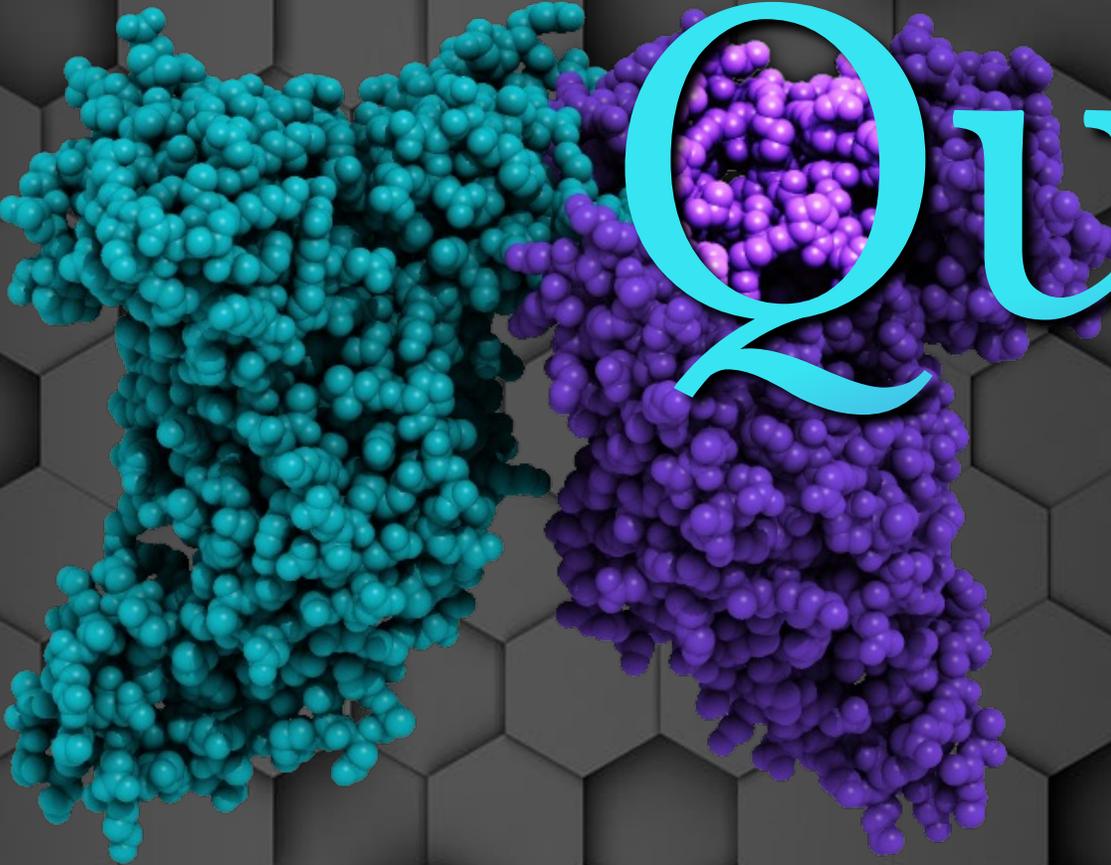


QouteMol

Conhecendo um programa gratuito de
ilustrações digitais de biomoléculas

Renato Massaharu Hassunuma
Aguinaldo Robinson de Souza



QuiteMol

Conhecendo um programa gratuito de
ilustrações digitais de biomoléculas

Renato Massaharu Hassunuma

Professor Titular do Curso de Biomedicina
Universidade Paulista – UNIP
Câmpus Bauru

Aguinaldo Robinson de Souza

Professor Adjunto do Departamento de Química
Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” – UNESP,
Câmpus Bauru

1ª Edição / 2024
Bauru, SP

© Renato Massaharu Hassunuma.

Conselho Editorial

PROF. DR. MAURICIO IKEDA YOGUIM

Professor Bolsista do Departamento de Química da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” – UNESP, Faculdade de Ciências – Câmpus Bauru

PROF. DR. VALDECIR FARIAS XIMENES

Professor Associado do Departamento de Química da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” – UNESP, Faculdade de Ciências – Câmpus Bauru

Capa e Design

PROF. DR. RENATO MASSAHARU HASSUNUMA

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
(BENITEZ Catalogação Ass. Editorial, MS, Brasil)

H284q Hassunuma, Renato Massaharu
1.ed. QuteMol: guia rápido de ilustrações digitais de biomoléculas [livro eletrônico] / Renato Massaharu Hassunuma, Aguinaldo Robinson de Souza. – 1. ed. – Bauru, SP : Canal 6, 2024.
PDF

ISBN 978-85-7917-653-1
DOI 10.52050/9788579176531

1. Bioquímica. 2. Bioinformática. 3. Imagem molecular. 4. Proteínas.
I. Hassunuma, Renato Massaharu. II. Souza, Aguinaldo Robinson de. III.
Título.

04-2024/229

CDD 572

Índice para catálogo sistemático:
1. Bioquímica 572

Bibliotecária : Aline Grazielle Benitez CRB-1/3129

Agradecimentos

Agradecemos o **Prof. Dr. Mauricio Ikeda Yoguim** e o **Prof. Dr. Valdecir Farias Ximenes**, membros do Conselho Editorial deste livro, pelas suas valiosas contribuições.

*Prof. Dr. Renato Massaharu Hassunuma e
Prof. Dr. Aginaldo Robinson de Souza*



Apresentação

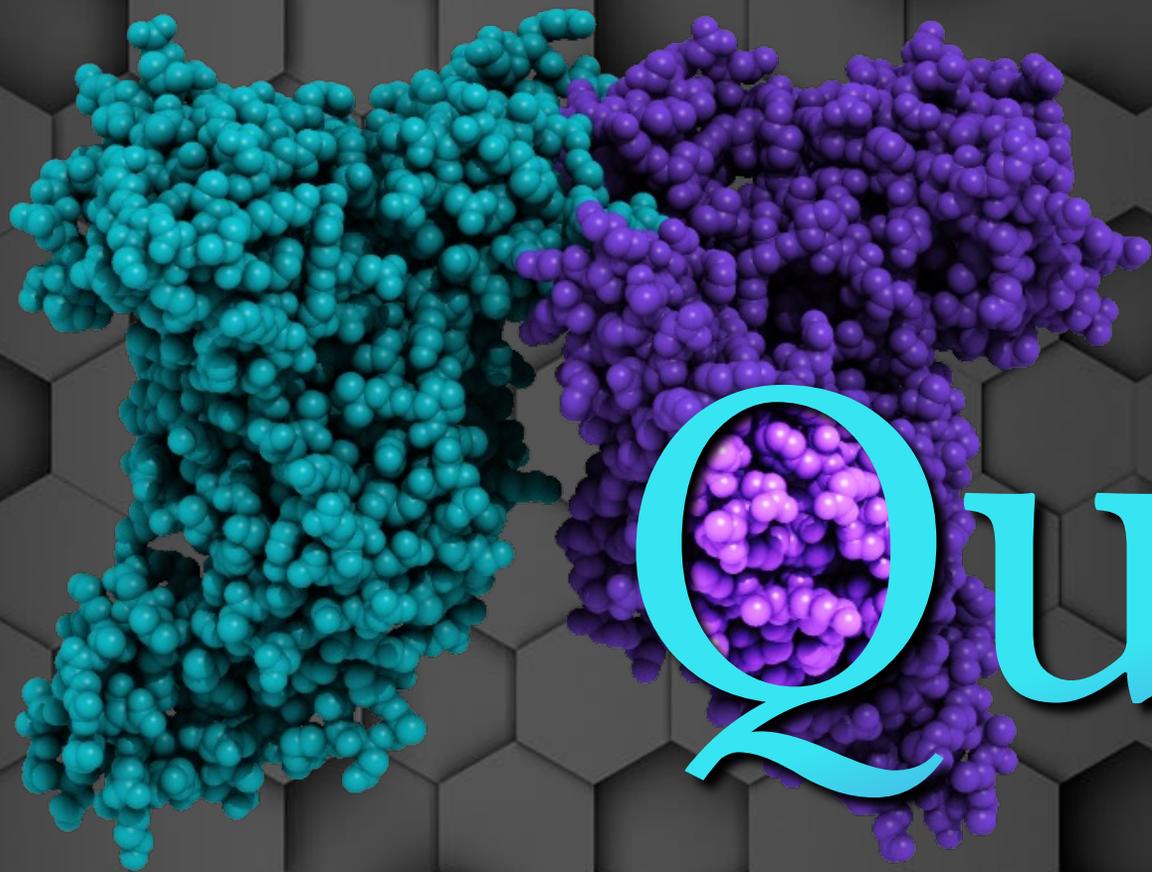
Esta obra foi desenvolvida a partir de esforços conjuntos do **Prof. Dr. Renato Massaharu Hassunuma**, professor titular do Curso de Biomedicina da Universidade Paulista – UNIP, Câmpus Bauru e do **Prof. Sênior Aguinaldo Robinson de Souza**, professor titular da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” – UNESP, Câmpus Bauru.



Sumário

1. Introdução	09
2. Painel de controle	10
3. Menu de informações (<i>Info</i>)	11
4. Menu de predefinições (<i>Presets</i>)	12
4.1. Realístico 1 (<i>Realistic 1</i>)	13
4.2. Realístico 1 (<i>Realistic 1</i>)	14
4.3. Apenas luz direta (<i>Direct light only</i>)	15
4.4. Ilustrativo 1 (<i>Illustrative 1</i>)	16
4.5. Ilustrativo 2 (<i>Illustrative 2</i>)	17
4.6. Molécula do mês (<i>Molecule of the month</i>)	18
4.7. Misturado 1 (<i>Mixed 1</i>)	19
4.8. Misturado 2 (<i>Mixed 2</i>)	20
4.9. Misturado 3 (<i>Mixed 3</i>)	21
4.10. Frio brilhante (<i>Cool (bright)</i>)	22
4.11. Frio escuro (<i>Cool (dark)</i>)	23
4.12. Bordas frias (<i>Cool borders</i>)	24
4.13. Simulação de microscopia eletrônica de varredura (<i>Simulate S.E.M.</i>)	25
4.14. Simulação de microscopia eletrônica de varredura (2) (<i>Simulate S.E.M. (2)</i>)	26
4.15. Percepção de forma (<i>Shape perception</i>)	27
5. Menu de geometria (<i>Geometry</i>)	28
5.1. Representação em espaço preenchido (<i>Space-fill</i>)	29

5.2. Representação em varetas (<i>Licorice</i>)	30
5.3. Representação em bolas e varetas (<i>Balls'n'Sticks</i>)	31
5.4. Representação de heteroátomos (<i>'HET' atoms</i>)	33
5.5. Cor do material (<i>Material color</i>)	34
6. Menu Customizar (<i>Customize</i>)	37
7. Comando Salvar um instantâneo (<i>Save a snapshot</i>)	39
7.1. PNG (<i>lossless</i>)	40
7.2. JPEG (<i>lossy</i>)	41
7.3. GIF animation	42
7.3.1 Modo de rotação completa (<i>Full rotation mode</i>)	43
7.3.2 Modo de inspeção (<i>Inspection mode</i>)	44
7.3.3 Modo de seis lados (<i>Six-Sides mode</i>)	45
Créditos das figuras	46
Referências.....	48



QuteMol

Conhecendo um programa gratuito de
ilustrações digitais de biomoléculas

1. Introdução

O programa computacional **QuteMol**[®] (Figura 1) é um sistema de visualização molecular que pode ser obtido gratuitamente no *link*: <https://qutemol.sourceforge.net/>. Foi desenvolvido pelos pesquisadores Marco Tarini e Paolo Cignoni do Laboratório de Computação Visual do ISTI - CNR.

