testados para determinar se tinham algum uso medicinal. Hoje em dia, o que se faz é identificar as enzimas responsáveis por alguma enfermidade e modelá-las computacionalmente. Dessa forma suas propriedades podem ser calculadas e analisadas viabilizando a criação de uma nova droga para aquela doença.

Capítulo 3

Geometria Molecular

3.1 Considerações Iniciais

Como foi descrito no capítulo anterior, as aplicações da modelagem molecular dependem da determinação da estrutura da molécula, e com isso, da determinação de sua geometria espacial.

A geometria das moléculas são determinadas através de experimentos. Com os avanços da mecânica quântica foram desenvolvidos, também, métodos ou modelos para prever a geometria de uma molécula sem a necessidade de se recorrer à experimentação. Um desses modelos foi desenvolvido, em 1957, pelo químico Ron Gillespie, baseando-se em trabalhos anteriores de Nyholm. Tal método recebeu o nome de *Valence-Shell Electron-Pair Repulsion* (VSEPR), ou Teoria de Repulsão dos Pares Eletrônicos de Valência, em português.

A próxima seção apresenta esta teoria, que serviu de base para a implementação de um algoritmo de correção da geometria molecular, que será apresentado mais adiante. Por hora, espera-se que o leitor esteja familiarizado com a determinação da estrutura de Lewis de uma molécula, pois o VSEPR utiliza tal estrutura na determinação da geometria molecular. Maiores informações sobre a estrutura de Lewis podem ser encontradas em [Barbosa (1998)].

3.2 Teoria da Repulsão dos Pares Eletrônicos de Valência

Um átomo é circundado por uma camada de elétrons de valência. Estes elétrons de valência podem ser envolvidos na formação de ligações simples, duplas e triplas

ou podem ainda não ser compartilhados. Cada uma destas combinações cria uma região negativamente carregada no espaço, e, como cargas iguais se repelem, as várias regiões de densidade de elétrons ao redor do átomo se espalhará no espaço de modo que cada uma fique tão afastada da outra quanto possível. É esta a premissa básica do modelo VSEPR [Brow (1996)].

Para prever a geometria do metano, por exemplo, utilizando-se tal modelo, o primeiro passo é desenhar a estrutura de Lewis da molécula. Tal estrutura mostra que o átomo de carbono possui quatro regiões de densidade de elétrons, cada uma contendo um par de elétrons, formando uma ligação com um átomo de hidrogênio. De acordo com o modelo VSEPR, as quatro regiões tendem a se afastar o máximo possível. Isso acontece quando o ângulo entre dois pares de elétrons quaisquer é de aproximadamente $109,47^\circ$. Logo, pode-se prever que a geometria da molécula é tetraédrica (figura 3.1). Através de experimentos verificou-se que os ângulos entre as ligações de uma molécula de metano é realmente $109,47^\circ$. Ou seja, os ângulos de ligação e a geometria do metano preditas pelo modelo VSEPR são idênticos aos observados.

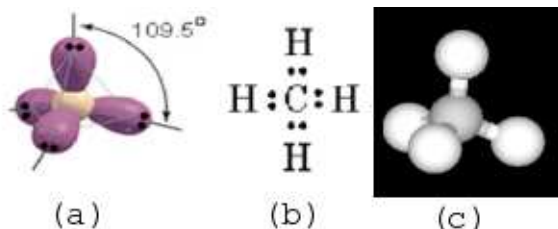


Figura 3.1: (a) Geometria tetraédrica, (b) estrutura de Lewis da molécula de metano e (c) sua forma tridimensional. Os hidrogênios ocupam os quatro vértices de um tetraedro e o ângulo entre quaisquer ligações é de $109,47^\circ$

A molécula de amônia, NH_3 , pode ser predita da mesma maneira. A estrutura de Lewis do NH_3 mostra o nitrogênio cercado por quatro regiões de densidade de elétron. Três regiões contêm pares de elétrons formando ligações covalentes simples com átomos de hidrogênio. A quarta região contém um par de elétrons não compartilhado (Figura 3.2). Independentemente disso, o modelo VSEPR diz que as quatro regiões são arranjadas em um tetraedro, formando ângulo de $109,47^\circ$ entre si. Mas, através de experimentos, observou-se que os ângulos entre as ligações são na verdade de $107,3^\circ$. Esta pequena diferença entre os ângulos previstos e os observados pode ser explicada pela proposição de que os pares de elétrons

não compartilhados do nitrogênio repelem pares de elétrons adjacentes com uma força maior do que pares de elétrons ligados.

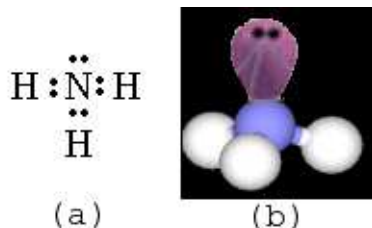


Figura 3.2: Geometria de uma molécula de amônia, (NH_3). (a) Estrutura de Lewis e (b) a forma tridimensional (a região roxa representa o par de elétrons não compartilhado). O ângulo entre as ligações é de $107,3^\circ$, ligeiramente menor que os ângulos de ligação do metano.

A figura 3.3 mostra a estrutura de uma molécula de água. Nela o oxigênio é rodeado por quatro regiões de densidade de elétrons. Duas destas regiões contêm pares de elétrons usados para formar ligações covalentes simples com os átomos de hidrogênio e as outras duas regiões contêm pares de elétrons não compartilhados. Utilizando o modelo VSEPR, pode-se prever que as quatro regiões formam, novamente, um tetraedro com o mesmo ângulo de $109,47^\circ$. Experimentos mostram que o ângulo entre as duas ligações é na verdade de $104,5^\circ$. Esta diferença é explicada pelo mesmo motivo apresentado para o caso do nitrogênio. No caso do oxigênio o ângulo é ainda menor devido ao fato de existirem dois pares de elétrons não compartilhados ao invés de um.

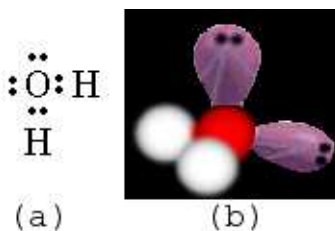


Figura 3.3: A geometria de uma molécula de água (H_2O). (a) Estrutura de Lewis e (b) geometria tridimensional. Os pares de elétrons não compartilhados (regiões roxas) repelem os pares de elétrons adjacentes, fazendo com que o ângulo da entre as ligações seja de $104,5^\circ$.

Em muitas moléculas, entretanto, um átomo é rodeado por três regiões de den-

sidade de elétrons. Isto acontece, por exemplo, com o metanal e o etino, como mostrado pela figura 3.4.

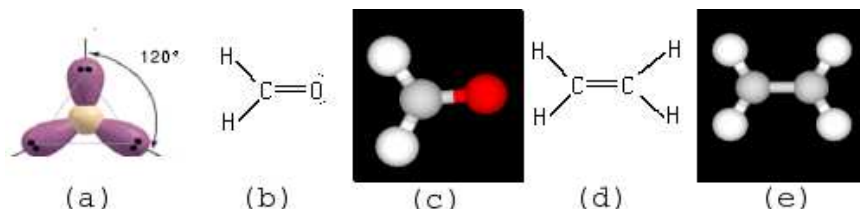


Figura 3.4: Em (a) tem-se a Geometria Trigonal Planar, em (b) e (c) a molécula de metanal, CH_2O , e em (d) e (e) a molécula de etino, C_2H_2 .

De acordo como o modelo VSEPR, uma ligação dupla é tratada como uma única região de densidade de elétrons. No metanal, o carbono é rodeado por três regiões de densidade de elétrons: duas contêm pares de elétrons que formam ligações com um átomo de hidrogênio, a terceira contêm dois pares de elétrons formando uma ligação dupla com um átomo de oxigênio. No etino, cada átomo de carbono é também rodeado por três regiões de densidade de elétrons: duas contendo pares simples de elétrons, e a outra contendo dois pares de elétrons.

O máximo que três regiões de densidade de elétrons podem se afastar uma da outra no espaço é ficando em um mesmo plano e formando um ângulo de 120° entre elas. O modelo prevê então que os ângulos de ligação no metanal e no etino são todos de 120°. Como todas ligações de cada composto estão em um mesmo plano, pode-se concluir que tanto o metanal quanto o etino são moléculas planares.

Os ângulos de ligação de tais moléculas, na verdade, não são de exatamente 120°. Isto acontece porque uma dupla ligação exerce uma força repulsiva maior do que uma ligação simples.

Existem ainda moléculas nas quais o átomo central é cercado por, somente, duas regiões de densidade de elétrons. A figura 3.5 mostra os modelos estruturais do dióxido de carbono, CO_2 , e do acetileno, C_2H_2 , que se enquadram neste perfil.

No dióxido de carbono, o átomo de carbono é rodeado por duas regiões de densidade de elétrons: cada uma contendo dois pares de elétrons e formando dupla ligação com um átomo de oxigênio. No acetileno, cada carbono é também rodeado por duas regiões de densidade de elétrons: uma contendo um par de elétrons formando uma ligação simples com um átomo de hidrogênio, e a outra contendo três pares de elétrons formando uma ligação tripla com o outro átomo de carbono.

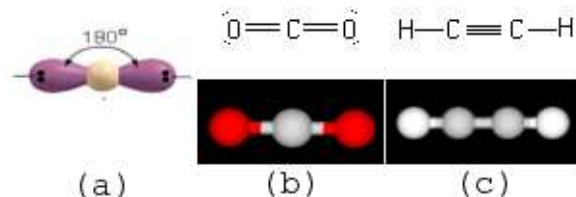


Figura 3.5: (a) Geometria Linear, (b) geometria da molécula de dióxido de carbono, CO_2 , e (c) geometria do acetileno, C_2H_2 .

no. Neste caso, as duas regiões de densidade de elétrons são afastadas ao máximo formando uma um ângulo de 180° entre elas. Ambos, o dióxido de carbono e o acetileno são, portanto, moléculas lineares.

Há ainda outras geometrias que não serão detalhadas neste texto. Contudo, basta ter em mente que elas seguem o mesmo princípio das anteriores, o da repulsão das regiões de densidade de elétrons. A figura 3.6 mostra a geometria para cinco e seis regiões de densidade de elétrons.

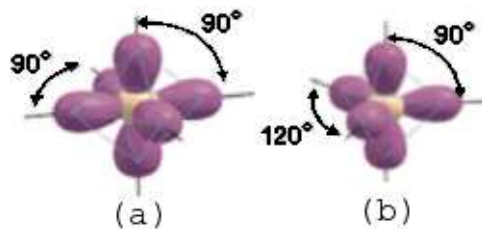


Figura 3.6: Geometrias (a) Octaédrica: seis regiões de densidade de elétrons e (b) Trigonal Bipiramidal: cinco regiões de pares de elétrons

Capítulo 4

Representação Gráfica de Moléculas

4.1 Visualização de Moléculas

No [Dic. Universal (2003)] encontra-se o significado de visualização como a transformação de conceitos abstratos em imagens reais ou visíveis. No contexto da Modelagem Molecular, visualização é entendida como a representação gráfica de átomos e moléculas, na geometria mais próxima do esperado no espaço tridimensional.

Os Gráficos Moleculares, conforme visto em [Cenapad (2003)], são parte muito importante de um sistema de modelagem. [SantAnna (2002)], define Gráficos Moleculares como as técnicas para a visualização e a manipulação de moléculas em um sistema de apresentação gráfica, permitindo a visualização tanto das estruturas quanto de algumas propriedades das moléculas.

É possível visualizar as estruturas de moléculas em uma variedade de estilos (desde simples linhas até modelos sólidos), e esquemas de cores, possibilitando o movimento das estruturas interativamente em três dimensões. Já a visualização das propriedades das moléculas tem se tornado cada vez mais importante na Modelagem Molecular. Diferentemente da visualização das estruturas (que é interativa), o cálculo das propriedades das moléculas necessitam de um considerável tempo de computação, podendo ser visualizadas somente ao seu término.

