IMPLEMENTAÇÃO DE UMA INTERFACE DE APOIO PARA USO DE PACOTES DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

Isabelly dos Santos Pacheco UEPG, Alexandre Camilo Junior, e-mail: acamilo@uepg.br

Universidade Estadual de Ponta Grossa/Departamento de Física.

Química; Físico-química.

Palavras-Chave: *Química Computacional, Estruturas Moleculares, MOPAC, ORCA, Modelagem Molecular.*

Resumo

Neste projeto, foi desenvolvido um *software* de apoio a pacotes existentes, usados em cálculos de Química Computacional, para uso em dois Sistemas Operacionais, prioritariamente Linux e Windows. Os pacotes alvo são MOPAC e ORCA, capazes de simular vasta gama de propriedades eletrônicas de estruturas moleculares.

Introdução

A modelagem molecular é uma ferramenta computacional que acelera a pesquisa científica ao permitir o estudo teórico de propriedades moleculares. Os cálculos são feitos com softwares que podem ser comerciais, com interfaces amigáveis, ou gratuitos e poderosos, como o MOPAC (STEWART, 2016) e o ORCA (NEESE, 2022). O problema é que essas alternativas gratuitas geralmente não possuem interfaces intuitivas, exigindo maior conhecimento técnico. Este projeto visa resolver essa questão, desenvolvendo um software auxiliar para uso dos manuais do MOPAC e do ORCA, com interfaces amigáveis.

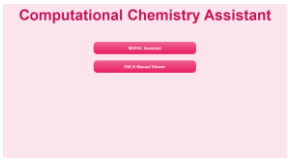
Materiais e Métodos

O desenvolvimento do *software* foi realizado em um notebook Acer Nitro 5, equipado com processador Intel Core i7 e placa de vídeo NVIDIA GeForce GTX. A linguagem de programação escolhida foi Python, devido à sua versatilidade e ampla disponibilidade de bibliotecas especializadas, como Tkinter e PyQt para interfaces gráficas. O método consistiu em desenvolver aplicações em Python com interface gráfica (usando Tkinter ou PyQt). A interface permite ao usuário por exemplo, pesquisar *keywords* ou métodos enquanto a lógica interna usa funções em Python e busca essas informações em uma estrutura de dados em arquivo .json e exibe os resultados diretamente na tela.

Resultados e Discussão

A Figura 1 ilustra as funcionalidades do *software* "*Computational Chemistry Assistant*".

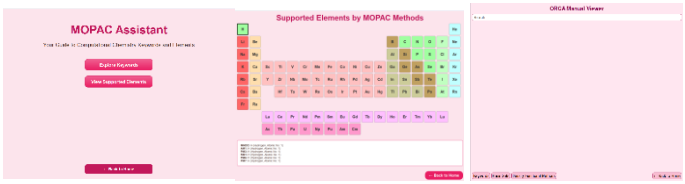
Figura 1. Exemplo da interface inicial do *Computational Chemistry Assistant.*



A Figura 1 representa a interface inicial do *software* contendo dois botões.

A Figura 2 apresenta a interface inicial do "*MOPAC Assistant*", que atua como um guia interativo para explorar as palavras-chave e os elementos químicos, a segunda é a tabela periódica, uma das funcionalidades da interface.

Figura 2. Interface inicial do MOPAC *Assistant* e *ORCA Manual Viewer*.



A terceira imagem da Figura 2, "ORCA *Manual Viewer*", oferece uma forma simplificada de consultar, com uma barra de pesquisa e acesso rápido a seções importantes como "*Keywords*", "*Basis Sets*" e "*Density Functional Methods*".

Conclusão

Este projeto desenvolveu o *software* "*Computational Chemistry Assistant",* ferramenta que cumpre o objetivo de simplificar o uso de pacotes complexos, tornando a Química Computacional mais rápida e acessível.

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador Alexandre Camilo Junior pela confiança e parceria, agradeço a Universidade Estadual de Ponta Grossa, o departamento de física e ao PIBIC, pela bolsa e pelo ambiente de pesquisa fornecidos.

STEWART, J. J. P. MOPAC2016 MANUAL. **Colorado Springs: Stewart Computational Chemistry, 2016.** Disponível em: http://openmopac.net/manual/. Acesso em: 11 mar. 2025.

NEESE, F. THE ORCA PROGRAM SYSTEN, VERSION 5.0 – **Manual. Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, 2022.** Disponível em: https://orcaforum.kofo.mpg.de/. Acesso em: 11 mar. 2025.