Neste programa, biomoléculas como proteínas e ácidos nucleicos podem ser observados utilizando arquivos do tipo PDB (*Protein Data Bank*) em um ambiente de simulação fechado em tempo real, sendo possível a visualização nos modos *Balls and sticks* (Bolas e varetas), *Liquorice* (Varetas) e *Spacefill* (Preenchimento de espaço).

O programa permite captura de imagens de alta resolução nos formatos JPEG e PNG que podem ser utilizados em publicações, bem como a criação de GIFs animados para utilização em páginas da *internet* ou *slides*.

O *software* está disponível para os sistemas operacionais Windows e Mac OS X (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

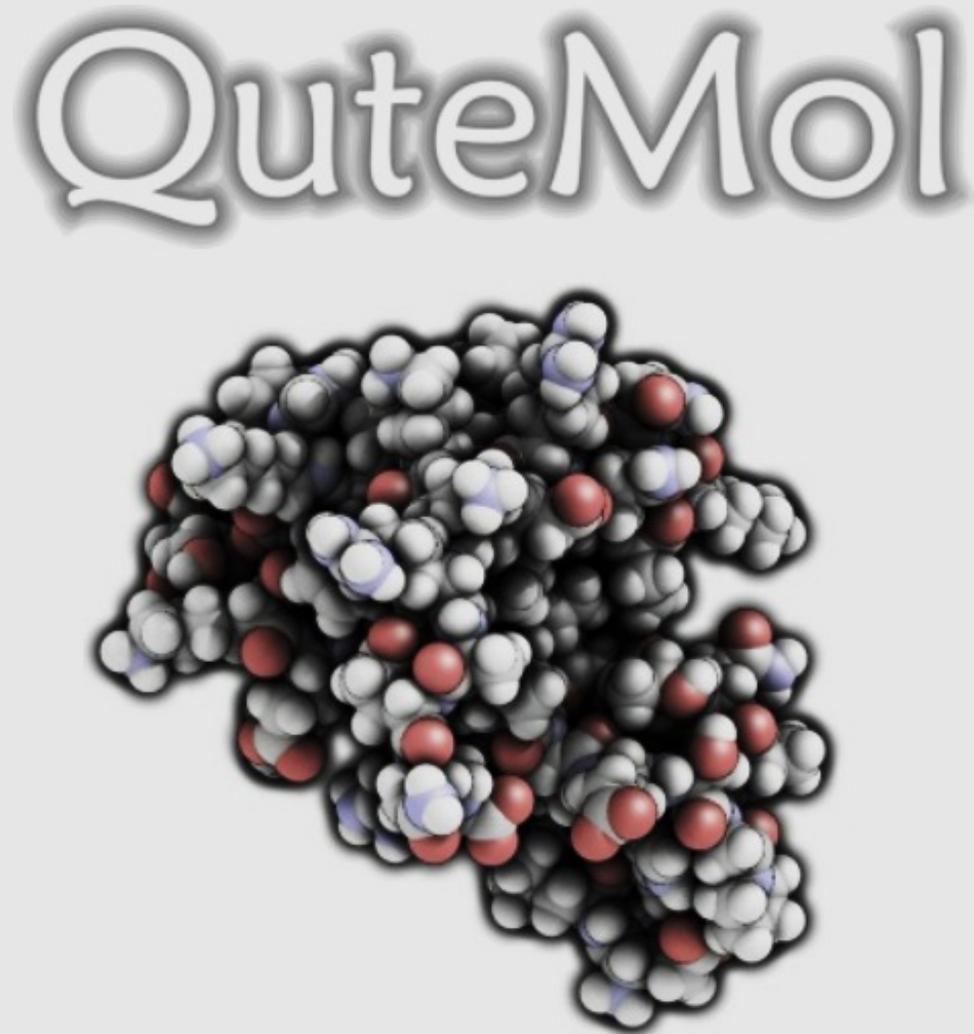


Figura 1 – Logo do QuteMol[®].

2. Painel de controle

Ao abrir o programa QuteMol®, encontramos o painel apresentado na Figura 1, onde estão disponíveis:

- Botão **Abrir arquivo**: que abre a janela **Abrir arquivo (Open File)** no qual o usuário pode escolher o arquivo do tipo PDB (*Protein Data Bank*) a ser aberto (Figura 2a);
- Botão **Salve um instantâneo**: que abre a janela **Salve um instantâneo (Save a snapshot)** no qual o usuário pode escolher salvar a imagem nos formatos PNG (lossless), JPEG (lossy) e GIF animation (Figura 2b);
- Botão **Fechar**: que encerra o programa (Figura 2c);
- Menus **Predefinições (Presets)**, **Geometria (Geometry)**, **Customizar (Customize)** e **Informações (Info)**: que serão apresentados a seguir (Figura 2d) (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

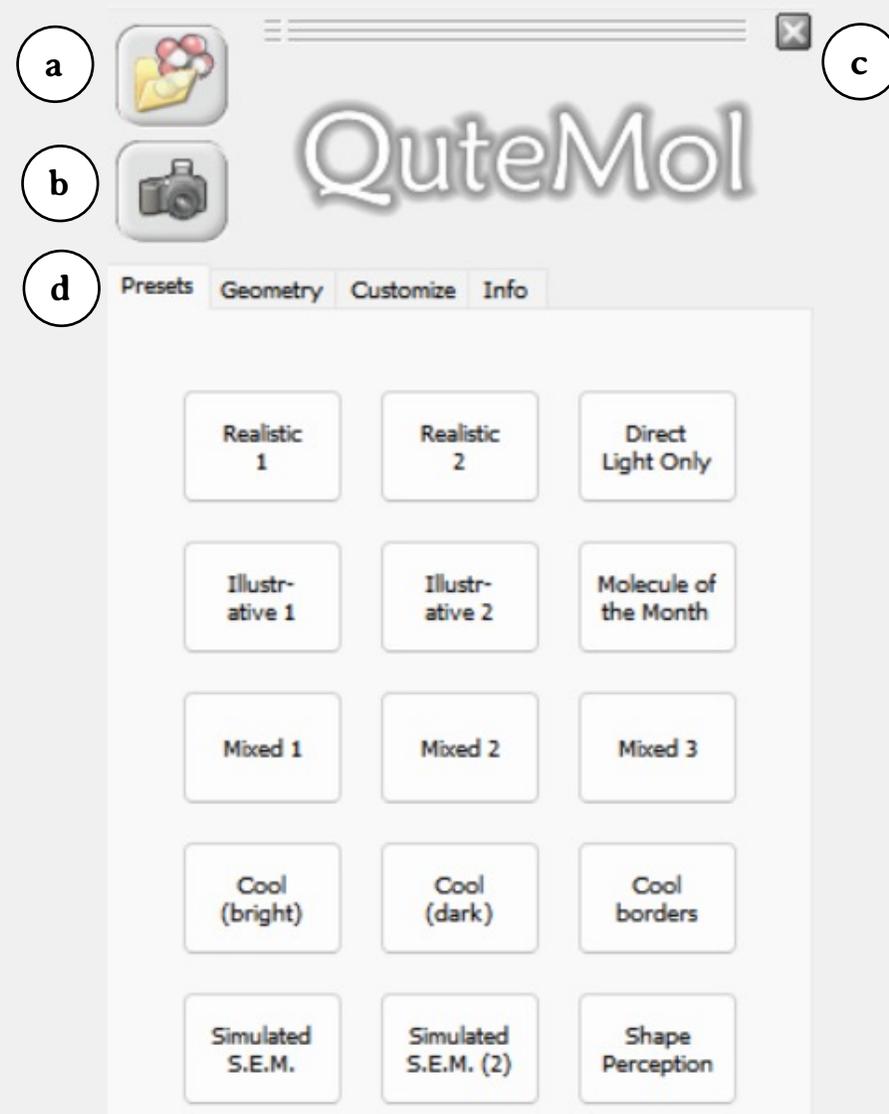


Figura 2 – Painel de controle.

3. Menu de Informações (*Info*)

Este menu apresenta as seguintes informações:

- **Desenvolvedores do QuteMol®:** Marco Tarini e Paolo Cignoni (Figura 3a);
- **Link do site do QuteMol®:** <https://qutemol.sourceforge.net/> (Figura 3b);
- **Instruções de uso (*Instructions*):**
 - **Botão esquerdo do *mouse*:** gira a molécula;
 - **Roda do mouse ou tecla *Shift* + botão esquerdo do *mouse*:** controla o zoom;
 - **Botão central do *mouse* ou tecla *Ctrl* + botão esquerdo do *mouse*:** reposiciona a molécula no espaço de trabalho;
 - **Botão direito do *mouse*:** movimenta a luz (Figura 3c);
- **Locais de desenvolvimento do programa:** Visual Computing Laboratory, Istituto di Scienza e Tecnologie dell'informazione e Consiglio Nazionale delle Ricerche (Figura 3d);
- **Versão e data do programa:** versão 0.4.1 de 05 junho de 2007 (Figura 3e) (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

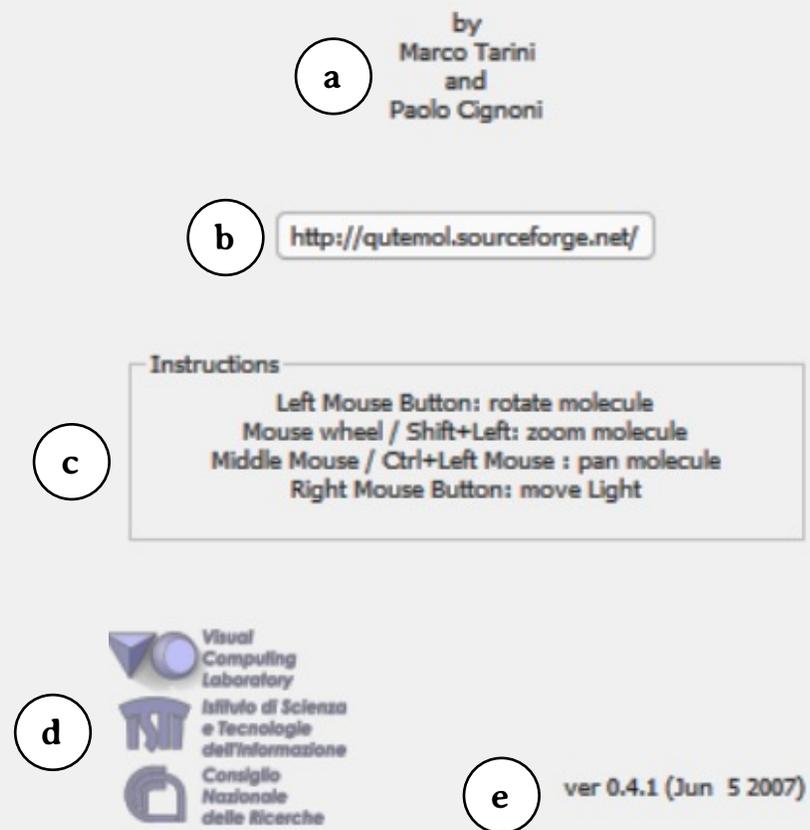


Figura 3 – Comandos estão disponíveis no teclado e *mouse*.