Geralmente, as moléculas são descritas em duas dimensões. Isso não permite noção da real estrutura de um composto. Assim a visualização em três dimensões,

permite uma representação mais fiel da estrutura em questão. A figura 4.1 ilustra isso (em um programa esta diferença ficaria ainda mais exaltada, pois as técnicas computacionais representam com mais realismo imagens tridimensionais do que uma figura em folha de papel). Quanto mais complexa uma molécula, mais a sua representação bidimensional é distante da realidade.

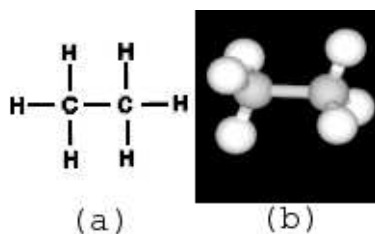


Figura 4.1: Molécula de etano. (a) Representação bidimensional e (b) Representação Tridimensional

4.2 Modelos Estruturais Moleculares

Vários modelos estruturais de moléculas, em três dimensões, já foram propostos pelos químicos. Os primeiros a serem apresentados foram os modelos de varetas e de espaço preenchido. Logo outros modelos foram apresentados, especialmente para macromoléculas.

O Modelo de Varetas foi desenvolvido por Dreiding, neste, as ligações químicas são representadas por varetas, enquanto os átomos não são explicitamente representados.

Já o Modelo Espaço Preenchido foi desenvolvido por Corey, Pauling e Koltun, recebendo, por isso, também o nome de modelo CPK. Neste, cada átomo da molécula é representado por uma esfera colorida, cujo raio é dado pelo raio de *van der Walls* e as ligações não são representadas.

Um outro modelo muito comum encontrado nos programas de Modelagem Molecular é o Modelo Pau-e-Bola, onde esferas definem os átomos e cilindros representam as ligações (simples, duplas ou triplas).

A figura 4.2 traz a molécula de propano representada nos três modelos acima apresentados.

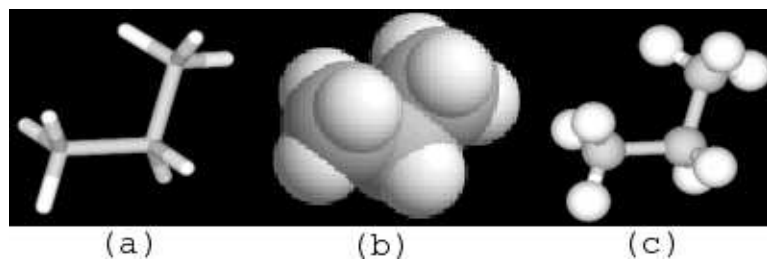


Figura 4.2: Molécula de propano representada nos modelos de: (a) Dreiding (varetas) (b) Espaço Preenchido e (c) Pau-e-Bola

4.3 Sistemas de Coordenadas

Para que as posições dos átomos e moléculas sejam definidas, os dois modelos de sistemas de coordenadas mais comuns são: o Sistema de Coordenadas Cartesianas e o Sistema de Coordenadas internas.

O Sistema mais comum é o de Coordenadas Cartesianas, onde as coordenadas dos átomos individuais são dadas como coordenadas (x, y, z) em um espaço tridimensional com eixos ortogonais. Tal sistema é muito utilizado devido a facilidade que as pessoas têm por já terem contato desde cedo com Sistemas de Coordenadas Cartesianas. Além disso os cálculos da Mecânica Quântica são feitos a partir de coordenadas deste tipo.

Já no Sistema de Coordenadas Internas cada átomo é descrito em relação a um outro átomo na molécula. Um átomo é tomado como a origem do sistema de referência. Um segundo átomo pode ser definido como estando a uma certa distância a partir do primeiro. O terceiro pode ser definido como estando a uma certa distância do segundo, e com um certo ângulo em relação ao primeiro. Todos os átomos subsequentes devem ser definidos como estando a uma certa distância, ângulo, ou ainda ângulo de torção em relação aos outros átomos já definidos. Este sistema é usado para cálculos mais sofisticados como cálculos *ab initio* [Cross (2003)].

Um sistema de coordenadas menos comum em Modelagem Molecular é o Sistema de Coordenadas Polares, usado nas situações em que cálculos ainda mais sofisticados são necessários. Nele há uma origem definida e uma posição qualquer é determinada por uma distância e um ângulo em relação a esta origem. Este sistema geralmente é usado em estudos de cristalografia.

Coordenadas internas são úteis para descrever a relação entre os átomos de

uma única molécula, já as coordenadas cartesianas podem ser mais apropriadas para descrever uma coleção discreta de moléculas. [Freire (2002)].

4.4 Aspectos Relativos à Computação Gráfica

Hoje em dia, a grande maioria dos dispositivos de apresentação gráfica utilizados pelos computadores são dispositivos de apresentação matricial, nos quais, uma imagem é formada por uma matriz de pontos, chamados *pixels*. Como tais dispositivos permitem que cada *pixel* seja pintado com uma de muitas cores possíveis, qualquer imagem pode ser formada.

Os modelos estruturais moleculares de varetas, espaço preenchido e pau-e-bola são os mais utilizados para a representação de moléculas em computadores. Mas como a tela dos dispositivos de apresentação dos computadores são bidimensionais, e as moléculas têm estrutura tridimensional, várias técnicas de computação gráfica têm sido utilizadas. Desde técnicas simples como colorir cada tipo de átomo de uma molécula com uma cor diferente, até a utilização de perspectiva, sombras e luzes, que dão uma aparência mais real aos modelos sólidos, entre outras.

Com o contínuo aperfeiçoamento das técnicas de computação gráfica e de realidade virtual, as estruturas químicas tridimensionais poderão ser cada vez melhor representadas. Unindo-se a isso os avanços nos cálculos das propriedades das moléculas, a Modelagem Molecular tem todos os requisitos para se desenvolver cada vez mais.

Capítulo 5

Metodologia

Segundo [Eichler & Del Pino (2000)], um ambiente interativo permite ao aluno manipular variáveis e observar resultados imediatos, decorrentes da modificação de situações e condições. Em tais ambientes têm-se a representação de circunstâncias que são difíceis ou até impossíveis de serem repetidas ou criadas fora de um ambiente computacional. Assim, como o nome sugere, em uma simulação se espera que o comportamento daquilo que está sendo simulado represente a operação do sistema real, incluindo as suas regras e as de seus processos, segundo as leis, teorias ou modelos, que o descrevem e o explicam. No entanto, em tais atividades, não há a prescrição de uma forma única de abordar o sistema simulado. Isso se dá à vontade do usuário, de sua interação com a simulação. Ou seja, nos aspectos educacionais, o que interessa é o que o estudante pode aprender do sistema simulado, sem as limitações ou perigos que o sistema real possa ter. O presente projeto teve, então, como finalidade a criação de um ambiente interativo para edição e visualização de moléculas tridimensionais.

O programa *wxMol* implementado é uma continuação daquele inicialmente desenvolvido por [Freire (2002)]. Este último possuía dois módulos, um de visualização e outro de edição. O Módulo de visualização tinha como principais funcionalidades:

- a possibilidade de visualização de moléculas que fossem formadas por átomos de carbono, nitrogênio, oxigênio ou hidrogênio, nos modelos espaço preenchido e pau-e-bola;
- a possibilidade de rotacionar, transladar, aproximar e afastar uma molécula.

Enquanto o modo de edição permitia:

- a inserção de átomos (aqueles citados no modo de visualização) nos planos XY , XZ e YZ (considerando um espaço tridimensional formado por eixos ortogonais X , Y e Z);
- a criação de uma ligação entre dois átomos através de cliques com o *mouse*.

Além disso, era possível salvar e carregar a representação de uma molécula em arquivo, utilizando formato de representação próprio. Mas o programa não permitia que um determinado átomo ou ligação fossem apagados, ou que, depois de adicionado, um átomo tivesse a sua posição alterada.

A partir disso, então, é que o *wxMol* foi desenvolvido. O aplicativo passou a incorporar, com o presente projeto, as seguintes melhorias:

- A possibilidade de adicionar átomos em qualquer ponto do espaço tridimensional.
- Reestruturação da interface, eliminando a divisão entre módulos de visualização e de edição e utilizando elementos gráficos como: barras, menus e botões mais intuitivos, tornando o programa mais amigável.
- Aumento na quantidade de tipos de átomos suportados. Atualmente o aplicativo pode trabalhar com átomos de: carbono, hidrogênio, oxigênio, nitrogênio, cloro, bromo, flúor, enxofre, boro, iodo, fósforo e silício.
- Melhoria no sistema de visualização como um todo, permitindo uma melhor interação do usuário com a representação da molécula.
- Possibilidade de selecionar qualquer átomo ou ligação com o uso do *mouse*. Permitindo que eles sejam, por exemplo, apagados. Um átomo, pode ainda, ser arrastado através do clicar e arrastar do *mouse*.
- Desenvolvimento e implementação de um algoritmo de correção da geometria molecular.
- Implementação do modelo estrutural de Dreiding (varetas).
- Correção do formato de representação de moléculas em arquivo.
- Personalização das cores do sistema. Permitindo que o usuário escolha, por exemplo, as cores de cada tipo de átomo, ou do fundo da janela.

A eliminação da separação entre módulos de desenho e visualização, tornou possível que, no *wxMol*, a molécula seja rotacionada, arrastada, aproximada ou afastada a qualquer momento. Esta possibilidade de visualizar uma molécula sob qualquer ângulo, durante a edição, proporciona ao usuário maior liberdade em tal processo e maior interação com o modelo molecular.

Já a implementação da correção da geometria molecular foi um grande salto de qualidade para o aplicativo. Esta funcionalidade permite a um usuário aprender um pouco sobre geometria molecular, uma vez que o programa pode corrigir automaticamente a geometria da mesma enquanto ela vai sendo desenhada.

Existem muitos programas gratuitos de Modelagem Molecular¹, sendo que muitos deles possuem funcionalidades muito específicas. Assim, o *wxMol* se torna uma alternativa viável, especialmente para os alunos da área de química em início de curso, em função de sua simplicidade. Ele permite ao usuário tanto a visualização quanto a edição de moléculas, possibilitando o aprendizado de estrutura e geometria das moléculas de maneira simples e interativa.

5.1 Implementação

A aplicação foi desenvolvida em ambiente Linux, paralelamente em distribuições Conectiva e Red Hat, e também foi testado em ambiente Microsoft Windows. E pode, ainda, ser compilado em diversos outros sistemas operacionais com poucas ou nenhuma alteração no código-fonte.

A linguagem de programação utilizada foi o C++, empregando-se a abordagem de orientação a objetos. Para a construção da interface gráfica foram utilizadas as bibliotecas: *wxWindows* (<http://www.wxwindows.org>), *OpenGL* (*Open Graphics Library*) e *GLU* (<http://www.opengl.org>), estas duas últimas foram utilizadas para os gráficos tridimensionais. Por fim, o compilador utilizado foi o *gcc* (*Gnu Compiler Collection*), disponível em <http://www.gnu.org>.

Tanto a linguagem de programação, quanto as bibliotecas e o compilador utilizados são gratuitos e multi-plataforma, o que tornou possível que o aplicativo desenvolvido também tivesse as mesmas qualidades.

¹Há uma lista dos programas de Modelagem Molecular mais utilizados em <http://www.cenapad.ufmg.br/ModelagemMolecular/node12.html>

5.2 Divulgação

Foi desenvolvida uma página na *internet* com o intuito de divulgar os resultados obtidos no presente projeto. Nesta página estão disponíveis: a última versão do *wxMol* e seu código-fonte. Tal código está disponível sob licença GPL ([GNU (2003)]). Deste modo, o programa pode ser utilizado livremente, e, mais ainda, pode ser aprimorado para aplicações mais específicas.

A página criada está disponível em <http://www.comp.ufla.br/~bruno/wxmol/>.

Capítulo 6

wxMol - Resultados e Discussões

6.1 Considerações Iniciais

Este capítulo apresenta os resultados do presente projeto, ou seja, descreve como funciona e como foi implementado o *wxMol*, quais foram as estruturas de dados e as soluções algorítmicas encontradas para suprir as necessidades de um editor/visualizador 3D de moléculas.

Em uma primeira seção é apresentado um diagrama de classes daquelas implementadas. Em seguida são explicados os aspectos principais da implementação de tais classes.

