Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

CHEMICAL VIEWER: FERRAMENTA COMPUTACIONAL DE VISUALIZAÇÃO DE RESULTADOS DE CÁLCULOS TEÓRICOS.

Celso Theodoro Júnior (IC)[1], Douglas Cânfora (IC)[1], Francisnei Helder A. Ferrari (IC)[1], Rodrigo de Andrade (IC)[1], Johnny Cardoso Marques (PQ)[2] e Hueder Paulo M. de Oliveira (PQ)[3]*

[1]Faculdade Anhanguera de Taubaté - Taubaté, SP - Brasil
[2]Facultade de Tecnologia – FATEC - Rod. Presidente Dutra Km 138, São José dos Campos, SP - Brasil.
[3]Universidade Camilo Castelo Branco / Rod. Presidente Dutra Km 138, São José dos Campos, SP - Brasil.
e-mail: huederpaulo@yahoo.com.br

Palavras Chave: *Chemical Viewer, Gaussian®, visualização*

Introdução

Ferramentas computacionais para realizar a modelagem química são indispensáveis. A possibilidade de gerar modelos capazes de predizer energia, estruturas moleculares, frequências de vibração e propriedades de moléculas tornou estas ferramentas populares entre pesquisadores e demais profissionais das áreas de Química e Física. No entanto, após a realização de um experimento computacional utilizando uma ferramenta, vários resultados são gerados, onde nem todos são importantes, encadeando um trabalho adicional para o profissional químico, que precisa analisar cuidadosamente cada resultado gerado. Este trabalho tem como objetivo desenvolver o protótipo de uma ferramenta para analisar os resultados gerados pela ferramenta Gaussian®, exibindo somente os dados que realmente interessam ao profissional[1,2].

Resultados e Discussão

Para desenvolver a ferramenta Chemical Viewer, foi necessário seguir alguns passos que são cruciais para desenvolver um sistema, primeiramente foi levantado os requisitos, junto com o usuário, após saber a necessidade, foi feita uma modelagem de dados, para uma melhor compreensão dos desenvolvedores, e por ultimo foi implementada a ferramenta na linguagem de programação Java. A figura 1 mostra um arquivo de saída (output) do programa Gaussian aberto usando o aplicativo. Nota-se que a tarefa solicitada foi executada e, que o mesmo convergiu.

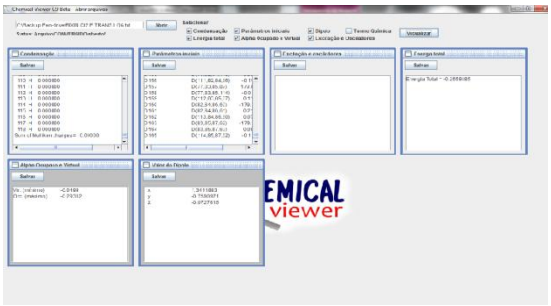

Figura 1 - Janela com exibição do resultado de um arquivo convergido.

Na hipótese de ser solicitada uma tarefa e a mesma não foi executada de modo satisfatório, o aplicativo faz a leitura do arquivo de saída e mostraria as seguintes janelas (figura 2).

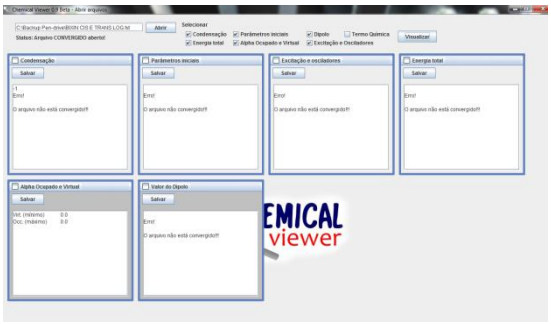

Figura 2- Janela com exibição de erro, pois o arquivo não é convergido.

Futuramente, será adicionada ao Chemical Viewer uma função capaz de criar um gráfico de estatísticas com os resultados da tabela de oscilação e excitação dos componentes. Esses resultados encontram-se no arquivo de energia. Este gráfico de estatísticas será útil para os profissionais, onde facilitará a comparação entre os elementos.

Outra melhoria a ser feita nessa ferramenta, será a implementar de uma função capaz de efetuar busca dos dados de novo arquivo para análise termodinâmica. A estrutura do arquivo com informações do termodinâmico é parecida com os arquivos de energia e de convergência molecular, mas os resultados são diferentes são necessários e importantes para os profissionais e estudantes na área de química.

Conclusões

Conclui-se que Chemical Viewer está atingindo os objetivos do trabalho e dos usuários. O protótipo facilita a utilização dos resultados químicos computacionais proporcionando agilidade no tratamento das informações e maior velocidade para as pesquisas.

Agradecimentos

Fapesp, CNPq.

[1] Deitel, Harvey m.; Deitel, paul j. Java: Como Programar. 6ª ed. São Paulo: Prentice-Hall. 2005. 1152p.
[2] Booch, Grady; RumBaugh, james; Jacobson, Ivar. UML: Guia do Usuário. 2ªed. São Paulo : Editora Campus .2005. 474p..