4. Menu de Predefinições (*Presets*)

O primeiro menu do QuteMol® apresenta 15 modos de exibição de moléculas predefinidos:

- Realísticos 1 e 2 (*Realistic 1 e 2*);
- Apenas luz direta (*Direct light only*);
- Ilustrativos 1 e 2 (*Illustrative 1 e 2*);
- Molécula do mês (*Molecule of the month*);
- Misturado 1, 2 e 3 (*Mixed 1, 2 e 3*);
- Frio brilhante, escuro e bordas frias (*Cool (bright), cool (dark) e cool borders*);
- Simulação de microscopia eletrônica de varredura (*Simulate S.E.M.*);
- Simulação de microscopia eletrônica de varredura (2) (*Simulate S.E.M. (2)*);
- Percepção de forma (*Shape perception*) (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

As figuras apresentadas a seguir foram desenvolvidas a partir do arquivo 1AO6.pdb (Sugio, Mochizuki, Noda, Kashima, 2011), que refere-se à estrutura dimérica da albumina sérica humana.



Figura 4 – Menu predefinições (*Presets*).

4.1. Realístico 1 (*Realistic 1*)

Esta predefinição é obtida usando os seguintes parâmetros de customização:

- **Cores base:** saturação média;
- **Ponto de luz:** intensidade menor que a metade, achatamento mínimo, reflexo médio, brilho médio, sombras máximas, segunda luz ausente e simulação de microscopia eletrônica de varredura ausente;
- **Luz ambiente:** intensidade acima da média;
- **Autobalanco:** presente;
- **Fundo:** brilho médio e cor cinza (matiz 160, saturação 0, luminosidade 240, vermelho 255, verde 255 e azul 255);
- **Profundidade:** força mínima;
- **Halos:** tamanho mínimo e força, variação e cor inabilitadas;
- **Bordas:** tamanho mínimo e variação inabilitada (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

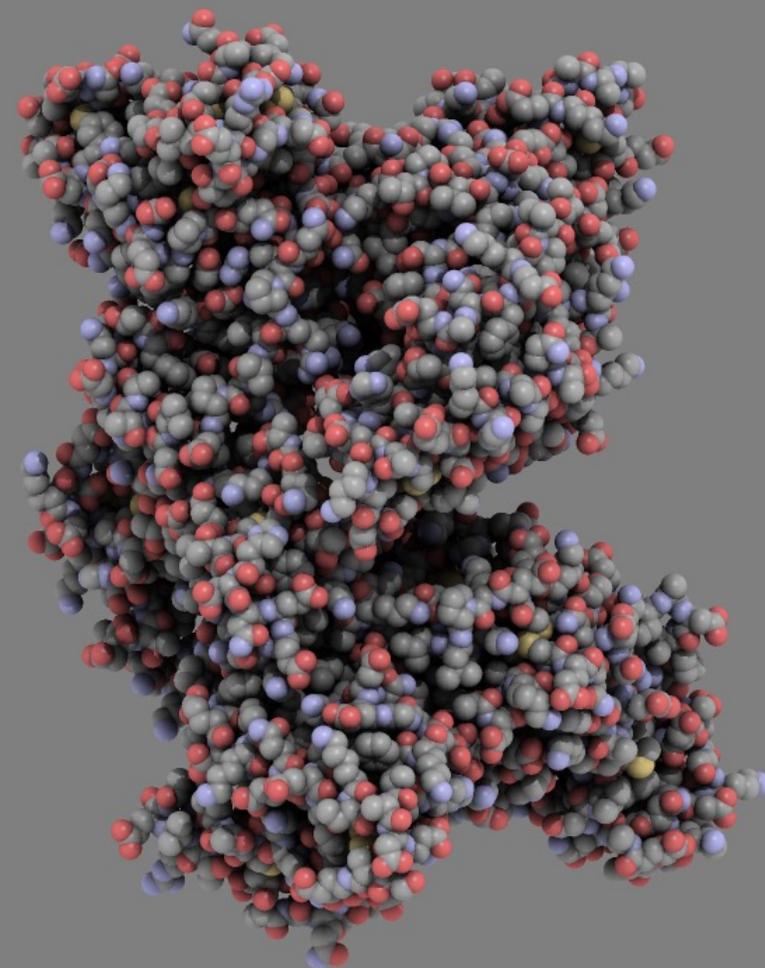


Figura 5 – Realístico 1 (*Realistic 1*).

4.2. Realístico 2 (*Realistic 2*)

Esta predefinição é obtida usando os seguintes parâmetros de customização:

- **Cores base:** saturação pouco abaixo da média;
- **Ponto de luz:** intensidade mínima, achatamento inabilitado, reflexo mínimo, brilho e sombras inabilitados, segunda luz ausente e simulação de microscopia eletrônica de varredura ausente;
- **Luz ambiente:** intensidade máxima;
- **Autobalanco:** presente;
- **Fundo:** brilho pouco abaixo da média e cor cinza escura (matiz 160, saturação 0, luminosidade 240, vermelho 255, verde 255 e azul 255);
- **Profundidade:** força mínima;
- **Halos:** tamanho mínimo, força, variação e cor inabilitadas;
- **Bordas:** tamanho mínimo e variação inabilitada (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

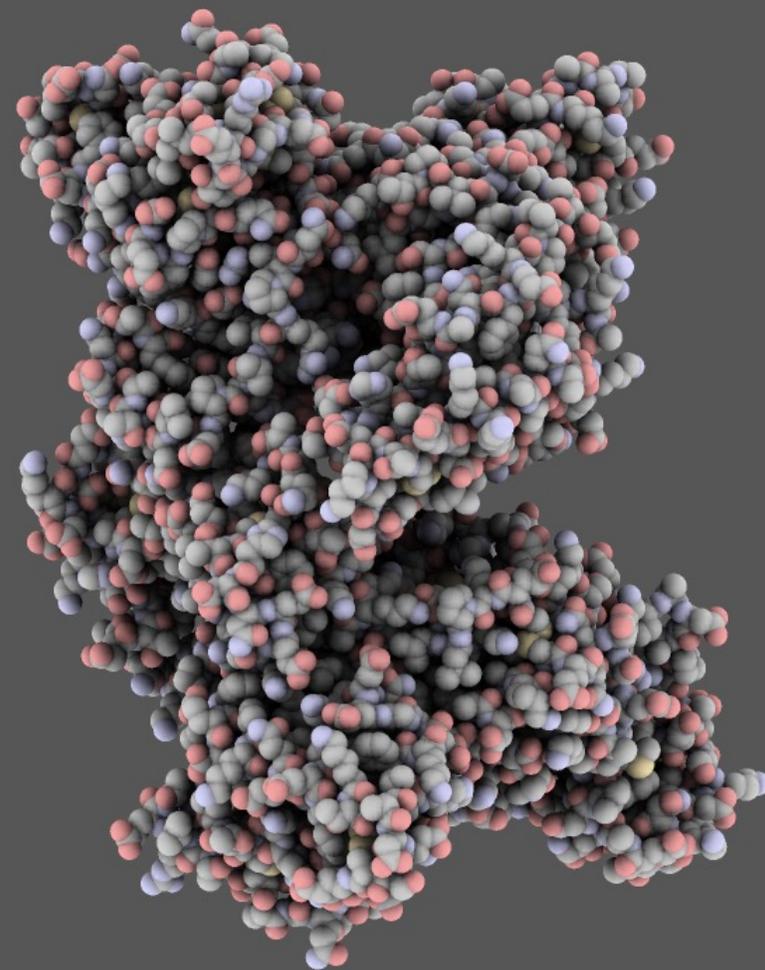


Figura 6 – Realístico 2 (*Realistic 2*).

4.3. Apenas luz direta (*Direct light only*)

Esta é a predefinição padrão utilizada pelo QuteMol® ao se abrir um arquivo PDB. Este efeito é obtido usando os seguintes parâmetros de customização:

- **Cores base:** saturação média;
- **Ponto de luz:** intensidade máxima, achatamento mínimo, reflexo mínimo, brilho inabilitado, sombras mínimas, segunda luz presente e simulação de microscopia eletrônica de varredura ausente;
- **Luz ambiente:** intensidade mínima;
- **Autobalanco:** ausente;
- **Fundo:** brilho médio e cor cinza (matiz 160, saturação 0, luminosidade 240, vermelho 255, verde 255 e azul 255);
- **Profundidade:** força mínima;
- **Halos:** tamanho mínimo, força, variação e cor inabilitadas;
- **Bordas:** tamanho mínimo e variação inabilitada (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

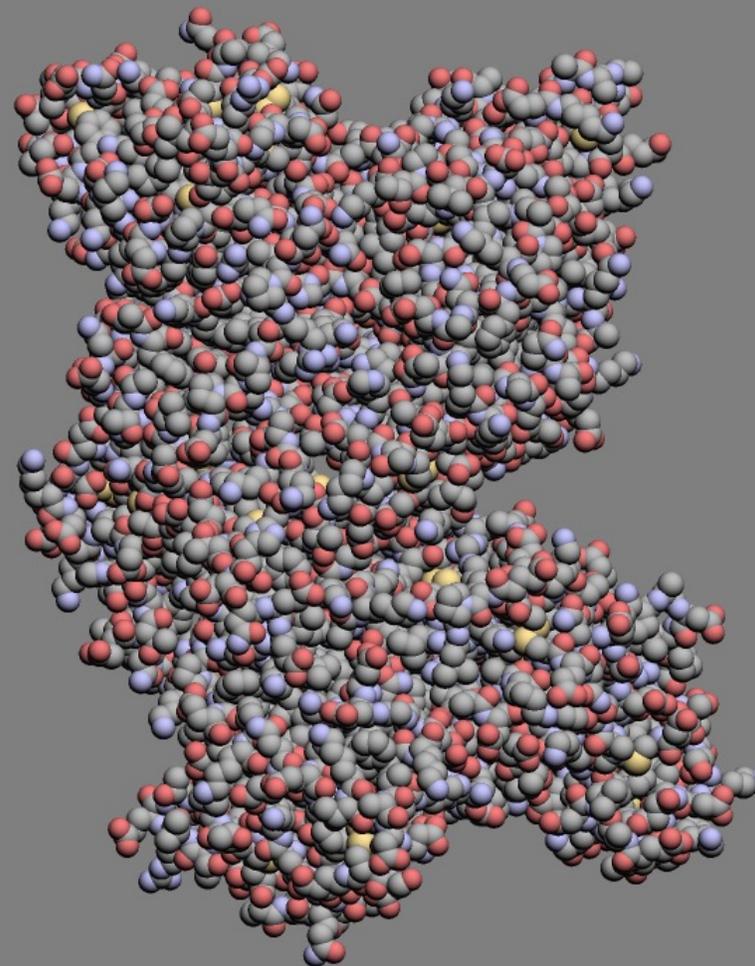


Figura 7 – Apenas luz direta (*Direct light only*).