Já a seção 6.3 apresenta a solução encontrada para a correção da geometria molecular. Como o usuário desenha uma molécula à mão livre, é necessário corrigir os ângulos das ligações e as distâncias entre os átomos para que tal molécula seja condizente com a estrutura dada pelo modelo VSEPR.

Em seguida, a seção 6.4 mostra como foram implementados os Modelos Estruturais Moleculares. Apresentando as soluções encontradas para implementar os modelos pau-e-bola, de Dreiding, espaço preenchido, de linhas e ainda o modelo utilizado durante a edição da molécula.

Na seção 6.5, discute-se como foram implementadas as transformações de visualização. Por transformações de visualização entende-se as funcionalidades de rotacionar, arrastar e aplicar *zoom* a uma molécula.

A seção 6.6 explica como é possível que o usuário selecione um átomo ou ligação no espaço tridimensional, através da utilização do *mouse*.

Por fim, a última seção apresenta uma tela do aplicativo implementado, em execução.

6.2 Estrutura e Representação dos Dados

6.2.1 Organização das Classes

Utilizando-se o paradigma de orientação a objetos, foram implementadas as seguintes classes:

- `clAtomo` - define um átomo
- `clLigacao` - define uma ligação entre dois átomos
- `clMolecula` - define a molécula propriamente dita
- `clLista` - define estrutura de dados lista encadeada
- `clNohLista` - define um nó para a lista definida em `clLista`
- `wxMolGLCanvas` - define o canvas tridimensional OpenGL onde a molécula é visualizada
- `wxMolCoresDialog` - define uma caixa de diálogo para a configuração das cores utilizadas pelo aplicativo.
- `wxMolFrame` - define o *frame* principal da aplicação
- `wxMolApp` - classe principal da aplicação

A figura 6.1 traz o diagrama das classes citadas acima.

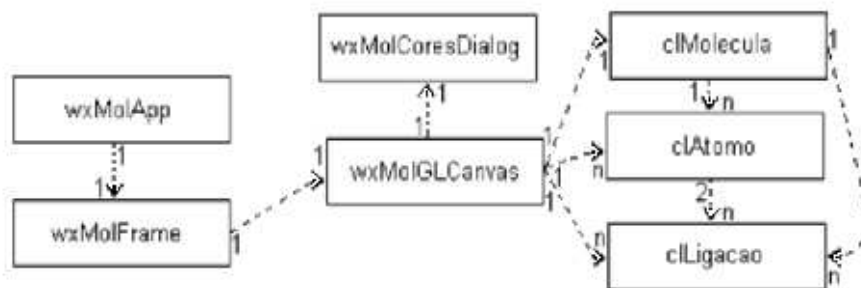


Figura 6.1: Diagrama das principais classes implementadas no *wxMol*.

Como a estrutura de dados lista é uma estrutura básica em sistemas computacionais, entende-se que a descrição das classes `clLista` e `clNoHLista` não cabe ao escopo deste trabalho.

Para se desenvolver um programa utilizando-se a biblioteca `wxWindows` é necessário definir uma classe principal que inicia e mantém o controle sobre a aplicação; esta é a função da classe `wxMolApp`. Já a classe `wxMolFrame` define o frame principal da aplicação, bem como os menus e as barras de ferramentas e de *status*. Em última análise, os menus e botões nada mais fazem do que chamar as os métodos apropriados da classe `wxMolGLCanvas`. E a classe `wxMolCoresDialog` permite que o usuário escolha as cores utilizadas para cada tipo de átomo, para representar uma ligação, para a seleção de átomos, ou ainda, para o espaço tridimensional. As outras classes implementadas são descritas com mais detalhes nas subseções a seguir.

6.2.2 Representação de uma Ligação

Uma ligação química pode ser entendida como uma atração entre dois átomos, causada pela “doação” ou compartilhamento de elétrons. É esta atração que mantém uma molécula unida. Para definir uma ligação utilizou-se os seguintes atributos:

- `id` - um número inteiro que identifica a ligação
- `tipo` - define se a ligação é simples, dupla, tripla ou quádrupla
- `origem` - aponta para um dos átomos da ligação
- `destino` - aponta para o outro átomo que forma a ligação

Apesar de utilizar-se os nomes `origem` e `destino` para os átomos que formam a ligação, deve-se lembrar que uma ligação molecular não é direcional. Ou seja, qualquer dos dois átomos poderia ser origem ou destino.

A classe `clLigacao` traz ainda funções e métodos de consulta e ajuste desses atributos, além de definir operadores de igualdade e de atribuição.

6.2.3 Representação de um Átomo

O átomo é a unidade fundamental de formação das moléculas. Para defini-lo, no programa, os principais atributos utilizados foram:

- `id` - um número inteiro que identifica o átomo

- `tipo` - define o tipo do átomo representado. Ex: carbono.
- `x`, `y` e `z` - definem a posição do átomo no espaço tridimensional
- `carga` - define a carga do átomo
- `nroLigacoes` - define o número de ligações que o átomo possui atualmente
- `geometria` - define a geometria que o átomo tende a formar: Ex: tetraédrica.
- `ligacoes` - lista de ponteiros para as ligações que o átomo possui

Os tipos de átomos atualmente suportados são: carbono, hidrogênio, oxigênio, nitrogênio, cloro, bromo, flúor, enxofre, boro, iodo, fósforo e silício. No programa são utilizados os símbolos químicos dos átomos para definir seu tipo.

Com exceção do último, a classe `clAtomo` traz funções de consulta para todos os outros atributos e, traz ainda, métodos de ajuste para `id`, `tipo`, `x`, `y`, `z`, e `carga`. O atributo `geometria` só é alterado internamente, pois ele depende do tipo de átomo em questão e dos tipos de ligação que ele possui.

Do mesmo modo, o atributo `nroLigacoes` só é alterado internamente, pelos procedimentos de adição e remoção de ligações. É importante notar que tal atributo considera uma ligação dupla, por exemplo, como duas ligações. Assim, ele não se refere à quantidade de elementos da lista de ligações. Este último valor pode ser consultado através da função de consulta ao número de ligações separadas.

Para consultar alguma ligação do átomo tem-se duas funções: uma que retorna a ligação de acordo com o identificador do outro átomo que forma a ligação e outra que recebe um índice de posição, como se as ligações estivessem em um vetor.

Há uma função para consulta do número máximo de ligações que o átomo pode fazer, sabendo-se que cada tipo de átomo possui uma valência própria. O átomo de carbono, por exemplo, é tetravalente, ou seja, pode fazer até quatro ligações simples.

Uma outra função implementada permite consultar o tamanho do raio de ligação para o tipo de átomo em questão. Este raio é utilizado para se calcular o tamanho de uma ligação, ou seja, a distância entre dois átomos ligados. Além do raio de ligação, o raio de *Van der Walls* do átomo também pode ser consultado. Tal raio é utilizado para representar os átomos no modelo estrutural molecular espaço preenchido.

Existem ainda, na classe `clAtomo`, outros atributos e métodos auxiliares que são utilizados na correção da geometria molecular. Preferiu-se não descrevê-los aqui, porque a correção da geometria molecular é explicada na seção 6.3.

6.2.4 Representação de uma Molécula

O principal atributo da classe `clMolecula` é uma lista de átomos chamada: `atomos`. Com isso, e como cada átomo possui uma lista de ligações, pode-se concluir que a molécula é representada, na verdade, por um grafo, onde os vértices são os átomos e as ligações as ligações químicas.

A estrutura de lista foi utilizada tanto na classe `clAtomo` quanto na `clMolecula` por facilitar a inserção e remoção de elementos. Uma vez que, durante a edição de uma molécula, átomos e ligações são removidos e, principalmente, incluídos a todo o tempo.

Um detalhe importante a ser notado é que, diferentemente da definição de uma molécula real, o *wxMol* permite que uma molécula seja formada por átomos não ligados. Isto foi feito para facilitar a edição de uma molécula, permitindo que o usuário, por exemplo, adicione todos os átomos à molécula primeiro para depois ligá-los.

A classe `clMolecula` possui procedimentos para adicionar e remover átomos (a partir de seus identificadores) e ligações (tanto a partir de seus identificadores, como através dos identificadores dos átomos que a formam).

Existem duas funções para consultar um átomo: a primeira consulta um átomo a partir do seu identificador, já a segunda recebe uma posição tridimensional e um raio e retorna algum átomo que esteja dentro da região (esfera) definida por tais parâmetros. Já para consultar uma ligação, é possível fazê-la tanto através de seu identificador quanto através dos identificadores dos átomos que a constituem.

Há ainda métodos ou funções para: ajustar a posição e a carga de um átomo, informar a quantidade de átomos que a molécula possui, informar os identificadores de todos os átomos que formam a molécula, corrigir a geometria, rotacionar e transladar uma molécula.

O método de correção da geometria da molécula é descrito na seção 6.3 e o de rotação e translação, na seção 6.5. É nesta classe que estão, também, os métodos para salvar ou carregar uma molécula a partir de um arquivo. Eles utilizam o formato de arquivo *WXM* descrito a seguir. A classe possui, ainda, outros métodos auxiliares, mas que não pertencem ao escopo desta monografia.

Representação de uma Molécula em um Arquivo de Computador

Existem alguns formatos de representação de moléculas em arquivo que são muito utilizados, e tornaram-se portanto formatos padrão. Existem muitos aplicativos que permitem a visualização de tais tipos de arquivo, alguns deles gratuitos. O *wx-Mol* coloca-se então em outro nicho, o de edição de moléculas, no qual não foram encontrados programas gratuitos. Deste modo, mesmo sem tal compatibilidade, o aplicativo desenvolvido é de grande valia, especialmente para seu público-alvo principal, os alunos iniciantes da área de química.

A partir disso, criou-se um formato próprio de representação em arquivo, que foi chamado de WXM. Como vimos, uma molécula, no programa, é formada por uma lista de átomos, e estes por uma lista de ligações. Deste modo, determinou-se que, em tal formato de arquivo, uma molécula é representada por uma seqüência de linhas, que trazem em cada uma a representação de um átomo, seguida de outra seqüência de linhas que representa a tabela de conectividade da molécula. Esta tabela define quais átomos estão ligados.

A linha que representa um átomo deve conter uma seqüência de valores separados por espaço, cuja ordem é a seguinte: tipo, identificador, coordenada X, coordenada Y, coordenada Z e carga. Por exemplo: N 3 0,5 0 0,3 0.

O exemplo acima descreve um átomo de nitrogênio com identificador 3, posição (0.5, 0, 0.3) e carga igual a zero.

Já para a representação da tabela de conectividade cada linha representa as ligações de um único átomo, de modo que, o primeiro número é o identificador do átomo em questão, e todos números subsequentes são os identificadores dos átomos aos quais o primeiro se liga. Todos os identificadores devem ser separados por espaços. Exemplo: 3 5 1 1

O exemplo acima indica que o átomo cujo identificador é 3, possui uma ligação simples com átomo de identificador 5 e uma ligação dupla com o átomo de identificador 1. É importante notar que uma ligação simples deve aparecer na tabela apenas uma vez, ou seja, para o exemplo citado, a linha que contém as ligações do átomo 5 não deve ter o átomo 3 como ligante, uma vez que esta ligação já foi representada.

Deste modo, qualquer molécula editada no programa, pode ser salva ou carregada a partir de um arquivo. O formato de arquivo prevê ainda que não devem existir linhas em branco e que linhas começadas com o caractere '#' são consideradas comentários.

A figura 6.2 mostra, como exemplo, a representação em arquivo da molécula

de etano. Tal molécula é formada por dois átomos de carbono e seis de hidrogênio. Cada carbono é ligado a três hidrogênios e os carbonos são ligados entre si (veja figura 4.1).

```
# wxMol - Este arquivo descreve uma molécula de etano: C2H6
#
# Tipo ID x y z carga
C 0 0,217963 0,166577 0,410015 0
C 1 0,029081 0,174200 0,446374 0
H 2 0,240876 0,079265 0,311320 0
H 3 0,261222 0,287701 0,373319 0
H 4 0,283016 0,127460 0,520138 0
H 5 0,006168 0,261511 0,545067 0
H 6 -0,035972 0,213316 0,336250 0
H 7 -0,014177 0,053075 0,483069 0
#
# Ligacoes de cada atomo
0 1 2 3 4
1 5 6 7
2
3
4
5
6
7
```

Figura 6.2: Exemplo de arquivo para a molécula de etano no formato WXM, utilizado pelo wxMol.

