

Desenvolvimento de um Caderno de Laboratório Eletrônico para Químicos Orgânicos utilizando a linguagem JAVA.

Leonardo da F. Bispo¹ (IC), Felipe J. Castro¹ (IC), Aura Conci¹ (PQ), Marcelle de L. Ferreira² (PG), Marcus V. N. de Souza² (PQ)*

1- Instituto de Computação – UFF. Rua Passos da Pátria, 156 – São Domingos, Niterói - RJ

2- Instituto de Tecnologia em Fármacos (Far- Manguinhos) - FIOCRUZ. Rua Sizenando Nabuco, 100 - Manguinhos, Rio de Janeiro – RJ

*e-mail: marcos_souza@far.fiocruz.br

Palavras Chave: caderno de laboratório, informática, JAVA

Introdução

O caderno de laboratório é parte vital de qualquer projeto de pesquisa, pois este constitui a principal fonte de informação sobre os experimentos realizados em um laboratório. Normalmente, no meio acadêmico, não existe uma padronização de como os dados experimentais devem ser organizados e armazenados, prevalecendo as sugestões e o bom senso, o que muitas vezes gera dificuldades para reunir, racionalizar e publicar os tais dados. Para tentar solucionar estes problemas, a informática surge como uma ferramenta importante, pois através dela pode-se criar um caderno de laboratório eletrônico, que possui uma série de vantagens em relação ao caderno tradicional, como por exemplo: padronização total das informações necessárias para reproduzir um experimento, facilidade na busca e acesso a dados experimentais; facilidade de compartilhar informações com colaboradores e colegas de grupo; facilidade de armazenar informações e gerar cópias de segurança, diminuindo o extravio de dados; arquivamento em massa dos dados, facilitando sua organização, dentre outros ^{1,2}. Neste contexto, o objetivo deste trabalho é o desenvolvimento de um caderno de laboratório eletrônico para químicos orgânicos utilizando a linguagem JAVA com *Servlets*, *HTML*, Banco de Dados *Access* e *JSP*. O intuito deste projeto é fazer com que este software auxilie na documentação e arquivamento de experimentos realizados na rotina de qualquer laboratório de química orgânica, seja ele de ensino ou pesquisa. Além disso, o programa será gratuito e desenvolvido em código aberto (*open-source*), visando sua melhoria e adaptação conforme as necessidades dos usuários.

Resultados e Discussão

Inicialmente, realizou-se uma obtenção e análise dos requisitos junto aos químicos e seus procedimentos para criação e prototipagem do software desejado. A partir de então, estabeleceu-se as partes básicas do caderno eletrônico:

- 1- Cabeçalho, contendo os seguintes campos: data, identificação do experimento (código), processo desenvolvido e objetivo.

- 2- Reações químicas e cálculos estequiométricos: são realizados por meio de fórmulas pré-definidas.
- 3- Referências bibliográficas
- 4- Procedimento Experimental: podem ser especificados temperaturas e horários reacionais, bem como deve conter a descrição completa do experimento (equipamentos utilizados, condições reacionais, isolamento do produto desejado, purificação de reagentes, solventes e produtos)
- 5- Cromatografia em Camada Fina (CCF): dispositivo que permite desenhar uma placa de CCF, com quantos spots forem necessários, diferentes formas e colorações. Existem ainda campos para descrição da placa, sistema de eluição e reveladores utilizados.
- 6- Resultados e Conclusões: anotações a respeito do sucesso do experimento e um campo contendo o rendimento do processo.
- 7- Análise de amostras: nesta parte é possível ter o controle da data de envio e recebimento de amostras para as mais diversas análises (EM, RMN, IV, UV, testes biológicos).
- 8- Documentos anexos: os dados espectroscópicos são arquivados em formato de imagem, conforme são editados.

Posteriormente, fez-se necessário a criação de uma interface gráfica intuitiva, na qual podem ser discriminadas a criação, a busca, a edição e deleção dos experimentos realizados. Mediante tais ações, foram adotadas a inserção, edição e visualização das partes citadas acima através de módulos, que foram dispostos em um *menu* e exibidos em janelas independentes. Quando necessária a visualização total do experimento para impressão ou exportação, gera-se um relatório no formato tradicional, seguindo um padrão conciso e único.

Conclusões

O software proposto encontra-se em fase final de preparação e testes, apresentando promissoras perspectivas.

¹ Landells, J., Palmer H. *Chemistry in New Zealand*, 2005, 13.

² Editorial. *Nature*, 2007, 447 (7140),1.