4.4. Ilustrativo 1 (*Illustrative 1*)

Esta predefinição é obtida usando os seguintes parâmetros de customização:

- **Cores base:** saturação pouco acima da média;
- **Ponto de luz:** intensidade pouco abaixo da média, achatamento máximo, reflexo próximo ao máximo, brilho pouco abaixo da média, sombras mínimas, segunda luz inabilitada, simulação de microscopia eletrônica de varredura ausente;
- **Luz ambiente:** intensidade pouco acima da média;
- **Autobalanco:** presente;
- **Fundo:** brilho máximo e cor branca (matiz 160, saturação 0, luminosidade 240, vermelho 255, verde 255 e azul 255);
- **Profundidade:** força mínima;
- **Halos:** tamanho mínimo, força, variação e cor inabilitadas;
- **Bordas:** tamanho próximo ao máximo e variação pouco abaixo da média (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

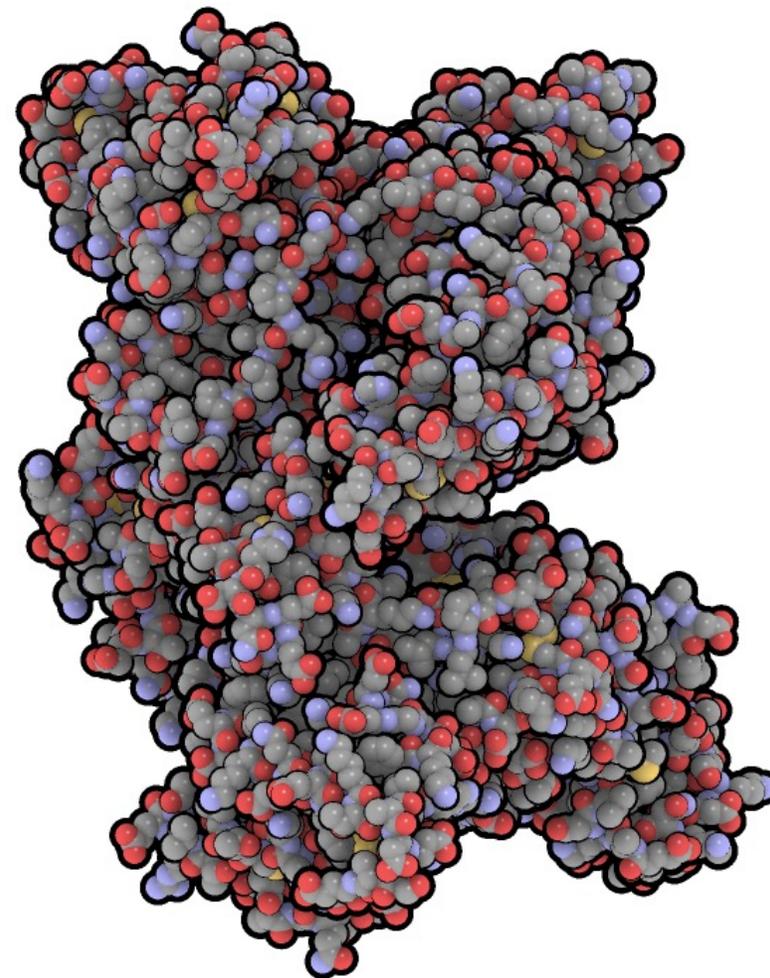


Figura 8 – Ilustrativo 1 (*Illustrative 1*).

4.5. Ilustrativo 2 (*Illustrative 2*)

Esta predefinição é obtida usando os seguintes parâmetros de customização:

- **Cores base:** saturação mínima;
- **Ponto de luz:** intensidade média, achatamento máximo, reflexo mínimo, brilho inabilitado, sombras mínimas, segunda luz inabilitada e simulação de microscopia eletrônica de varredura ausente;
- **Luz ambiente:** intensidade média;
- **Autobalanco:** presente;
- **Fundo:** brilho mínimo e cor preta (matiz 160, saturação 0, luminosidade 240, vermelho 255, verde 255 e azul 255);
- **Profundidade:** força máxima;
- **Halos:** tamanho mínimo, força, variação e cor inabilitadas;
- **Bordas:** tamanho próximo ao máximo e variação pouco abaixo da média (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

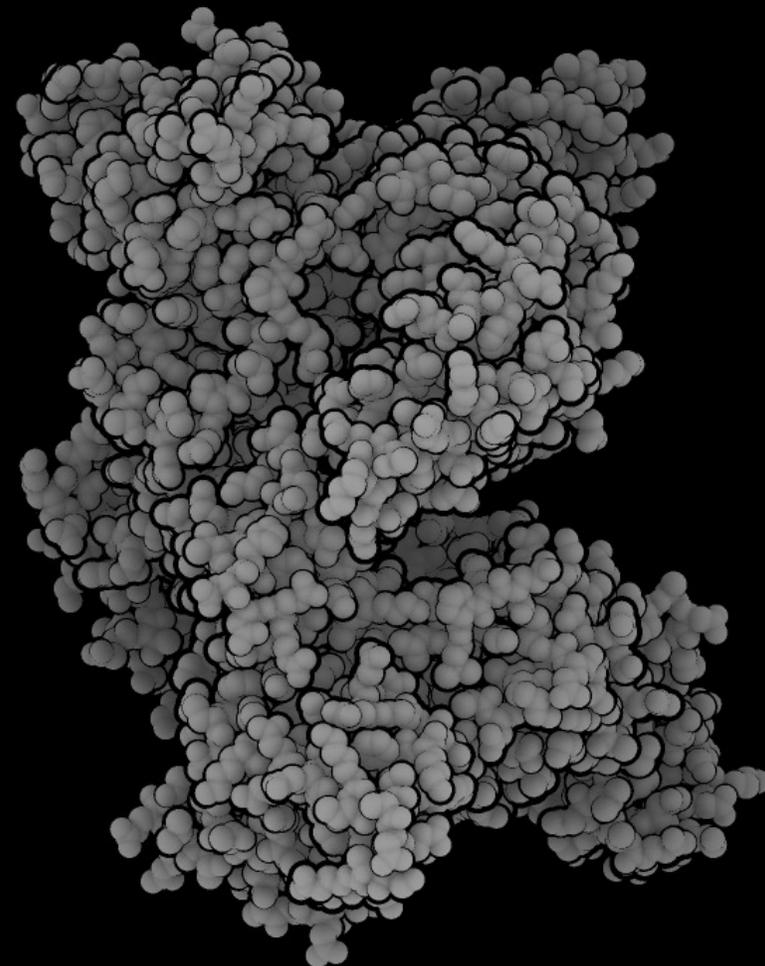


Figura 9 – Ilustrativo 2 (*Illustrative 2*).

4.6. Molécula do mês (*Molecule of the month*)

Esta predefinição recebe esta denominação por remeter às ilustrações apresentadas da página Molécula do mês (*Molecule of the month*), disponível no link: <https://pdb101.rcsb.org/>. É obtida usando os seguintes parâmetros de customização:

- **Cores base:** saturação pouco acima da média;
- **Ponto de luz:** intensidade máxima, achatamento máximo, reflexo mínimo, brilho inabilitado, sombras pouco abaixo da média, segunda luz inabilitada e simulação de microscopia eletrônica de varredura ausente;
- **Luz ambiente:** intensidade mínima;
- **Autobalanco:** presente;
- **Fundo:** brilho máximo e cor branca (matiz 160, saturação 0, luminosidade 240, vermelho 255, verde 255 e azul 255);
- **Profundidade:** força mínima;
- **Halos:** tamanho mínimo, força, variação e cor inabilitadas;
- **Bordas:** tamanho pouco acima da média e variação próxima ao mínimo (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

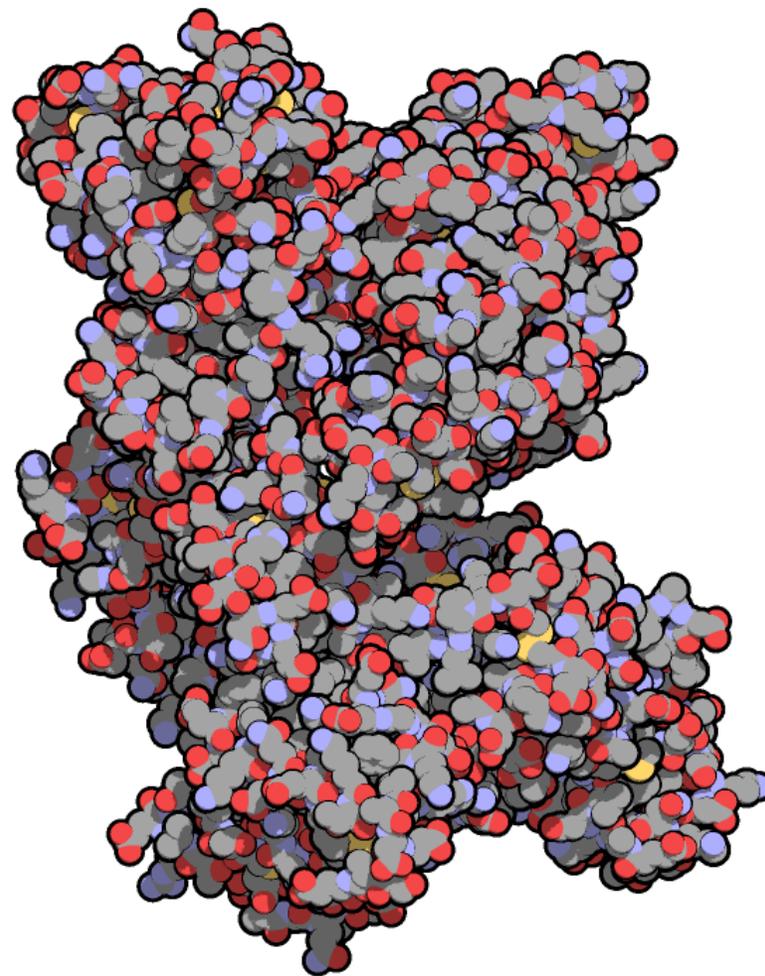


Figura 10 – Molécula do mês (*Molecule of the month*).

4.7. Misturado 1 (*Mixed 1*)

Esta predefinição é obtida usando os seguintes parâmetros de customização:

- **Cores base:** saturação média;
- **Ponto de luz:** intensidade mínima, achatamento inabilitado, reflexo mínimo, brilho, sombras e segunda luz inabilitados e simulação de microscopia eletrônica de varredura ausente;
- **Luz ambiente:** intensidade máxima;
- **Autobalanco:** presente;
- **Fundo:** brilho máximo e cor branca (matiz 160, saturação 0, luminosidade 240, vermelho 255, verde 255 e azul 255);
- **Profundidade:** força mínima;
- **Halos:** tamanho próxima do máximo, força pouco abaixo da média, variação média e cor presente;
- **Bordas:** tamanho mínimo e variação inabilitada (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

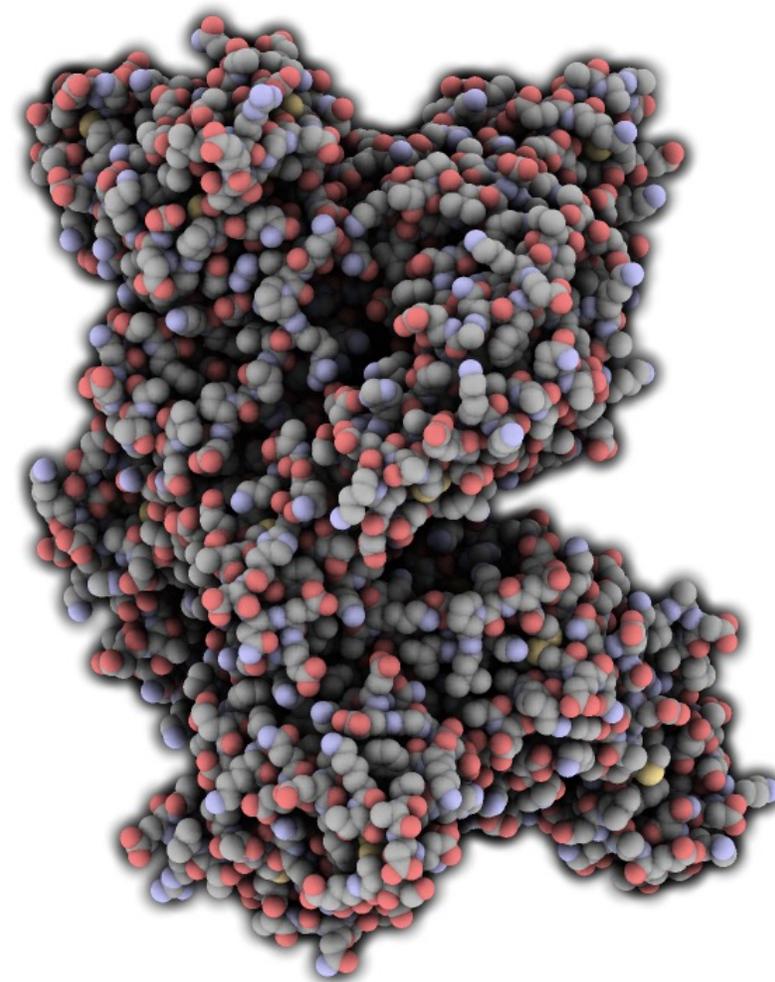


Figura 11 – Misturado 1 (*Mixed 1*).