6.2.5 O Canvas Tridimensional *OpenGL*

A classe `wxMolGLCanvas` define o canvas tridimensional onde a molécula é desenhada; com isso, é ela que controla toda a interação do usuário com a molécula. O principal atributo desta classe é um objeto da classe `clMolecula`.

Para que o usuário possa inserir, selecionar ou arrastar elementos da molécula, esta classe provê métodos de tratamento de eventos de mouse e teclado. São estes métodos que tornam o `wxMol` amigável ao usuário.

Uma outra funcionalidade do aplicativo, que é controlada por esta classe, é a correção automática da geometria da molécula. Quando tal opção está habilitada,

a molécula é automaticamente corrigida após qualquer alteração feita pelo usuário. Se preferir, o usuário pode desabilitá-la e corrigir a estrutura somente no final. De qualquer forma, espera-se que a molécula desenhada seja equivalente à molécula dada pelo modelo VSEPR.

Há ainda um método para controlar a aproximação e o afastamento da molécula. A idéia de tal funcionalidade é descrita na seção 6.5.3.

A subseção a seguir trata das particularidades utilizadas da biblioteca *OpenGL* nesta classe.

Aspectos relativos à biblioteca OpenGL

Para que se possa desenhar em um canvas tridimensional *OpenGL* é necessário definir o tipo de projeção a ser utilizado. Segundo [Neider & Davis (1997)] especificar uma projeção é como escolher as lentes para uma câmera. Tal escolha permite escolher qual o campo de vista ou o volume visível da região tridimensional.

Existem dois tipos de projeção: a paralela e a perspectiva. Na primeira, elementos próximos ou distantes possuem o mesmo tamanho, sendo útil, por exemplo, para aplicações de engenharia e arquitetura. Já na segunda, objetos mais distantes possuem tamanho menor, assim como acontece em nossos olhos, o que proporciona uma sensação tridimensional melhor. Apesar disso, utilizou-se a projeção paralela porque, com ela, os cálculos utilizados na classe são mais simples.

Definiu-se, então, o volume do cubo, com diagonal formada pelos pontos $(-1, -1, -1)$ e $(1, 1, 1)$, como sendo o volume visível da projeção paralela. É por isso que, às vezes, quando uma molécula é aproximada, alguns átomos somem como se tivessem saído para fora da tela. Na verdade então, eles saíram do volume de visualização.

É importante notar que, ao definir tal volume, as coordenadas da janela do programa não correspondem às coordenadas do espaço tridimensional. A biblioteca *wxWindows* define o canto superior esquerdo da janela como o ponto $(0, 0)$ e o canto inferior direito como o ponto $(largura\ da\ janela, altura\ da\ janela)$. Mas tais pontos corresponderiam, no sistema de coordenadas do espaço tridimensional, aos pontos $(-1, 1, z)$ e $(1, -1, z)$, respectivamente, onde z pode ser qualquer valor entre -1 e 1 .

Suponha, então, que o usuário está adicionando um átomo e clicou com o *mouse* na posição (M_x, M_y) da tela. Para adicionar o átomo na molécula é necessário informar a posição no espaço tridimensional que tal átomo deve ficar, ou

seja, deve-se transformar a coordenada bidimensional (M_x, M_y) na coordenada tridimensional correspondente. Para isso utilizou-se a função `glUnproject`, da biblioteca GLU. Tal função faz exatamente a transformação de um ponto da janela em um ponto no espaço 3D. O único detalhe, é que ela considera o canto inferior esquerdo como o ponto $(0, 0)$ e não o superior direito. Logo, para descobrir a posição que o átomo deve ser inserido na molécula deve-se passar à tal função o ponto $(M_x, altura\ da\ janela - M_y)$.

Esta função é utilizada, também, para ajustar a posição do átomo enquanto ele está sendo arrastado pelo usuário, ou ainda, para quando o usuário está desenhando uma ligação.

Em contra-partida, às vezes, é necessário transformar um ponto do sistema 3D para o sistema de coordenadas da janela. A biblioteca GLU também traz uma função para tal propósito, a `glProject`. Analogamente, basta passar à função as três coordenadas do espaço tridimensional que serão obtidas as coordenadas da janela. Novamente, levando-se em conta a questão do ponto $(0, 0)$ citada anteriormente, sendo (P_x, P_y) o ponto retornado pela função, basta utilizar o ponto $(P_x, altura\ da\ janela - P_y)$ ao invés dele. A seleção de átomos e ligações (veja seção 6.6) e o arraste de átomos utilizam esta função.

A utilização de tal transformação permite, ainda, transformar uma distância do espaço 3D em uma distância 2D. Considere d_3 a distância tridimensional e d_2 a distância na janela que se deseja obter. Assim, ao transformar o ponto $(d_3, 0, 0)$, utilizando a função citada, encontra-se um ponto 2D dado por $(x, 0)$, tal que, $d_2 = x - \frac{largura\ da\ janela}{2}$. Tal abordagem é muito útil e também é utilizada na seleção de átomos.

Como discutido na seção 4.4, existem técnicas que tornam uma imagem tridimensional mais realista; uma destas técnicas é a iluminação. Deste modo, foram utilizados sistemas de iluminação: ambiente, especular e difusa e o método de Gouraud, disponíveis na biblioteca *OpenGL*. Maiores informações sobre estas técnicas podem ser encontradas em [Neider & Davis (1997)] ou [Foley (1990)]. Para se ter uma idéia da importância da utilização de um sistema de iluminação veja a figura 6.3. A diferença de sensação tridimensional é nítida.

6.3 Correção da Geometria Molecular

O aplicativo desenvolvido permite que o usuário desenhe uma molécula livremente, ou seja, ele pode colocar os átomos em qualquer posição da janela de desenho, e pode ainda, posteriormente, arrastá-los para outras posições. Com isso, a ge-

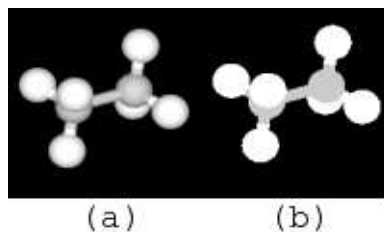


Figura 6.3: Importância do sistema de iluminação para um ambiente tridimensional. A mesma molécula: em (a) com o sistema de iluminação utilizado no *wxMol*, e em (b) com o sistema de iluminação *OpenGL* desabilitado

ometria da molécula desenhada, dificilmente coincidirá com a geometria que tal molécula deveria possuir, segundo o modelo VSEPR (veja figura 6.4). Deste modo, torna-se necessária a correção da geometria da molécula, ou seja, é preciso corrigir os ângulos entre as ligações e os tamanhos das mesmas para que a estrutura dela fique condizente com o modelo VSEPR.

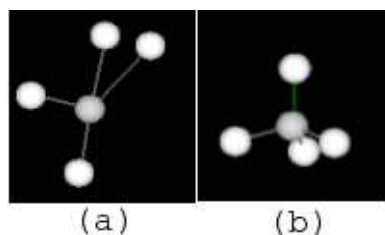


Figura 6.4: Ao desenhar uma molécula no *wxMol* à mão livre ela pode não estar na geometria correta. Em (a) temos uma molécula de metano desenhada à mão livre e em (b) a sua geometria corrigida.

O *wxMol* permite corrigir a geometria da molécula depois que ela foi desenhada, bem como, automaticamente, à medida que a molécula vai sendo desenhada. A solução encontrada para tal funcionalidade é apresentada nas próximas subseções.

6.3.1 Posições Padrão dos Átomos Ligantes

O capítulo 3, apresentou as possíveis formas que uma molécula pode assumir. A partir daí, o primeiro passo da solução implementada no *wxMol*, é a definição

de posições padrão para os átomos ligantes em cada geometria. Entende-se por átomos ligantes aqueles que se ligam ao átomo que define a geometria; este último será chamado de átomo central. Ou seja, escolhe-se uma situação ideal e calculam-se, para cada geometria apresentada, quais as posições que os átomos ligantes deveriam estar nesta situação.

A situação ideal escolhida é aquela na qual o átomo central está na origem do sistema de coordenadas cartesianas, o ponto $(0, 0, 0)$, e um dos átomos ligantes está na posição $(0, t, 0)$. Considera-se ainda que todas as ligações têm o mesmo tamanho t , e para facilitar a explicação, chama-se tal átomo de átomo da primeira ligação

A partir desta situação ideal a posição dos outros átomos ligantes depende da geometria do átomo central em questão. A seguir tem-se os cálculos utilizados para descobrir a posição de todos os átomos ligantes para cada geometria molecular.

Geometria Linear

Na geometria linear o átomo central se liga a dois outros átomos formando um ângulo de 180° entre as ligações (veja a figura 3.5). Deste modo, para a situação ideal apresentada, é claro que, a posição do outro átomo ligante deverá ser $(0, -t, 0)$.

Geometria Trigonal Planar

Como já foi apresentado, nesta geometria o átomo central se liga a outros três átomos formando uma estrutura planar com ângulo de 120° entre as ligações (veja figura 3.4). Observando a figura 6.5, é fácil perceber que a posição do átomo da segunda ligação (l_2) pode ser calculada assim:

$$\cos(30^\circ) = \frac{x_2}{t} \Rightarrow x_2 = t \cdot \cos(30^\circ) \Rightarrow x_2 = \frac{\sqrt{3} \cdot t}{2} \quad (6.1)$$

$$\text{sen}(-30^\circ) = \frac{y_2}{t} \Rightarrow y_2 = -t \cdot \text{sen}(30^\circ) \Rightarrow y_2 = -\frac{t}{2} \quad (6.2)$$

$$z_2 = 0 \quad (6.3)$$

Calculada a posição do átomo da segunda ligação é fácil perceber que a posição do átomo da terceira ligação (l_3) deverá ser $(-x_2, -y_2, 0)$.

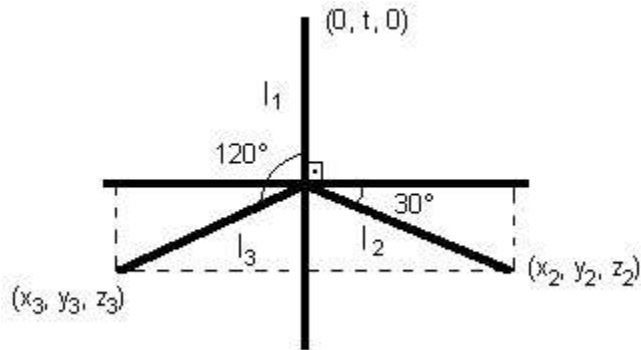


Figura 6.5: Ângulos e posições padrão para a geometria trigonal planar

Geometria Tetraédrica

Neste caso, o átomo central se liga a quatro outros átomos formando um tetraedro, no qual as ligações possuem um ângulo de aproximadamente $109,47^\circ$ entre si (figura 3.1). A posição do átomo ligante da segunda ligação (l_2) pode ser calculada como descrito abaixo, conforme pode ser conferido na figura 6.6.

$$\cos(19,47^\circ) = \frac{x_2}{t} \Rightarrow x_2 = t \cdot \cos(19,47^\circ) \quad (6.4)$$

$$x_2 = t \cdot \text{sen}(109,47^\circ) \quad (6.5)$$

$$\text{sen}(-19,47^\circ) = \frac{y_2}{t} \Rightarrow y_2 = -t \cdot \text{sen}(19,47^\circ) \quad (6.6)$$

$$y_2 = t \cdot \cos(109,47^\circ) \quad (6.7)$$

$$z_2 = 0 \quad (6.8)$$

A coordenada y_2 do átomo da segunda ligação também pode ser calculada através do produto escalar entre os vetores formados pela primeira e segunda ligações. Lembre-se que foi definido que todas as ligações têm tamanho t , portanto a norma de qualquer dos vetores que formam as ligações terá este valor.

