

Observou-se que, no decorrer da lixiviação, em soluções de ácido sulfúrico com concentração de 300 g/L, há formação de um precipitado de sulfato de samário que recobre a superfície da amostra residual, inibindo a reação de lixiviação.

A próxima etapa será a recuperação de samário e cobalto, utilizando-se o método de extração por solventes ou de precipitação seletiva com hidróxido de amônio para a formação de sais duplos e posterior conversão em um produto de valor comercial (2,7).

BIBLIOGRAFIA

1. HEDRICK, J.B., TEMPLETON, D.A. Rare-Earth Minerals and Metals, *Minerals Yearbook*, Bureau of Mines, p. 1-11, 1988.
2. LYMAN, J.W., PALMER, G.R. Recycling of Neodymium Iron Boron Magnet Scrap, *Bureau of Mines*, p. 1-28, 1993.
3. ORMEROD, J. The Physical Metallurgy and Processing of Sintered Rare Earth Permanent Magnets, *Journal of Less-Common Metals*, v. 111, p. 49-69, 1985.
4. CHANDRASEKARAN, V. et al. R&D Activities on High Energy Samarium-Cobalt Permanent Magnets at Defence Metallurgical Research Laboratory (DMRL), *Materials Science Forum*, v. 30, p. 187-202, 1988.
5. BOLGER, R. Rare Earth Markets - Magnets remain Attractive, *Industrial Minerals*, p. 27-43, oct. 1995.
6. Permanent Magnet Market Analysis, *RIC News*, v. 30, n. 2, p. 4, jun. 1995.
7. NIINAE, M. et al. Hydrometallurgical Treatment of Rare Earth Magnet Scrap, *Proceedings of the XIX IMPC*, p. 227-231, 1995.

PAINEL 21

Software de Construção e Visualização de Moléculas em Microcomputadores

Luiz Carlos Inácio

Bolsista de Inic. Científica, Informática, UFRJ

Peter Rudolf Seidl

Orientador, Químico Industrial, Ph.D.

1. INTRODUÇÃO

A modelagem molecular é uma área da química que procura visualizar as estruturas de determinadas espécies, analisando a posição no espaço dos átomos que as compõe, podendo com isso compreender e prever certas propriedades físicas e químicas dessas moléculas.

Para isso, se torna imprescindível a utilização de computadores, principalmente estações de trabalho de alta performance capazes de computar imensas massas de dados. Contudo, são poucos os que têm acesso a esse tipo de equipamento devido ao seu alto custo. Por esse motivo, foi desenvolvido o *software* MOLBOX, que permite a construção e visualização de estruturas moleculares em microcomputadores utilizando-se o conhecido ambiente *Windows*.

2. OBJETIVO

O presente trabalho tem como objetivo apresentar as funcionalidades e características incorporadas ao *software* MOLBOX durante o ano de 1995, principalmente o suporte a

edição de moléculas que torna o *software* uma ferramenta bem mais poderosa. atualmente o MOLBOX encontra-se na versão 2.0.

3. METODOLOGIA

O MOLBOX 2.0 foi desenvolvido em linguagem C++ (1), usando a *ObjectWindows* (2) e a abordagem de orientação a objetos (3), uma tendência dos *softwares* mais recentes. A ferramenta utilizada foi o compilador Borland C++ 4.5.

Dentre as características e funcionalidades incorporadas a essa nova versão estão:

- a) melhor estruturação do programa e interface gráfica mais amigável;
- b) suporte completo para edição de moléculas e novos recursos de visualização;
- c) impressão de moléculas,
- d) sistema de ajuda.

A melhor estruturação do programa melhora a compreensão de seus algoritmos e torna a inclusão de novas funcionalidades mais fácil e rápida. Esse é um fator muito importante tendo em vista que diversos usuários pedem a inclusão de novas funções.