4.8. Misturado 2 (*Mixed 2*)

Esta predefinição é obtida usando os seguintes parâmetros de customização:

- **Cores base:** saturação pouco acima da média;
- **Ponto de luz:** intensidade próxima à mínima, achatamento mínimo, reflexo próximo do máximo, brilho próximo do máximo, sombras máximas, segunda luz ausente e simulação de microscopia eletrônica de varredura ausente;
- **Luz ambiente:** intensidade próximo da máxima;
- **Autobalanco:** ausente;
- **Fundo:** brilho máximo e cor branca (matiz 160, saturação 0, luminosidade 240, vermelho 255, verde 255 e azul 255);
- **Profundidade:** força mínima;
- **Halos:** tamanho mínimo, força, variação e cor inabilitados;
- **Bordas:** tamanho pouco abaixo do médio e variação pouco abaixo da média (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

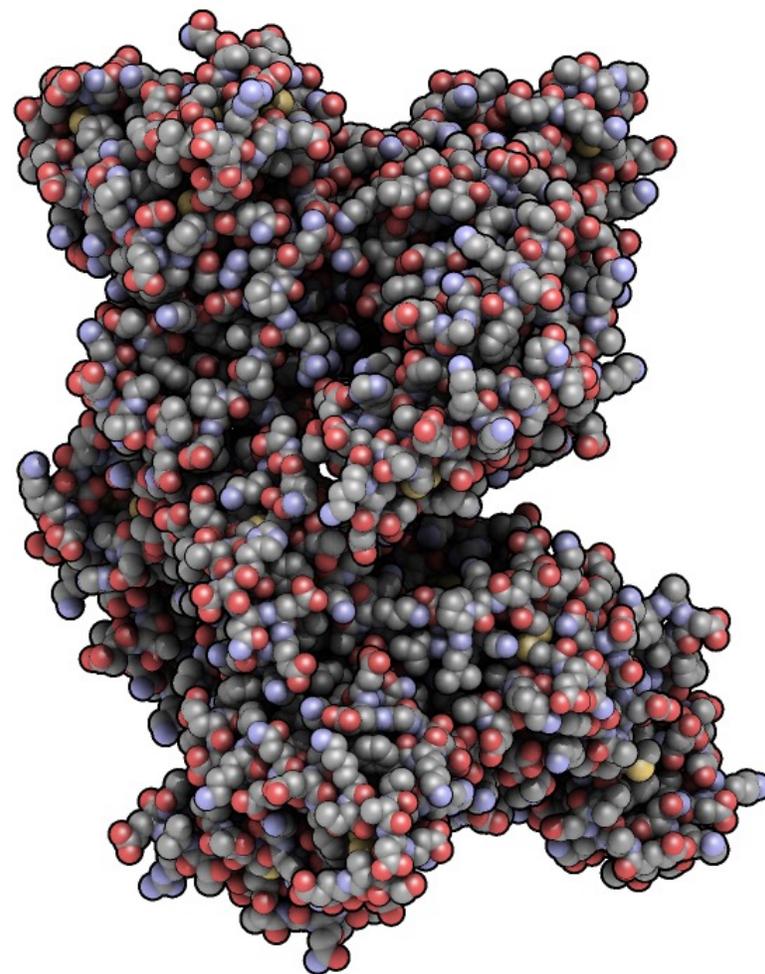


Figura 12 – Misturado 2 (*Mixed 2*).

4.9. Misturado 3 (*Mixed 3*)

Esta predefinição é obtida usando os seguintes parâmetros de customização:

- **Cores base:** saturação máxima;
- **Ponto de luz:** intensidade próxima à mínima, achatamento mínimo, reflexo médio, brilho pouco abaixo do médio, sombras mínimas, segunda luz ausente e simulação de microscopia eletrônica de varredura ausente;
- **Luz ambiente:** intensidade média;
- **Autobalanco:** ausente;
- **Fundo:** brilho mínimo e cor preta (matiz 160, saturação 0, luminosidade 240, vermelho 255, verde 255 e azul 255);
- **Profundidade:** força mínima;
- **Halos:** tamanho próximo do máximo, força pouco abaixo da média, variação pouco abaixo da média e cor presente;
- **Bordas:** tamanho mínimo e variação inabilitada (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

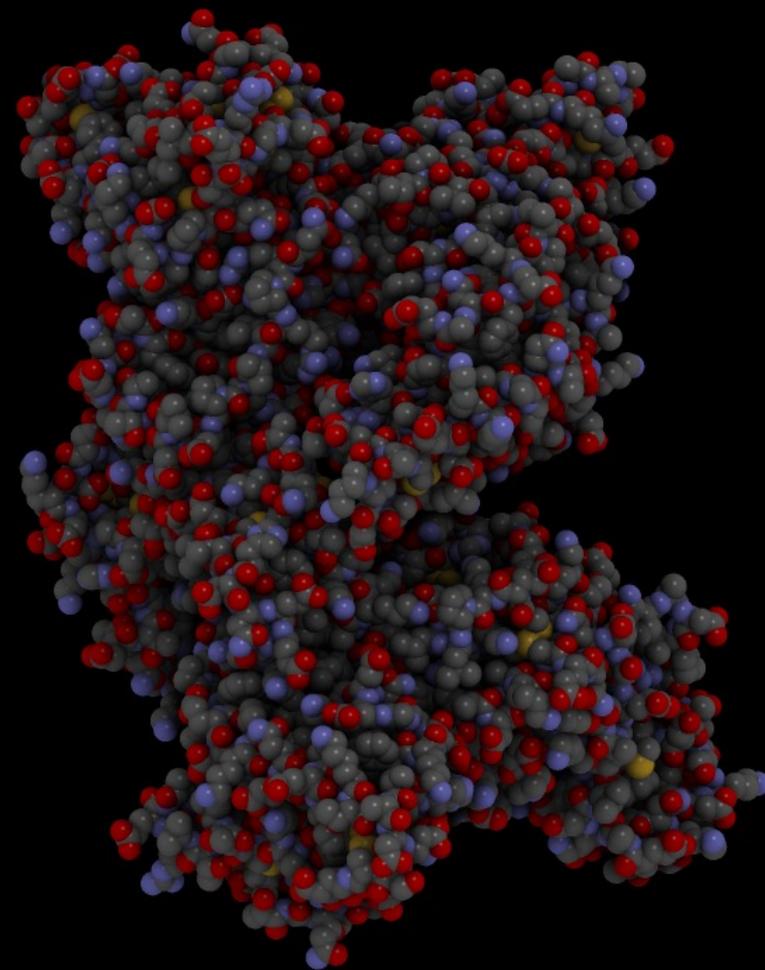


Figura 13 – Misturado 3 (*Mixed 3*).

4.10. Frio brilhante (*Cool (bright)*)

Esta predefinição é obtida usando os seguintes parâmetros de customização:

- **Cores base:** saturação mínima;
- **Ponto de luz:** intensidade máxima, achatamento máximo, reflexo mínimo, brilho inabilitado, sombras mínimas, segunda luz inabilitada e simulação de microscopia eletrônica de varredura ausente;
- **Luz ambiente:** intensidade mínima;
- **Autobalanco:** presente;
- **Fundo:** brilho máximo e cor branca (matiz 160, saturação 0, luminosidade 240, vermelho 255, verde 255 e azul 255);
- **Profundidade:** força mínima;
- **Halos:** tamanho pouco acima do médio, força média, variação média e cor presente;
- **Bordas:** tamanho mínimo e variação inabilitada (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

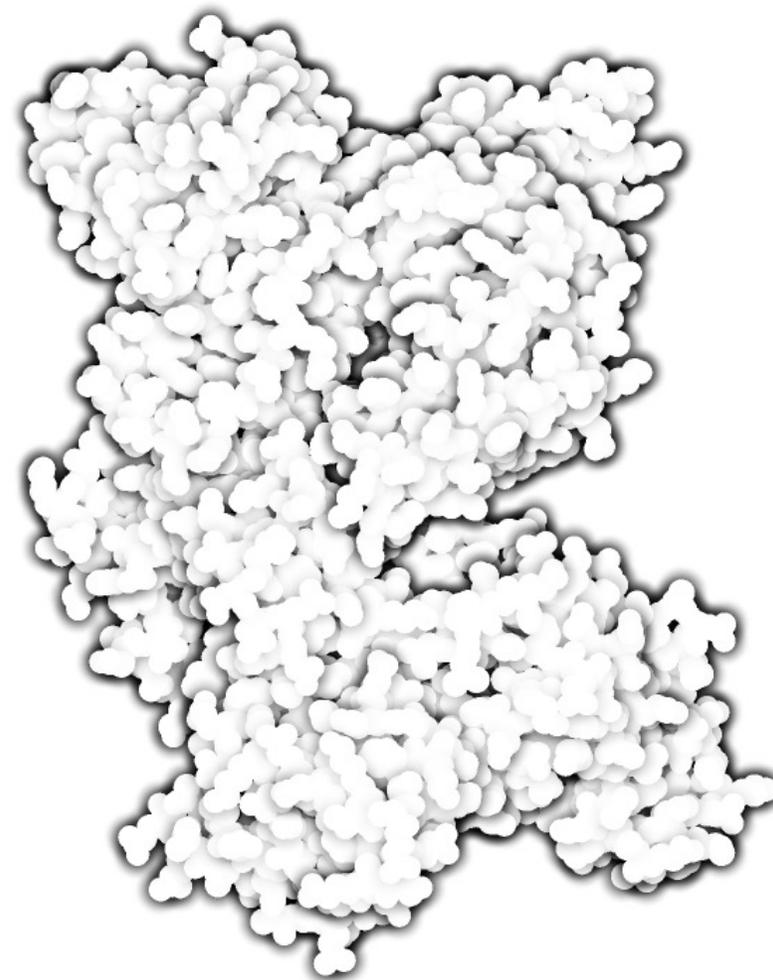


Figura 14 – Frio brilhante (*Cool (bright)*).