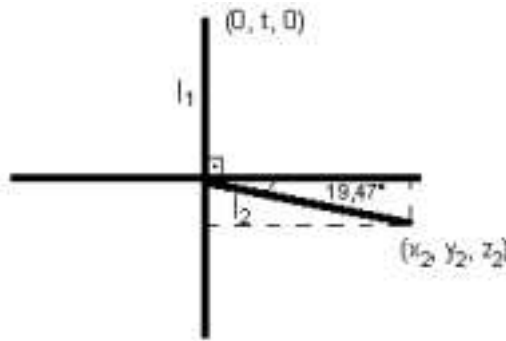


Figura 6.6: Posições padrão dos átomos da primeira e segunda ligações de uma geometria tetraédrica

$$\vec{l}_1 \cdot \vec{l}_2 = |\vec{l}_1| \cdot |\vec{l}_2| \cdot \cos(109,47^\circ) \quad (6.9)$$

$$\cos(109,47^\circ) = \frac{x_2 \cdot 0 + y_2 \cdot t + z_2 \cdot 0}{t \cdot t} \quad (6.10)$$

$$y_2 = t \cdot \cos(109,47^\circ) \quad (6.11)$$

Nota-se que, ao calcular o produto escalar entre os vetores l_1 e l_3 e entre os vetores l_1 e l_4 , seria encontrado o mesmo valor da coordenada y calculado para a segunda ligação. Ou seja:

$$y_2 = y_3 = y_4 = t \cdot \cos(109,47^\circ) \quad (6.12)$$

Calculando, agora, o produto escalar entre os vetores l_2 e l_3 pode-se encontrar x_3 . Chamando de θ o ângulo de $109,47^\circ$, tem-se:

$$\vec{l}_2 \cdot \vec{l}_3 = |\vec{l}_2| \cdot |\vec{l}_3| \cdot \cos(\theta) \quad (6.13)$$

$$\cos(\theta) = \frac{x_3 \cdot t \cdot \text{sen}(\theta) + t \cdot \cos(\theta) \cdot t \cdot \cos(\theta) + z_3 \cdot 0}{t \cdot t} \quad (6.14)$$

$$t^2 \cdot \cos(\theta) = x_3 \cdot t \cdot \text{sen}(\theta) + t^2 \cdot \cos^2(\theta) \quad (6.15)$$

$$x_3 \cdot t \cdot \text{sen}(\theta) = -t^2 \cos^2(\theta) + t^2 \cdot \cos(\theta) \quad (6.16)$$

$$x_3 = \frac{t^2 \cdot \cos(\theta) - t^2 \cdot \cos^2(\theta)}{t \cdot \text{sen}(\theta)} \quad (6.17)$$

$$x_3 = \frac{t \cdot \cos(\theta)(1 - \cos(\theta))}{\text{sen}(\theta)} \quad (6.18)$$

$$x_3 = t \cdot \text{ctg}(\theta)(1 - \cos(\theta)) \quad (6.19)$$

Similarmente, calculando-se o produto escalar entre os vetores l_2 e l_4 percebe-se que $x_3 = x_4$. Resta, apenas, calcular os valores das coordenadas z dos átomos ligantes da terceira e quarta ligações. Para isso, recorre-se a fórmula da norma de um vetor; para a terceira ligação, tem-se:

$$t = \sqrt{x_3^2 + y_3^2 + z_3^2} \quad (6.20)$$

$$z_3^2 = t^2 - x_3^2 - y_3^2 \quad (6.21)$$

$$z_3 = + - \sqrt{t^2 - x_3^2 - y_3^2} \quad (6.22)$$

Utilizando o mesmo cálculo de norma para a quarta ligação encontra-se o mesmo resultado. É claro, que z_3 não pode ser igual a z_4 , pois, neste caso, o ângulo entre a terceira e a quarta ligações seria de 0° . Conclui-se, então, que z_3 e z_4 possuem sinais opostos. Desta forma decidiu-se que:

$$z_3 = -z_4 = \sqrt{t^2 - x_3^2 - y_3^2} \quad (6.23)$$

Com isso, foram encontradas as posições de todos os quatro átomos ligantes da geometria tetraédrica.

Geometria Trigonal-Bipiramidal

Esta geometria pode ser vista na figura 3.6. As posições dos átomos ligantes neste tipo de arranjo tridimensional é muito simples de se calcular.

Considerando que l_1 , l_2 e l_3 sejam as ligações coplanares que formam um ângulo de 120° entre si e considerando, ainda, que tais ligações estejam no plano XY (veja figura 6.7), é evidente que as posições dos átomos ligantes das três primeiras ligações são as mesmas dos átomos da geometria trigonal planar (subseção 6.3.1).

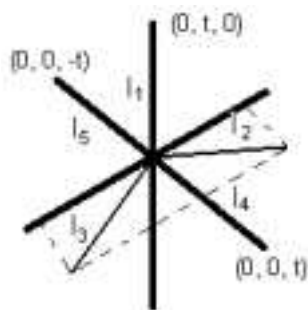


Figura 6.7: Posições padrão dos átomos ligantes em uma geometria trigonal bipiramidal. As posições dos átomos da segunda e terceira ligações são as mesmas da geometria trigonal planar.

É também evidente que:

$$l_4 = (0, 0, t) \quad e \quad l_5 = (0, 0, -t) \quad (6.24)$$

Portanto, sem nenhum cálculo a mais, puderam ser encontradas as posições de todos os átomos ligantes de tal geometria.

Geometria Octaédrica

Esta geometria, apesar de ser formada por seis ligações (figura 3.6), possui posições padrão de átomos ligantes muito claras, dispensando maiores explicações.

A figura 6.8 traz as posições dos átomos ligantes desta geometria.

Exceções

Como foi apresentado na seção 3.2, quando existem pares de elétrons não compartilhados, ou quando existem ligações duplas, as posições dos átomos ligantes são

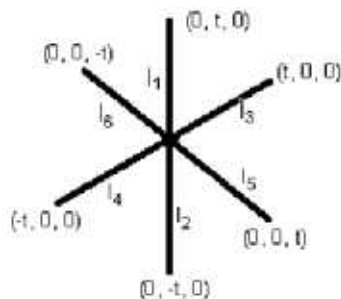


Figura 6.8: Posições padrão dos átomos ligantes em uma geometria octaédrica

ligeiramente diferentes das propostas pelo modelo VSEPR. Como tais diferenças são relativamente pequenas, decidiu-se implementar apenas o caso em que ela é maior: uma geometria tetraédrica com dois pares de elétrons não compartilhados. Tal caso, acontece, por exemplo, com o oxigênio (figura 3.3).

Calcular a posição padrão do átomo da segunda ligação neste caso é muito simples. Conforme pode ser visto na figura 6.9, tal posição pode ser encontrada assim:

$$\cos(14,5^\circ) = \frac{x_2}{t} \Rightarrow x_2 = t \cdot \cos(14,5^\circ) \quad (6.25)$$

$$\text{sen}(-14,5^\circ) = \frac{y_2}{t} \Rightarrow y_2 = -t \cdot \text{sen}(14,5^\circ) \quad (6.26)$$

$$z_2 = 0 \quad (6.27)$$

Depois de todos estes cálculos, tem-se as posições padrão dos átomos ligantes em todas as geometrias apresentadas. A próxima subseção mostrará como transformar tais posições padrão nas posições reais que os átomos devem ocupar em uma molécula para que sua geometria seja considerada correta.

6.3.2 Posições Reais dos Átomos Ligantes

Depois de encontradas as posições padrão dos átomos ligantes para cada geometria, é necessário transformá-las em posições reais na molécula.

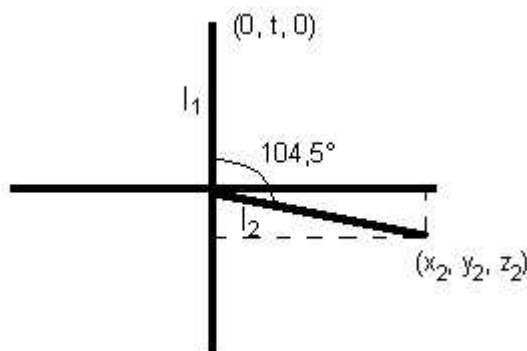


Figura 6.9: Posições padrão dos átomos ligantes em uma molécula de água.

Para corrigir as posições dos átomos ligantes de uma molécula que tenha sido desenhada à mão livre pelo usuário, como a mostrada na figura 6.4, e que possua apenas um átomo central, o método utilizado é o seguinte:

- Uma das ligações é escolhida como sendo a primeira ligação (l_1). Tal ligação não terá a sua direção modificada.
- A partir da posição do átomo ligante da primeira ligação, calculam-se quais deveriam ser as posições dos outros átomos ligantes em relação ao átomo central.
- Transformam-se as posições relativas ao átomo central em posições absolutas do espaço tridimensional da molécula.
- Corrige-se o tamanho das ligações

Na verdade, encontrar as posições dos átomos ligantes relativas ao átomo central nada mais é do que transformar as posições padrão do sistema de coordenadas da situação ideal para um sistema de coordenadas onde o átomo central está na origem e os eixos coincidem com os eixos do sistema de coordenadas da molécula. O sistema de coordenadas da situação ideal será chamado SC_p , o relativo ao átomo central de SC_a , e o da molécula de SC_m . Para que as posições sejam encontradas, posiciona-se o eixo Y do SC_p de maneira a coincidir com a direção da primeira ligação (l_1) escolhida. Para melhor compreensão veja a figura 6.10. Observe que as posições, em tal figura, são dadas no SC_m .

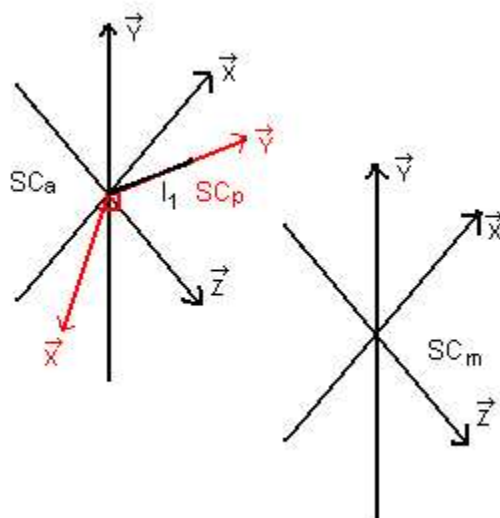


Figura 6.10: Sistemas de coordenadas: da molécula (SC_m), do átomo (SC_a), e da situação ideal ou padrão (SC_p , em vermelho). SC_a tem origem na posição do átomo central e eixos na mesma direção dos eixos de SC_m . Já no SC_p , o eixo Y tem a mesma direção da primeira ligação, l_1 ; o eixo X é paralelo ao plano XY de SC_a ; e o eixo Z deverá ser encontrado pelo produto vetorial entre os eixos X e Y .

Além de corrigir os ângulos, é necessário também corrigir os comprimentos das ligações. Deste modo, antes de encontrar as posições dos outros átomos ligantes, a ligação l_1 tem seu comprimento corrigido. A subseção 6.3.2 apresentará como esta correção pode ser feita.

Decidida a direção do eixo Y de SC_m em relação ao SC_a , deve-se agora escolher a direção do eixo X . Em princípio, a direção do eixo X poderia ser qualquer direção perpendicular à direção da primeira ligação (será chamado de \vec{y} o vetor que possui a mesma direção e tamanho da primeira ligação). Mas, a fim de facilitar os cálculos, decidiu-se que a direção do eixo X seria aquela perpendicular a \vec{y} que estivesse no plano XY de SC_a .