A facilidade de uso é um fator muito importante nos *softwares* atuais, principalmente devido à popularização do padrão *Windows*. Sua importância está no fato de que não importa quão boa seja uma ferramenta se o usuário que precisa usá-la não sabe como. No MOLBOX, isso foi conseguido com a utilização de uma interface gráfica padrão *Windows*.

A versão 2.0 incorpora suporte completo para edição de moléculas. Tal fato significa que o usuário possui diversas

funções que permitem a construção de estruturas. Essas funções incluem inserção, alteração e *deleting* de átomos, inserção, alteração e *deleting* de ligações.

Deve-se observar que a molécula gerada pelo MOLBOX não corresponde a sua estrutura exata, ou seja, as coordenadas atribuídas aos átomos não corresponde à encontrada na natureza. Para se determinar a forma exata de uma molécula é necessário que essa seja processada por um *software* de cálculo de estrutura como o CERIOUS (4) da *Molecular Simulations*.

A edição realizada pelo MOLBOX tem como objetivo principal a confecção de um esboço da estrutura molecular, para posteriormente ser utilizado no cálculo da estrutura. No procedimento de determinação da posição dos átomos é feito um mapeamento entre as coordenadas de tela e as coordenadas cartesianas da molécula. Para isso, são utilizadas as equações abaixo:

$$\text{CoordX} = (\text{Pos.X} - \text{CentroX}) * \text{Escala}$$

$$\text{CoordY} = (\text{Pos.Y} - \text{CentroY}) * \text{Escala}$$

$$\text{CoordZ} = 0.0$$

onde:

Pos.X = Coordenada X de tela do átomo;

Pos.Y = Coordenada Y de tela do átomo;

CentroX = Coordenada X do centro da tela;

CentroY = Coordenada Y do centro da tela;

Escala = Fator de escala;

CoordX = Coordenada cartesiana X do átomo;

CoordY = Coordenada cartesiana Y do átomo;

CoordZ = Coordenada cartesiana Z do átomo.

Além dos recursos de visualização já existentes como diversos estilos de desenho (*Ball, Stick, Ball-stick*) e rotação, foram acrescentadas funções de *zoom* e translação, afim de permitir uma melhor visualização de estruturas complexas.

Também foram incorporados ao *software* recursos de impressão, tornando-se desnecessária a utilização de outros programas para a impressão das moléculas geradas pelos usuários.

Um sistema de ajuda padrão *Windows* também foi desenvolvido, permitindo ao usuário o esclarecimento de dúvidas sobre a utilização do MOLBOX de maneira mais rápida.

4. COMENTÁRIOS GERAIS

A incorporação desses novos recursos aliados aos já existentes tornou o MOLBOX um *software* completo para edição e visualização de estruturas moleculares. No entanto, cada vez mais funcionalidades estão sendo propostas para tornar o programa ainda melhor, tornando o MOLBOX útil em outras áreas além da modelagem molecular, por exemplo, na área educacional.

Ao longo deste ano, algumas das prováveis melhorias ao MOLBOX incluem:

- a) edição mais sofisticada de moléculas, permitindo que o usuário possa incluir compostos ao invés de apenas átomos;
- b) integração entre o MOLBOX e o *software* de cálculo de estruturas da estação de trabalho, tornando o *software* capaz de minimizar estruturas por meio de comunicação via rede;

c) adição de novos estilos de desenho, como o estilo cilindro.

O MOLBOX deve tornar-se também um agente de integração com outros trabalhos realizados pelo Grupo de Modelagem Molecular, principalmente com o Banco de Estruturas, permitindo que a partir desse o usuário possa visualizar a distribuição espacial de uma molécula.

BIBLIOGRAFIA

1. BORLAND C++ 4.5 Language Reference.
2. BORLAND C++ 4.5 ObjectWindows 2.5.
3. COAD, P. and YOURDON, E. Análise Baseada em Objetos.
4. MOLECULAR SIMULATIONS, INC, User Manual CERIOUS Version 3.2 (1994).