4.11. Frio escuro (*Cool (dark)*)

Esta predefinição é obtida usando os seguintes parâmetros de customização:

- **Cores base:** saturação mínima;
- **Ponto de luz:** intensidade mínima, achatamento inabilitado, reflexo médio, brilho pouco abaixo do médio, sombras mínimas, segunda luz inabilitada e simulação de microscopia eletrônica de varredura ausente;
- **Luz ambiente:** intensidade mínima;
- **Autobalanco:** ausente;
- **Fundo:** brilho mínimo e cor preta (matiz 160, saturação 0, luminosidade 240, vermelho 255, verde 255 e azul 255);
- **Profundidade:** força mínima;
- **Halos:** tamanho acima do médio, força média, variação média, cor branca;
- **Bordas:** tamanho mínimo e variação inabilitada (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

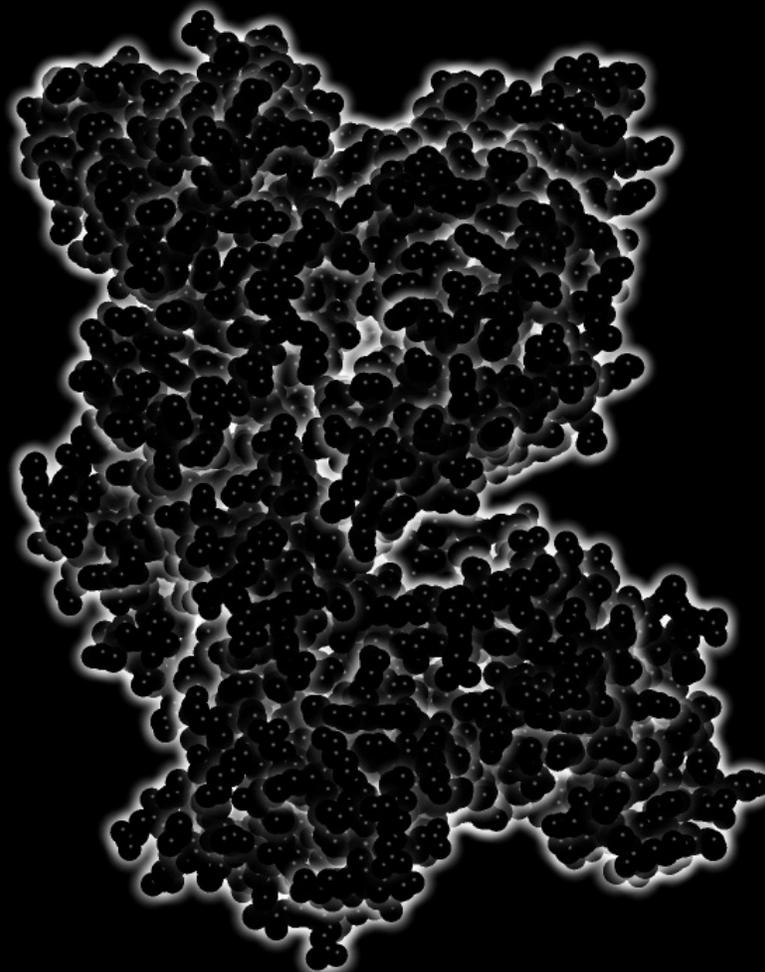


Figura 15 – Frio escuro (*Cool (dark)*).

4.12. Bordas frias (*Cool borders*)

Esta predefinição é obtida usando os seguintes parâmetros de customização:

- **Cores base:** saturação mínima;
- **Ponto de luz:** intensidade pouco acima da média, achatamento máximo, reflexo máximo, brilho máximo, sombras mínimas, segunda luz inabilitada e simulação de microscopia eletrônica de varredura ausente;
- **Luz ambiente:** intensidade mínima;
- **Autobalanco:** ausente;
- **Fundo:** brilho médio e cor cinza (matiz 160, saturação 0, luminosidade 240, vermelho 255, verde 255 e azul 255);
- **Profundidade:** força máxima;
- **Halos:** tamanho mínimo, força, variação e cor inabilitadas;
- **Bordas:** tamanho máximo e variação média (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

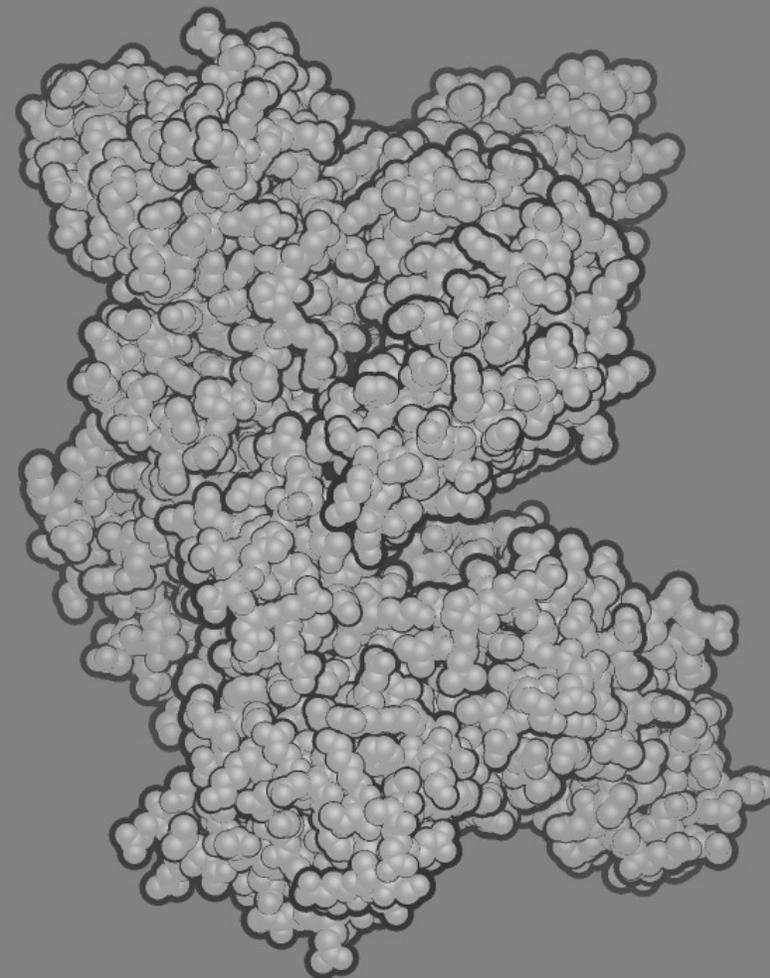


Figura 16 – Bordas frias (*Cool borders*).

4.13. Simulação de microscopia eletrônica de varredura (*Simulate S.E.M.*)

Esta predefinição é obtida usando os seguintes parâmetros de customização:

- **Cores base:** saturação próxima da mínima;
- **Ponto de luz:** intensidade próxima da mínima, achatamento mínimo, reflexo mínimo, brilho inabilitado, sombras mínimas, segunda luz ausente e simulação de microscopia eletrônica de varredura presente;
- **Luz ambiente:** intensidade próxima da máxima;
- **Autobalanco:** ausente;
- **Fundo:** brilho abaixo da média e cor cinza (matiz 160, saturação 0, luminosidade 240, vermelho 255, verde 255 e azul 255);
- **Profundidade:** força mínima;
- **Halos:** tamanho mínimo, força, variação e cor inabilitadas;
- **Bordas:** tamanho mínimo e variação inabilitada (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

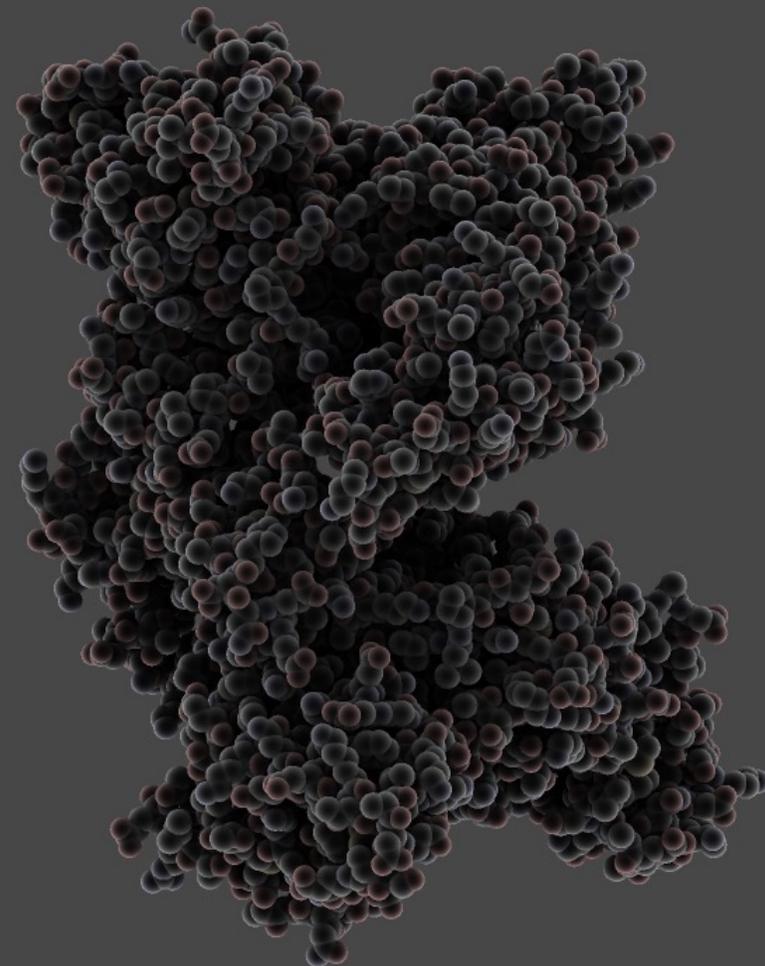


Figura 17 – Simulação de microscopia eletrônica de varredura (*Simulate S.E.M.*)

4.14. Simulação de microscopia eletrônica de varredura (2) (*Simulate S.E.M. (2)*)

Esta predefinição é obtida usando os seguintes parâmetros de customização:

- **Cores base:** saturação mínima;
- **Ponto de luz:** intensidade próxima da mínima, achatamento mínimo, reflexo mínimo, brilho inabilitado, sombras mínimas, segunda luz ausente e simulação de microscopia eletrônica de varredura presente;
- **Luz ambiente:** intensidade próxima da máxima;
- **Autobalanco:** ausente;
- **Fundo:** brilho próximo ao mínimo e cor cinza (matiz 160, saturação 0, luminosidade 240, vermelho 255, verde 255 e azul 255);
- **Profundidade:** força mínima;
- **Halos:** tamanho próximo do mínimo, força acima da metade, variação pouco abaixo da metade e cor branca;
- **Bordas:** tamanho mínimo e variação inabilitada (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