Para encontrar a direção do eixo X , antes calcula-se qual é o vetor \vec{y} . Sendo (O_x, O_y, O_z) e (q_{1x}, q_{1y}, q_{1z}) as posições, respectivamente, do átomo central e do átomo ligante da primeira ligação no sistema de coordenadas da molécula, SC_m , o vetor \vec{y} pode ser dado por:

$$\vec{y} = (q_{1x} - O_x, q_{1y} - O_y, q_{1z} - O_z) \quad (6.28)$$

Chamando, então, de \vec{x} um vetor em SC_a que possui a mesma direção do eixo X de SC_p , é verdade que:

$$\vec{x} \cdot \vec{y} = |\vec{x}| \cdot |\vec{y}| \cdot \cos(90^\circ) \quad (6.29)$$

$$x_x \cdot y_x + x_y \cdot y_y + 0 \cdot y_z = 0 \quad \Rightarrow \quad x_x \cdot y_x + x_y \cdot y_y = 0 \quad (6.30)$$

Substituindo x_x por y_y e $x_y = -y_x$, verifica-se que tais valores satisfazem a equação acima:

$$y_y \cdot y_x - x_x \cdot x_y = 0 \quad \Rightarrow \quad 0 = 0 \quad (6.31)$$

Logo, o vetor x em SC_a que possui a mesma direção do eixo X do SC_p é dado por $\vec{x} = (y_y, -y_x, 0)$.

Tais cálculos só não podem ser utilizados quando o vetor \vec{y} é perpendicular ao plano XY do SC_a . Neste caso o valor encontrado para \vec{x} seria $(0, 0, 0)$, que obviamente não é um vetor. Deste modo, quando isso acontece, o valor de \vec{x} é escolhido como $(Y_z, 0, 0)$.

Falta, agora, encontrar a direção do eixo Z de SC_p no SC_a . Sabe-se, que aplicando o produto vetorial entre dois vetores, obtém-se um vetor perpendicular a ambos. É isto que pode ser feito com os vetores \vec{x} e \vec{y} , para encontrar um vetor \vec{z} que tenha a mesma direção do eixo Z citado:

$$\vec{z} = (x_y \cdot y_z - x_z \cdot y_y, x_x \cdot y_z - x_z \cdot y_x, x_x \cdot y_y - x_y \cdot y_x) \quad (6.32)$$

Definidas as direções dos eixos do SC_p no SC_a , pode-se agora transformar as posições padrão para o sistema de coordenadas relativo ao átomo central, SC_a . A posição do átomo ligante da primeira ligação não será modificada. É necessário, agora, encontrar as posições dos outros átomos ligantes para que a geometria da molécula fique correta. Para isso, primeiramente normalizam-se os vetores \vec{x} , \vec{y} e \vec{z} encontrados (para normalizar um vetor basta dividir cada coordenada pela norma do vetor).

Em seguida, sendo l_i a posição do átomo ligante da i^{esima} ligação no SC_p (com $i \geq 2$), e q_i a posição correspondente no SC_a , q_i pode ser assim encontrado:

$$q_i x = l_{ix} x_x + l_{iy} y_x + l_{iz} z_x \quad (6.33)$$

$$q_i y = l_{ix} x_y + l_{iy} y_y + l_{iz} z_y \quad (6.34)$$

$$q_i z = l_{ix} x_z + l_{iy} y_z + l_{iz} z_z \quad (6.35)$$

Do mesmo modo que foi feito para a primeira ligação, devem ser corrigidos, também, os comprimentos das outras ligações (veja subseção 6.3.2).

Falta apenas transformar as posições dadas no SC_a para posições no sistema de coordenadas da molécula, SC_m . Como os eixos de SC_a possuem a mesma direção e sentido dos eixos de SC_m , e as posições foram encontradas em relação ao átomo central, basta transladar [Foley (1990)] os pontos encontrados de acordo com a posição do átomo central.

Assim, sendo q'_i a posição do átomo ligante da i^{esima} ligação depois da mesma ter tido seu comprimento corrigido, e p_i a mesma posição transformada para o SC_m , p_i pode ser dado por:

$$p_i x = q'_i x + O_x \quad (6.36)$$

$$p_i y = q'_i y + O_y \quad (6.37)$$

$$p_i z = q'_i z + O_z \quad (6.38)$$

Com isso, pode-se corrigir uma molécula desenhada à mão-livre pelo usuário. Mas, lembre-se que esta seção apresentou a correção da geometria de uma molécula que possua apenas um átomo central. A seção 6.3.3 apresentará o algoritmo utilizado para corrigir uma molécula mais complexa. Antes disso, a subseção a seguir apresenta os cálculos utilizados para corrigir os comprimentos das ligações.

Correção dos Comprimentos das Ligações

Segundo [Barbosa (1998)], o comprimento c de uma ligação entre dois átomos A e B é dado pela seguinte equação:

$$c = r_A + r_B \quad (6.39)$$

Onde r_A e r_B são os raios de ligação dos átomos A e B , respectivamente. O raio depende tanto do tipo do átomo quanto do tipo da ligação. Em uma ligação dupla, por exemplo, o raio de ligação é menor que em uma ligação simples

Deste modo, para corrigir o comprimento de uma ligação, e conseqüentemente a posição do átomo ligante de tal ligação, primeiro calcula-se o comprimento que tal ligação deve ter. Para isso, sendo r_O o raio de ligação do átomo central e r_L o raio de ligação do átomo ligante cuja ligação está sendo corrigida, o comprimento c da ligação pode ser dado por:

$$c = r_O + r_L \quad (6.40)$$

Considerando (O_x, O_y, O_z) a posição do átomo central e \vec{v} o vetor unitário que possui a mesma direção da ligação, a posição correta do átomo ligante (p_A) pode ser encontrada assim:

$$p_A = (O_x + c.v_x, O_y + c.v_y, O_z + c.v_z) \quad (6.41)$$

É assim que o programa corrige o comprimento de uma ligação qualquer.

6.3.3 Algoritmo de Correção da Geometria Molecular

Já foi apresentado como corrigir a geometria de uma molécula que possua, apenas, um átomo central. Para moléculas que possuam mais de um átomo central, o modelo VSEPR diz que a geometria da molécula é dada pela geometria de cada átomo central.

Ao contrário do que possa parecer, aplicar tal definição não é algo tão simples. Imagine, por exemplo, uma molécula com dois átomos centrais. Poderia-se pensar que basta aplicar a correção apresentada na seção anterior nos dois átomos. Mas veja que, depois de corrigida a geometria do primeiro átomo central, a correção

do segundo não pode alterar as posições dos átomos que participam de geometria do primeiro átomo central; caso contrário, ela precisaria ser corrigida novamente. O que poderia alterar a geometria do segundo átomo central, precisando corrigi-la novamente, e assim sucessivamente.

Além disso, seria interessante que um algoritmo de correção da geometria de uma molécula evitasse alterações bruscas na molécula desenhada. Ou seja, ao corrigir a posição de um átomo ligante, o algoritmo deveria colocá-lo em uma posição correta mais próxima possível de sua posição atual. Isto tornaria o programa mais amigável ao usuário. A figura 6.11 ilustra tal situação.

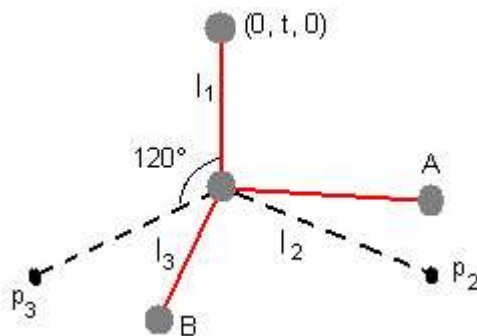


Figura 6.11: Ao corrigir as posições dos átomos ligantes, um algoritmo de correção da geometria molecular deve levar em conta as suas posições atuais. Na figura, o ideal é que o átomo *A* seja colocado na posição possível mais próxima p_2 , e o átomo *B*, na posição p_3 . Isso evitaria mudanças bruscas na molécula desenhada.

A fim de solucionar tais questões, foi implementado, no *wxMol*, o seguinte algoritmo:

```
CorrigirGeometriaDaMolécula()
```

```
  Para cada átomo da molécula:
```

```
    Se ele não foi visitado e possui pelo menos uma ligação:
      CorrigirGeometriaDoAtomo(átomo).
```

```
CorrigirGeometriaDoAtomo(átomo central)
```

```
  Átomo central é marcado como visitado.
```

```
  Se alguma ligação ou átomo ligante ao átomo central já foi
```

visitado:

A ligação visitada ou a ligação de tal átomo ligante visitado é escolhida como a primeira ligação.

O átomo ligante de tal ligação é marcado para não ter sua posição alterada.

Caso contrário:

A primeira ligação da lista de ligações do átomo central é escolhida como a primeira ligação.

Se o átomo ligante da primeira ligação não pode ter a sua posição alterada:

Corrige-se o comprimento da primeira ligação alterando a posição do átomo central.

Caso contrário:

Corrige-se o comprimento da primeira ligação alterando a posição do átomo ligante.

Se a primeira ligação ainda não foi visitada:

Ela é marcada como visitada

Se o átomo central possui mais de uma ligação:

Calcular as posições corretas para os átomos ligantes do átomo central.

Para cada ligação do átomo central:

Se a ligação ainda não foi visitada:

Altera-se a posição do átomo ligante da ligação atual para a posição correta mais próxima, que ainda não tenha sido utilizada.

Corrige-se o comprimento da ligação alterando a posição do átomo ligante.

A posição utilizada é marcada para não ser utilizada por outro átomo ligante.

A ligação é marcada como visitada.

Para cada átomo ligante do átomo central:

Se o átomo ainda não foi visitado:

CorrigirGeometriaDoAtomo(átomo ligante).

Este algoritmo implementado necessita de melhorias. Repare que, ao corrigir a geometria de um átomo central, o algoritmo não permite que os átomos que

participam desta geometria sejam modificados novamente. Isto pode fazer com que moléculas que possuam circuito fechado, como o benzeno, por exemplo, não tenham a sua geometria corrigida corretamente.

Mas, para amenizar tal problema, o programa indica para o usuário que a geometria atual não está correta. Verificou-se que, se o usuário, a partir daí alterar as posições dos átomos que formam o circuito fechado, e corrigir novamente a geometria da molécula, ela pode chegar a possuir a geometria correta. Tal situação não é a ideal, mas pelo curto período de tempo para a realização deste projeto, ela não pôde ser corrigida.

Outro fator a ser considerado, em relação ao algoritmo, é que, a determinação da geometria de moléculas complexas é mais difícil do que apresentado no capítulo 3. Ou seja, na verdade, os átomos ligantes de um átomo central influem na geometria dos outros átomos centrais da molécula, devido à repulsão entre os elétrons. A figura 6.12 ilustra este fato.

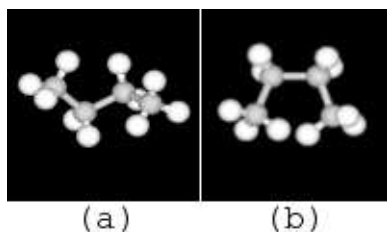


Figura 6.12: Segundo o modelo VSEPR, em uma molécula os átomos tendem a se posicionar de maneira que seus elétrons fiquem o mais distante possível. Deste modo a geometria dos átomos centrais de uma molécula depende em maior ou menor escala de todos os átomos da molécula. Em (a) tem-se a geometria correta de uma molécula e em (b) a mesma molécula em uma solução encontrada pelo *wxMol*. Como se vê, em tal solução, apesar de todos os átomos centrais possuírem uma geometria correta, a molécula como um todo não possui.

Apesar destas limitações, acredita-se que a correção implementada no *wxMol* é razoável, e não impede que o programa seja utilizado para fins didáticos, especialmente para os alunos de início de graduação da área de química. Propõe-se, assim, que tais correções sejam implementadas em trabalhos futuros.

6.4 Implementação dos Modelos Estruturais Moleculares

O *wxMol* permite que uma molécula seja visualizada em cinco modelos estruturais: os três modelos citados na seção 4.2 - varetas, pau-e-bola e espaço preenchido - e ainda dois outros modelos: o modelo de linhas e o de edição.

Os quatro primeiros modelos são utilizados apenas para visualização, ou seja, o usuário não pode editar uma molécula enquanto os utiliza. Para editar uma molécula deve-se utilizar o modelo de edição, o qual é muito parecido com o modelo pau-e-bola, tendo como, única diferença, o fato de que as ligações são representadas por linhas e não por cilindros.

O modelo de edição foi criado porque, como um computador consegue desenhar uma linha bem mais rapidamente que um cilindro, a resposta ao usuário é mais rápida neste modelo, tornando o aplicativo mais amigável durante a edição de uma molécula.