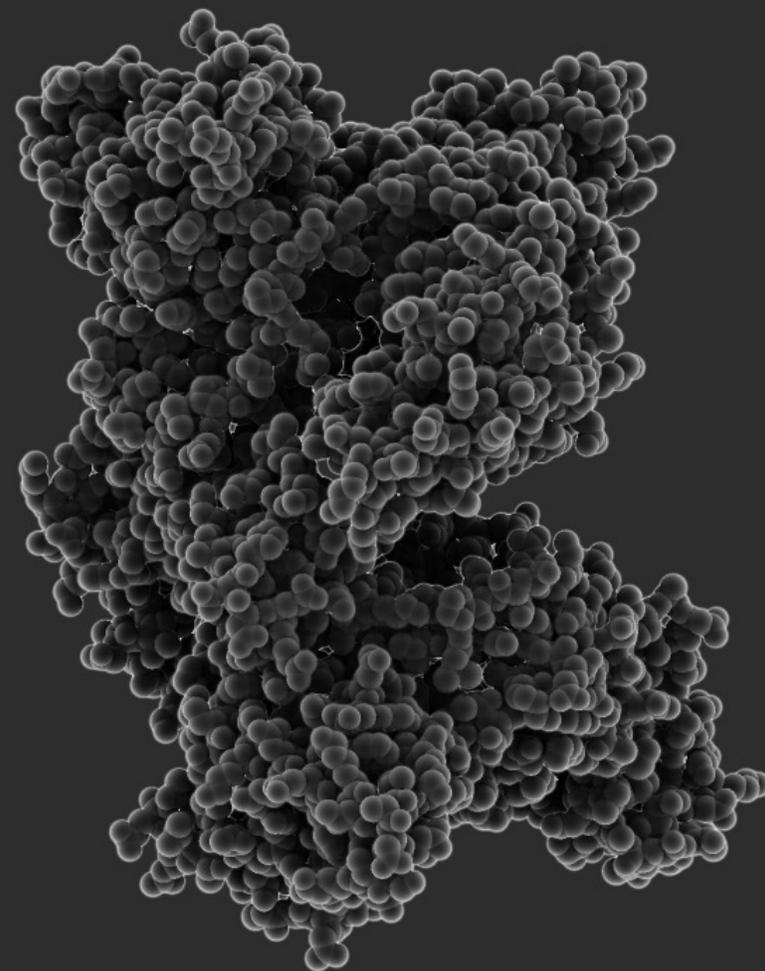


Figura 18 – Simulação de microscopia eletrônica de varredura (2) (*Simulate S.E.M. (2)*)

4.15. Percepção de forma (*Shape perception*)

Esta predefinição é obtida usando os seguintes parâmetros de customização:

- **Cores base:** saturação mínima;
- **Ponto de luz:** intensidade mínima, achatamento inabilitado, reflexo médio, brilho médio, sombras mínimas, segunda luz ausente e simulação de microscopia eletrônica de varredura ausente;
- **Luz ambiente:** intensidade máxima;
- **Autobalanco:** presente;
- **Fundo:** brilho próximo ao máximo e cor cinza clara (matiz 160, saturação 0, luminosidade 240, vermelho 255, verde 255 e azul 255);
- **Profundidade:** força mínima;
- **Halos:** tamanho mínimo, força, variação e cor inabilitadas;
- **Bordas:** tamanho abaixo da média e variação média (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

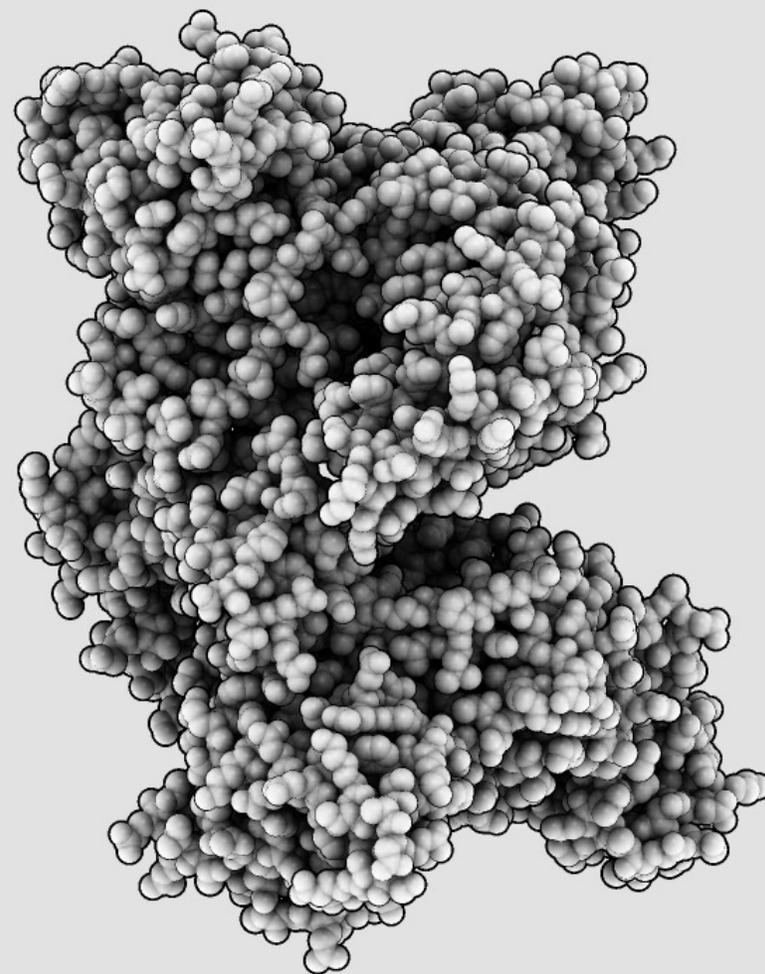


Figura 19 – Percepção de forma (*Shape perception*)

5. Menu de geometria (*Geometry*)

O segundo menu do QuteMol® determina as formas e padrões de cores das moléculas que podem ser:

- Preenchimento de espaço (*Space-fill*);
- Varetas (*Licorice*);
- Bolas e varetas (*Balls'n'Sticks*);
- Exibição de heteroátomos (*Show 'HET' atoms*);
- Padrões de cores (*Material Color*) (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

Cada uma dessas funções serão apresentadas a seguir, utilizando como modelo o arquivo 1AO6.pdb (Sugio, Mochizuki, Noda, Kashima, 2011), que refere-se à estrutura dimérica da albumina sérica humana.

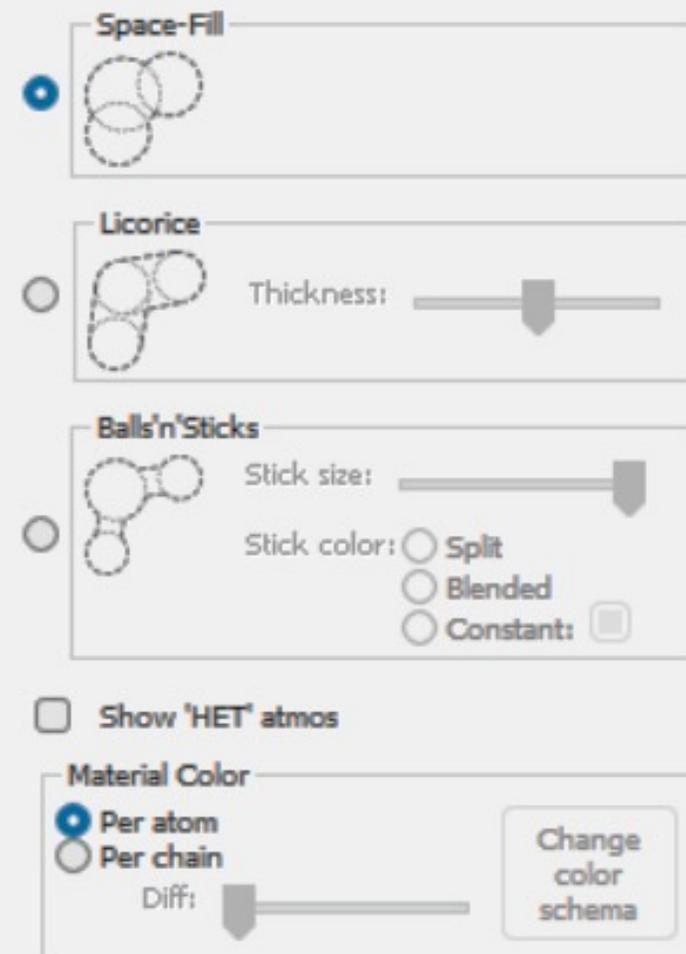


Figura 20 – Menu Geometria (*Geometry*).

5.1. Representação em espaço preenchido (*Space-fill*)

No modo de representação em espaço preenchido (*Space-fill*), a molécula é representada como esferas sólidas unidas. Também é chamado de modelo CPK, pois foi criado por Robert Corey e Linus Pauling em 1952 e modificado por Walter L. Koltun em 1965. Assim, a sigla CPK refere-se às primeiras letras dos pesquisadores Corey, Pauling e Koltun. Este modo de representação permite a visualização do volume que a molécula ocupa, oferecendo uma visão geral de sua superfície externa e a visualização de sua estrutura terciária. Neste modelo, é considerado o raio de van der Waals, que corresponde ao raio de uma esfera sólida imaginária que representa um átomo. Os raios de van der Waals são determinados a partir de distâncias de contato de átomos não ligados e definem o volume e superfície de um átomo ou molécula (Hassunuma, Souza, 2015).

Na Figura 21, está representada uma área ampliada da albumina sérica humana dimérica, utilizando o arquivo 1AO6.pdb (Sugio, Mochizuki, Noda, Kashima, 2011), na predefinição Apenas luz direta (*Direct light only*) e no modo de representação em espaço preenchido (*Space-fill*).

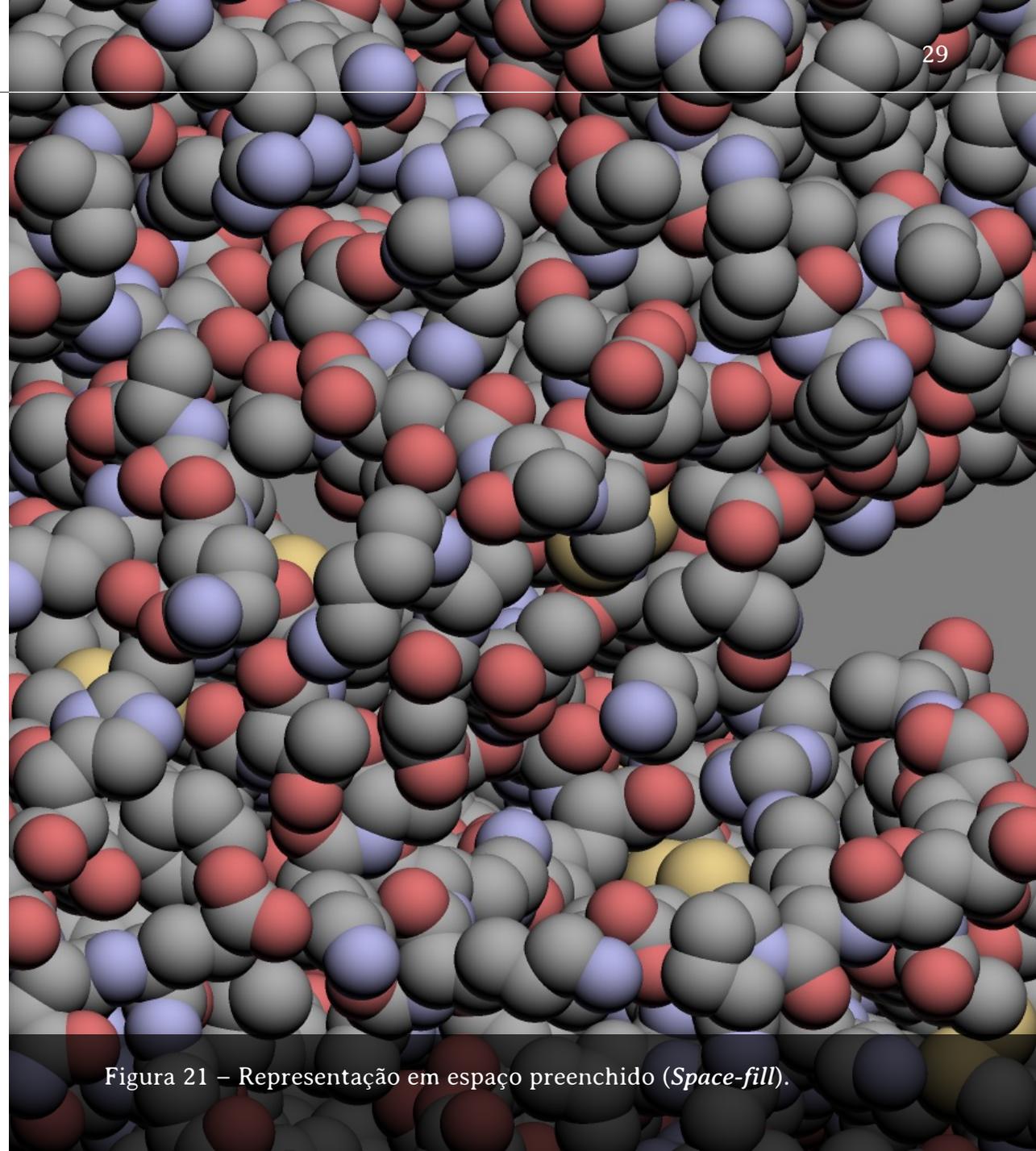


Figura 21 – Representação em espaço preenchido (*Space-fill*).