Da mesma maneira, o modelo de linhas tem como única diferença, em relação ao modelo de varetas, o fato das ligações serem representadas por linhas e não por cilindros.

Na implementação destes modelos foram utilizadas os métodos de translação, rotação e de desenho de linhas da biblioteca *OpenGL* e métodos de desenho de esfera e cilindro da biblioteca *GLU*.

6.4.1 Desenho de um Átomo

Para desenhar um átomo, nos modelos nos quais ele deve ser explicitamente representado, utilizou-se a função de desenho de esfera com um raio apropriado para cada modelo. No modelo espaço preenchido tal raio é proporcionalmente igual ao raio de *Van der Waals*. Já nos modelos de edição e pau-e-bola quaisquer raios poderiam ser utilizados desde que não impedissem a visualização das ligações. Decidiu-se, então, escolher um valor padrão para o modelo de edição e um raio um pouco maior que este para o modelo pau-e-bola. No modelo de edição o raio é menor apenas para facilitar a edição da molécula.

No modelo de varetas um átomo não deve ser explicitamente representado. Mas as bases de um cilindro desenhado pela biblioteca *GLU* não são fechadas. Assim, para melhorar o visual de tal modelo, são desenhadas na posição de cada átomo, esferas com raio igual ao raio do cilindro.

Deve-se ter em mente que os raios das esferas são proporcionalmente alterados quando o usuário utiliza a funcionalidade de aproximar ou afastar uma molécula

(*zoom*). Para maiores detalhes veja a seção 6.5.3.

O aplicativo implementado permite que cada tipo de átomo seja desenhado com uma cor diferente, a fim de facilitar a identificação dos mesmos em uma molécula. O usuário pode escolher a cor de cada tipo de átomo, mas o aplicativo traz como padrão as cores do modelo CPK. A figura 6.13 mostra as cores de cada átomo em tal modelo.




Átomo	Cor	Valor (R, G, B)
Carbono		(200, 200, 200)
Oxigênio		(240, 0, 0)
Hidrogênio		(255, 255, 255)
Nitrogênio		(143, 143, 255)
Enxofre		(255, 200, 50)
Cloro		(0, 255, 0)
Bromo		(165, 42, 42)
Outros		(255, 20, 147)

Figura 6.13: O modelo estrutural criado por Corey, Pauling e Koltun (CPK) definiu, também, as cores nas quais cada átomo deveria ser representado. A figura traz as cores dos átomos suportados pelo *wxMol*. **Fonte:** <http://www.inrp.fr/Access/biotic/rastop/help/colour.htm>

6.4.2 Desenho de uma Ligação

Para desenhar uma ligação nos modelos estruturais implementados, primeiramente faz-se uma translação para a posição de um dos átomos. Isto faz com que este esteja agora na origem do sistema de coordenadas.

Em seguida, encontra-se o vetor que representa a ligação. Sendo \vec{v} tal vetor, T_i a coordenada i de um átomo T qualquer e B o átomo que está na origem do sistema de coordenadas, é claro que, o vetor que representa a ligação entre dois átomos A e B pode ser dado por $\vec{v} = (A_x - B_x, A_y - B_y, A_z - B_z)$. O desenho da ligação depende agora de cada modelo.

Para o modelo de edição, no qual uma ligação tem uma única cor e ligações múltiplas têm que ser explicitamente representadas, utiliza-se o método básico de desenho de linha da biblioteca *OpenGL*. Tal método permite o desenho de uma linha bastando apenas informar os pontos de início e fim da mesma.

Assim, para se desenhar uma ligação simples, basta utilizar tal função, usando as posições $(0, 0, 0)$ e (V_x, V_y, V_z) . Já para uma ligação dupla ser desenhadas duas linhas. Para a primeira, sendo r o raio padrão de um átomo, utiliza-se as posições $(V_x + r, V_y + r, V_z + r)$ e $(\frac{r}{2}, \frac{r}{2}, \frac{r}{2})$ e a segunda as posições $(V_x - r, V_y - r, V_z - r)$ e $(-\frac{r}{2}, -\frac{r}{2}, -\frac{r}{2})$. Já para uma ligação tripla desenham-se três linhas utilizando as posições das ligações simples e dupla.

Já o modelo de linhas tem algumas diferenças em relação ao modelo de edição no que se refere ao desenho das ligações. Nele qualquer ligação é representada por uma única linha e cada metade da linha é desenhada com a cor do átomo a qual se liga. Assim se há uma ligação entre os átomos A , de cor azul, e B , de cor branca, a metade da ligação mais próxima ao átomo A é desenhada com a cor azul e a outra metade com a cor branca.

Para se fazer isso são desenhadas duas linhas, utilizando-se a mesma função de desenho de linhas citada anteriormente. Uma utilizando-se as posições $(\frac{V_x}{2}, \frac{V_y}{2}, \frac{V_z}{2})$ e $(0, 0, 0)$ e a outra as posições (V_x, V_y, V_z) e $(\frac{V_x}{2}, \frac{V_y}{2}, \frac{V_z}{2})$.

Já nos modelos pau-e-bola e de varetas, as ligações são desenhadas com a função de desenho de cilindros. Diferentemente da função de desenho de linhas, na qual basta informar os pontos de início e fim da linha, a função de desenho de cilindros sempre desenha o cilindro com início na coordenada $z = 0$ e fim na coordenada $z = c$, onde c é o comprimento do cilindro. Deste modo, para desenhar um cilindro que ligue dois átomos em quaisquer posições do espaço tridimensional é necessário recorrer a cálculos matemáticos e transformações como rotação e translação (veja a figura 6.14). Além disso, os cilindros devem ser desenhados de modo similar ao modelo de linhas, ou seja, cada metade com a cor do átomo mais próximo.

Deve-se, primeiramente, então, encontrar uma rotação que leve o vetor \vec{u} , que representa a direção padrão que o cilindro é desenhado a coincidir com o vetor \vec{v} da ligação. Para se utilizar o método de rotação da biblioteca *OpenGL* é necessário informar o ângulo e o vetor da rotação.

De acordo com a posição padrão que o cilindro é desenhado, é claro que:

$$\vec{u} = (0, 0, 1) \tag{6.42}$$

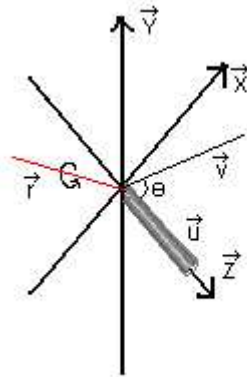


Figura 6.14: O método de desenho da biblioteca *GLU* sempre desenha um cilindro a partir da origem no sentido positivo do eixo *Z*. Deste modo, para que um cilindro represente uma ligação, deve ser aplicar transformações geométricas que o levem à posição correta.

O ângulo da rotação pode ser encontrado através produto escalar entre o vetor da ligação normalizado, que será chamado (\vec{n}) e o vetor da direção do cilindro (\vec{u}) (lembrando que, para normalizar o vetor \vec{v} , basta dividir cada componente pela norma do vetor). Tal produto escalar pode ser calculado assim:

$$\vec{u} \cdot \vec{n} = |\vec{u}| \cdot |\vec{n}| \cdot \cos(\theta) \quad (6.43)$$

$$0 \cdot n_x + 0 \cdot n_y + 1 \cdot n_z = 1 \cdot |\vec{n}| \cdot \cos(\theta) \quad (6.44)$$

$$\cos(\theta) = \frac{n_z}{|\vec{n}|} \quad (6.45)$$

$$\theta = \arccos\left(\frac{B_z - A_z}{|\vec{n}|}\right) \quad (6.46)$$

Depois de encontrado o ângulo, falta agora encontrar o vetor de rotação, que será chamado \vec{r} . Tal vetor pode ser encontrado através o produto vetorial entre os vetores \vec{n} e \vec{u} . Assim:

$$\vec{r}' = (u_y \cdot n_z - u_z \cdot n_y, u_x \cdot n_z - u_z \cdot n_x, u_x \cdot n_y - u_y \cdot n_x) \quad (6.47)$$

Portanto, o ângulo θ e vetor \vec{r}' são passados ao método de rotação. Mas é necessário desenhar cada metade da ligação na cor do átomo mais próximo. No caso, como o átomo B está na origem do sistema de coordenadas, para desenhar a metade da ligação mais próxima a ele basta utilizar a função de desenho de cilindros com tamanho igual a metade do tamanho da ligação, ou seja, metade da norma de \vec{r}' , e com a cor do átomo B . Para a outra metade da ligação deve-se, ainda, fazer uma translação para o ponto da metade da ligação. Ou seja, deve-se executar tal transformação com fator de translação igual a $(\frac{n_x}{2}, \frac{n_y}{2}, \frac{n_z}{2})$. Pode-se, então, desenhar um cilindro com o mesmo tamanho do anterior e com a cor do átomo A .

Utiliza-se, ainda, no desenho dos cilindros, raios de base e topo iguais à metade do raio de um átomo utilizado no modelo pau-e-bola.

6.5 Implementação das Transformações de Visualização

O aplicativo desenvolvido permite que o usuário rotacione, arraste, aproxime ou afaste uma molécula. As seções a seguir mostram como estas funcionalidades foram implementadas.

6.5.1 Rotacionar uma Molécula

O *wxMol* permite ao usuário rotacionar uma molécula através do clicar e arrastar do *mouse*. Se este movimento é feito na vertical, a molécula é rotacionada em relação ao eixo X , se o movimento é na horizontal a molécula é rotacionada em relação ao eixo Y .

De acordo com [Foley (1990)], ao rotacionar um ponto P , θ° em relação ao eixo X , obtém-se um ponto P' dado por:

$$P' = (P_x, P_y \cos(\theta) - P_z \text{sen}(\theta), P_y \text{sen}(\theta) + P_z \cos(\theta)) \quad (6.48)$$

Se o mesmo ponto P fosse rotacionado θ° em relação ao eixo Y , seria obtido um ponto P' dado por:

$$P' = (P_x \cos(\theta) + P_z \sin(\theta), P_y, -P_x \sin(\theta) + P_z \cos(\theta)) \quad (6.49)$$

Para rotacionar uma molécula deve-se primeiro, então, decidir se a rotação será em relação ao eixo X ou ao eixo Y , uma vez que o usuário pode fazer movimentos com o mouse em qualquer direção. Para isso, sendo (Mi_x, Mi_y) a posição que usuário clicou inicialmente e (Mf_x, Mf_y) a posição para o qual o mouse foi arrastado, a rotação deverá ser em relação a X se $|Mf_y - Mi_y| > |Mf_x - Mi_x|$, e em relação ao eixo Y , em caso contrário.

É necessário, agora, descobrir o ângulo de rotação. Padronizou-se que um clicar e arrastar do mouse de um lado a outro da janela do programa rotacionaria a molécula em 360° . Com isso, para encontrar o ângulo de rotação basta fazer uma simples regra de três. Para uma rotação em relação ao eixo X tal ângulo será dado por:

$$\frac{360}{\theta} = \frac{\text{altura da janela}}{Mf_y - Mi_y} \Rightarrow \theta = \frac{360(Mf_y - Mi_y)}{\text{altura da janela}} \quad (6.50)$$

Já para uma rotação em relação ao eixo Y o ângulo pode ser dado por:

$$\frac{360}{\theta} = \frac{\text{largura da janela}}{Mf_x - Mi_x} \Rightarrow \theta = \frac{360(Mf_x - Mi_x)}{\text{largura da janela}} \quad (6.51)$$

Depois de encontrados o eixo e o ângulo de rotação, cada átomo tem sua posição alterada pela rotação correspondente. Com isso, o usuário do *wxMol* pode visualizar uma molécula em qualquer ângulo desejado.

6.5.2 Arrastar uma Molécula

Assim como para a rotação, o aplicativo permite ao usuário arrastar uma molécula através do clicar e arrastar do mouse, ou seja, uma molécula pode ser transladada interativamente.

Segundo [Foley (1990)], a translação de um ponto P por um fator de translação (T_x, T_y, T_z) resultaria em um ponto P' dado por:

$$P' = (P_x + T_x, P_y + T_y, P_z + T_z) \quad (6.52)$$

Deste modo, para arrastar uma molécula basta encontrar o fator de translação que resulte em tal arraste. Para encontrá-lo defini-se, primeiramente, $(M i_x, M i_y)$ como sendo a posição da janela na qual o usuário clicou inicialmente e $(M f_x, M f_y)$ a posição para a qual o *mouse* foi arrastado.

No sistema de coordenadas da janela, o fator de translação seria, então, $(M f_x - M i_x, M f_y - M i_y)$, mas a translação deve ser feita no sistema de coordenadas tridimensional da molécula. Para tanto, basta transformar o fator atual através da conversão de distâncias entre os dois sistemas de coordenadas, apresentada na seção 6.2.5.

Encontradas tais distâncias e considerando o fator de translação da coordenada z igual a 0, basta, então, transladar as posições de todos os átomos com tal fator. São estes os cálculos utilizados para que uma molécula possa ser arrastada no programa.

6.5.3 Aproximar e Afastar uma Molécula

O *wxMol* permite, também, que o usuário aproxime ou afaste uma molécula, funcionalidade muito utilizada em programas de computador, comumente conhecida como *zoom*.

Para causar a sensação de que a molécula foi aproximada ou afastada, utiliza-se um fator chamado fator de zoom. Tal fator é incrementado em uma determinada quantidade toda vez que o usuário quer aproximar uma molécula e é diminuído quando se quer afastá-la.

O fator de zoom é, então, utilizado ao desenhar os átomos e ligações. Antes de desenhar um átomo seu raio e suas coordenadas são multiplicados pelo fator de zoom, da mesma maneira, antes de se desenhar uma ligação, as posições dos átomos que a constituem e o raio do cilindro (quando necessário) são multiplicados pelo mesmo fator.

Com isso, toda a molécula fica proporcionalmente maior ou menor causando a sensação de que a mesma foi aproximada ou afastada, respectivamente.

6.6 Seleção de Átomos e Ligações

Uma das funcionalidades do programa implementado é a possibilidade de selecionar um átomo ou uma ligação através do uso do *mouse*. Permitindo todas as facilidades já descritas anteriormente, como a remoção de uma ligação ou átomo ou ainda o arraste de um átomo isoladamente.

6.6.1 Seleção de um Átomo

Primeiro será tratada a seleção de um átomo. Neste caso, considere (M_x, M_y) como sendo a posição da janela onde o usuário clicou com o *mouse*, suponha também um raio r , dado pelo raio padrão de desenho de um átomo transformado para o sistema de coordenadas da janela. Esta transformação é feita utilizando-se a transformação de distâncias entre sistemas de coordenadas apresentada na seção 6.2.5.

Para descobrir se existe algum átomo na posição clicada pelo usuário basta, então, verificar se existe algum átomo na molécula cuja distância entre a sua posição projetada no sistema de janelas e o ponto (M_x, M_y) seja menor ou igual a r .

Se algum átomo atender a esta condição, uma esfera translúcida com raio um pouco maior que o dele e centro igual ao do átomo é desenhada. Ou seja, a esfera translúcida envolve o átomo selecionado para que o usuário visualize qual átomo está selecionado. A cor e o grau de transparência de tal esfera translúcida podem ser ajustadas no aplicativo.

6.6.2 Seleção de uma Ligação

Quando o usuário quer selecionar uma ligação, uma margem de erro deve ser considerada. Pois, se o usuário tivesse de clicar exatamente em cima da linha que representa a ligação para que a mesma fosse selecionada, a seleção de ligações se tornaria difícil.

Deste modo, considere (M_x, M_y) como sendo a posição clicada pelo usuário e (A_x, A_y) e (B_x, B_y) como sendo a projeção no sistema de coordenadas da janela das posições dos átomos que formam a ligação. Considere ainda e como a margem de erro citada. Define-se, então, d_{MA} como sendo a distância entre a posição clicada e o átomo A . Esta distância é dada por:

$$d_{MA} = \sqrt{(M_x - A_x)^2 + (M_y - A_y)^2} \quad (6.53)$$

Define-se, também, d_{MB} como sendo a distância entre a posição clicada e o átomo B e d_{AB} como a distância entre os átomos A e B . Os valores de tais distâncias podem ser encontradas da mesma maneira feita para d_{MA} . Logo, a ligação entre os átomos A e B será considerada selecionada se:

$$d_{MA} + d_{MB} < d_{AB} + e \quad (6.54)$$

Assim, quando o usuário clica com o *mouse* em algum ponto da janela na tentativa de selecionar uma ligação, todas as ligações são testadas. Se alguma satisfizer a condição acima, ela é desenhada com uma cor diferente das demais (verde no padrão), indicando que foi selecionada.

6.7 O Aplicativo desenvolvido

A figura 6.15 mostra o aplicativo desenvolvido sendo executado no sistema operacional Linux, distribuição Conectiva, utilizando o ambiente gráfico KDE. Além disso, todas as figuras de moléculas tridimensionais apresentadas neste trabalho foram retiradas do próprio *wxMol*.

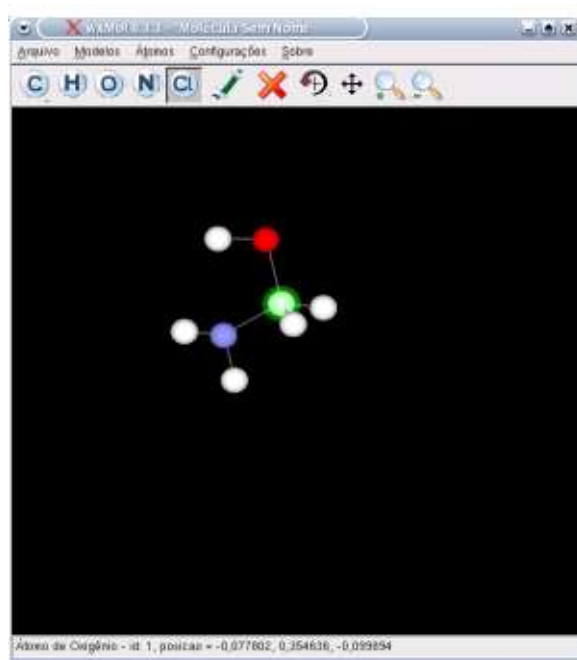


Figura 6.15: O *wxMol* sendo executado no sistema Conectiva-Linux e ambiente KDE

Capítulo 7

Considerações Finais

As ferramentas computacionais de simulação tem se tornado cada vez mais importante em todas as atividades de ensino, e em química não tem sido diferente. Cada vez mais, a informática tem auxiliado os estudiosos da área em atividades tanto de ensino quanto de pesquisa. Com isso, a construção de novas ferramentas computacionais, especialmente na área de modelagem molecular, torna-se cada vez mais necessária.

Analisando este quadro e tendo em vista que o aplicativo desenvolvido pode ser livremente utilizado e adaptado por alunos, professores e quaisquer outros interessados, os autores deste projeto, esperam ter contribuído para a melhoria da qualidade de ensino da área de química. E apresentam o *wxMol* como ferramenta útil no auxílio ao processo ensino-aprendizagem.

7.1 Propostas para Trabalhos Futuros

O *wxMol* ainda não é um programa completo, por isso propõe-se para trabalhos futuros a implementação das seguintes funcionalidades:

- Tornar o programa compatível com outros formatos de representação de moléculas em arquivo. Isto possibilitaria aos usuários do aplicativo utilizarem centenas de arquivos moléculas disponíveis (como os arquivos PDB), sem a necessidade de desenhá-las.
- Correção das imperfeições do algoritmo de correção da geometria molecular, como apresentado na seção 6.3.3.

- Aumento da quantidade de tipos de átomos suportados.
- Implementação de algoritmos para a visualização das propriedades das moléculas.

Além destas funcionalidades, muitas outras podem ser implementadas para tornar o aplicativo uma ferramenta de modelagem molecular cada vez mais útil.

Espera-se, enfim, que o presente projeto possa vir a contribuir com o processo ensino-aprendizagem dos alunos da área de química, em especial, àqueles do Departamento de Química, da Universidade Federal de Lavras.

Capítulo 8

Equipe

A equipe que trabalhou neste projeto foi composta pelos seguintes membros:

- **Prof. MSc. Bruno de Oliveira Schneider, DCC-UFLA, orientador**
Bacharel em Ciência da Computação pela Universidade Federal de Uberlândia - 1990-1995. Mestrado em Ciência da Computação, GRV - Universidade Federal de São Carlos - 1996-1998. Área de Concentração: Realidade Virtual.
- **Prof. DSc. Mauro dos Santos de Carvalho, DQI-UFLA, co-orientador**
Graduado em Química com Atribuições Tecnológicas, UFRJ, Rio de Janeiro/RJ, 1982. Mestrado em Química Orgânica, UFRJ, Rio de Janeiro/RJ, 1992. Doutorado em Físico-Química, UFRJ, Rio de Janeiro/RJ, 2000.
- **Júlio César Alves**
Aluno do 8º Período do curso de Bacharelado em Ciência da Computação da Universidade Federal de Lavras (UFLA).

Referências Bibliográficas

- [Barbosa (1998)] BARBOSA, Luiz Cláudio de Almeida. *Química Orgânica: uma introdução para as ciências agrárias e biológicas*. Viçosa: UFV - 1998.
- [Boyd (2001)] BOYD, Donald B. *Introduction and foreword to the Special Issue commemorating the 25th anniversary of molecular connectivity as a structure description system*. Journal of Molecular Graphics and Modeling 20 (2001) 1 - 3.
- [Brow (1996)] BROWN, Willian B. & FOOTE, Christopher S. *Organic Chemistry*. Ed. Saunders College Publishing, 2nd edition - 1996
- [Cenapad (2003)] CENAPAD, *Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho para Minas Gerais e o Centro-Oeste*. Disponível em <http://www.cenapad.ufmg.br/ModelagemMolecular/node1.html>. Visitado em junho de 2003.
- [Cross (2003)] CROSS, Graeme. *Computational Chemistry teaching modules*. Disponível em www.chem.swin.edu.au/modules/mod2/intro.html. Visitado em junho de 2003
- [Dic. Universal (2003)] *Dicionário Universal da Língua Portuguesa*. Texto Editora, 2003.

- [Eichler & Del Pino (2000)] EICHLER, Marcelo & DEL PINO, José Cláudio *Computadores em Educação Química: Estrutura Atômica e Tabela Periódica*. QUÍMICA NOVA, 23(6) (2000).
- [Foley (1990)] FOLEY, James D. et al. *Computer Graphics: Principles and Practice*. Ed. Addison-Wesley Publishing Company, 2nd edition in C - 1990.
- [Freire (2002)] FREIRE, Joseane Alves. *Desenvolvimento de um editor/visualizador 3D de moléculas*. Dissertação de Final de Curso, Departamento de Ciência da Computação, Universidade Federal de Lavras. 2002
- [Freitas (1998)] FREITAS, L. C. G. *Prêmio Nobel de Química 1998*. Química Nova na Escola, 1998.
- [Frenkel & Smit (2001)] FRENKEL, Daan & SMIT, Berend. *Understanding Molecular Simulation*. Ed Academic Press, 2nd edition - 2001.
- [GNU (2003)] Free Software Foundation. *GNU's Not Unix! the GNU project and the Free Software Foundation (FSF)*. Disponível em <http://www.gnu.org>. Visitado em junho de 2003.
- [Neider & Davis (1997)] NEIDER, Jackie & DAVIS, Tom. *OpenGL Programming Guide*. Ed. Addison-Wesley Publishing Company, 2nd edition - 1997
- [SantAnna (2002)] SANTANNA, Carlos Maurício R. *Glossário de Termos Usados no Planejamento de Fármacos (Recomendações da IUPAC 1997)*. Química Nova, Vol. 25, No. 3, 505-512, 2002.
- [Santos (2001)] SANTOS, Hélio F. *Introdução à estrutura da matéria*. Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola, 2001.

- [Smith (1998)] SMITH, Lorna. *Molecular Science Modelling*, Edinburgh Parallel Computing Centre, The University of Edinburgh.
- [Tostes (1998)] TOSTES, José Glauco. *Estrutura Molecular: O Conceito Fundamental da Química*. Química Nova na Escola, nº 07, Maio de 1998.