5.2. Representação em varetas (*Licorice*)

O modo de representação em varetas (*Licorice*) corresponde a uma variação do modelo de bolas e varetas, em que os átomos são representados por esferas e as ligações químicas por varetas. O que ocorre no caso do modelo em varetas é que as esferas que representam os átomos possuem o mesmo diâmetro que as varetas. Assim, são observadas apenas as varetas que correspondem às ligações químicas que unem os átomos (Hassunuma, 2017; Hassunuma, Souza, 2015).

Na Figura 22, está representada uma área ampliada da albumina sérica humana dimérica, utilizando o arquivo 1AO6.pdb (Sugio, Mochizuki, Noda, Kashima, 2011), na predefinição Apenas luz direta (*Direct light only*) e no modo de representação em varetas (*Licorice*). Na Figura 22a, a molécula está representada na espessura média padrão, na 22b na espessura mínima e na 22c na espessura máxima.

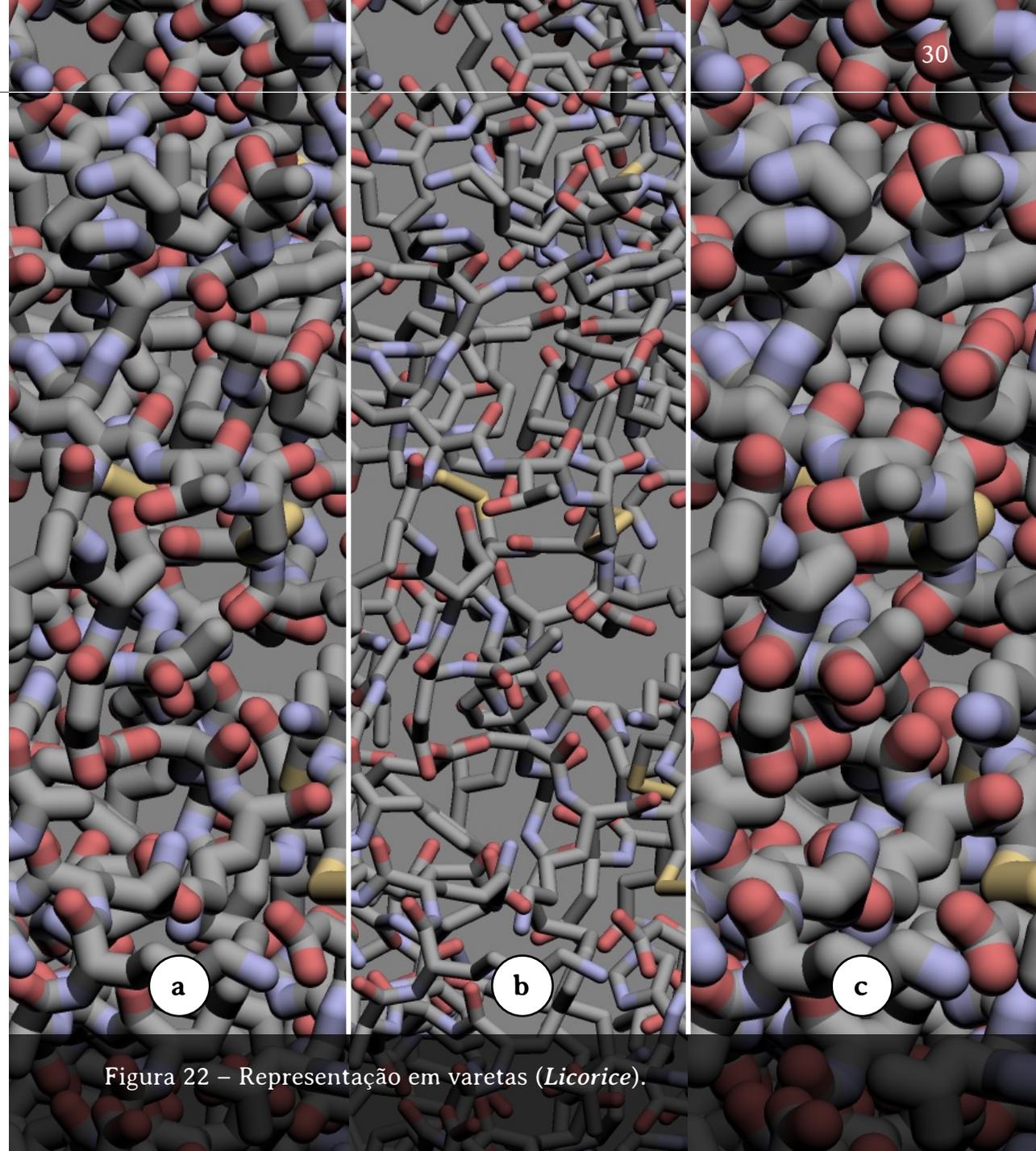


Figura 22 – Representação em varetas (*Licorice*).

5.3. Representação em bolas e varetas (*Balls'n'Sticks*)

No modo de representação em bolas e varetas (*Balls'n'Sticks*), os átomos são representados por esferas e as ligações químicas por varetas (Hassunuma, 2017; Hassunuma, Souza, 2015).

Na Figura 23, está representada a albumina sérica humana dimérica no programa QuteMol®, utilizando o arquivo 1AO6.pdb (Sugio, Mochizuki, Noda, Kashima, 2011), na predefinição Apenas luz direta (*Direct light only*) e no modo de representação em bolas e varetas (*Balls'n'Sticks*). Na Figura 23a, a molécula está representada com as varetas na espessura máxima padrão e na 23b na espessura mínima.

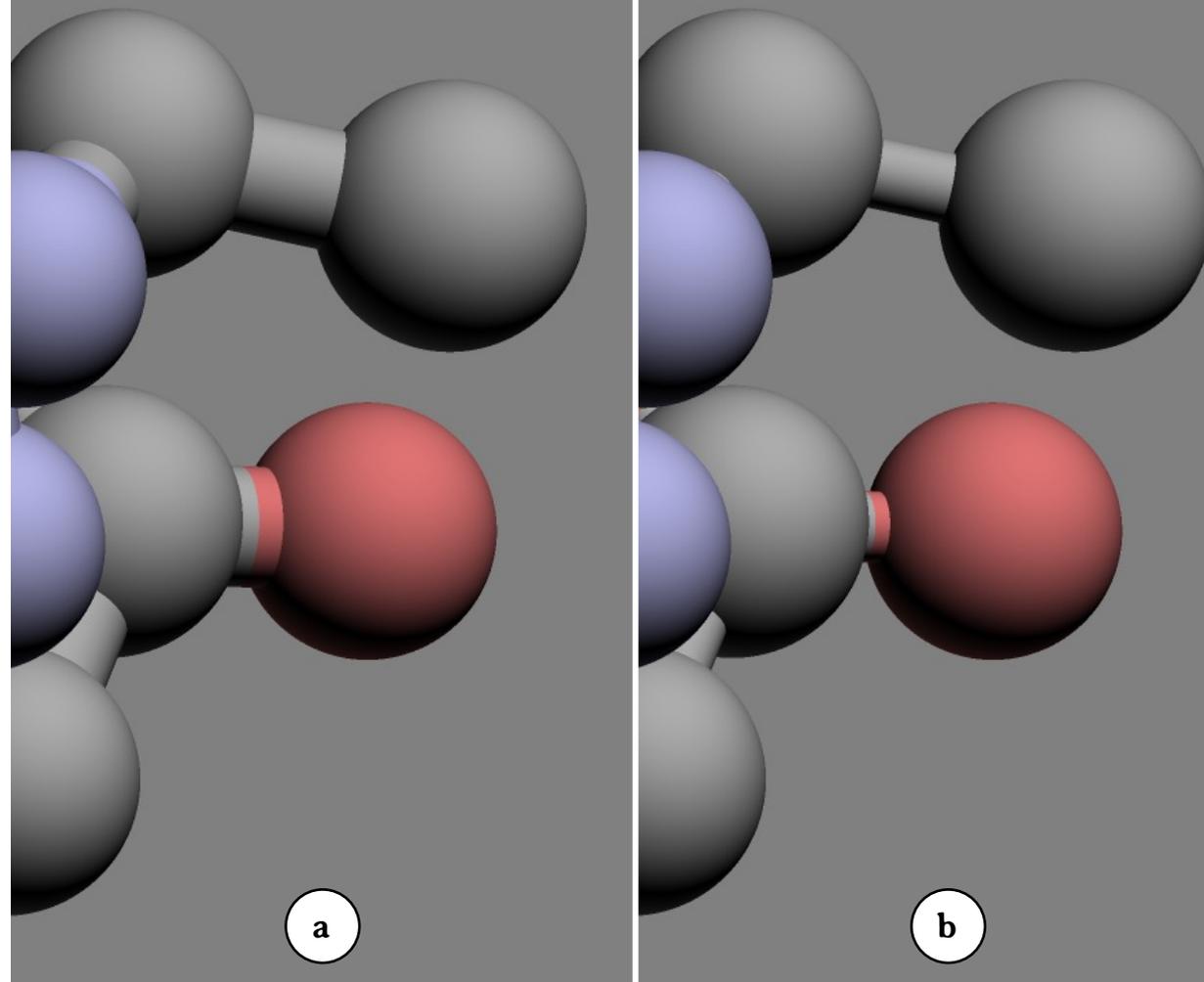


Figura 23 – Representação em bolas e varetas (*Balls'n'Sticks*).

No modo de representação em bolas e varetas (*Balls'n'Sticks*), é possível ainda modificar as cores das varetas (ou seja, das ligações químicas entre os átomos) (Figura 24). Na Figura 24a, as varetas estão representadas no modo Dividido (*Split*), na 24b no modo Misturado (*Blended*) e na 24c no modo Constante (*Constant*) em que o usuário do programa pode escolher a cor da vareta (no exemplo da Figura 24c, foi escolhida a cor ciano).

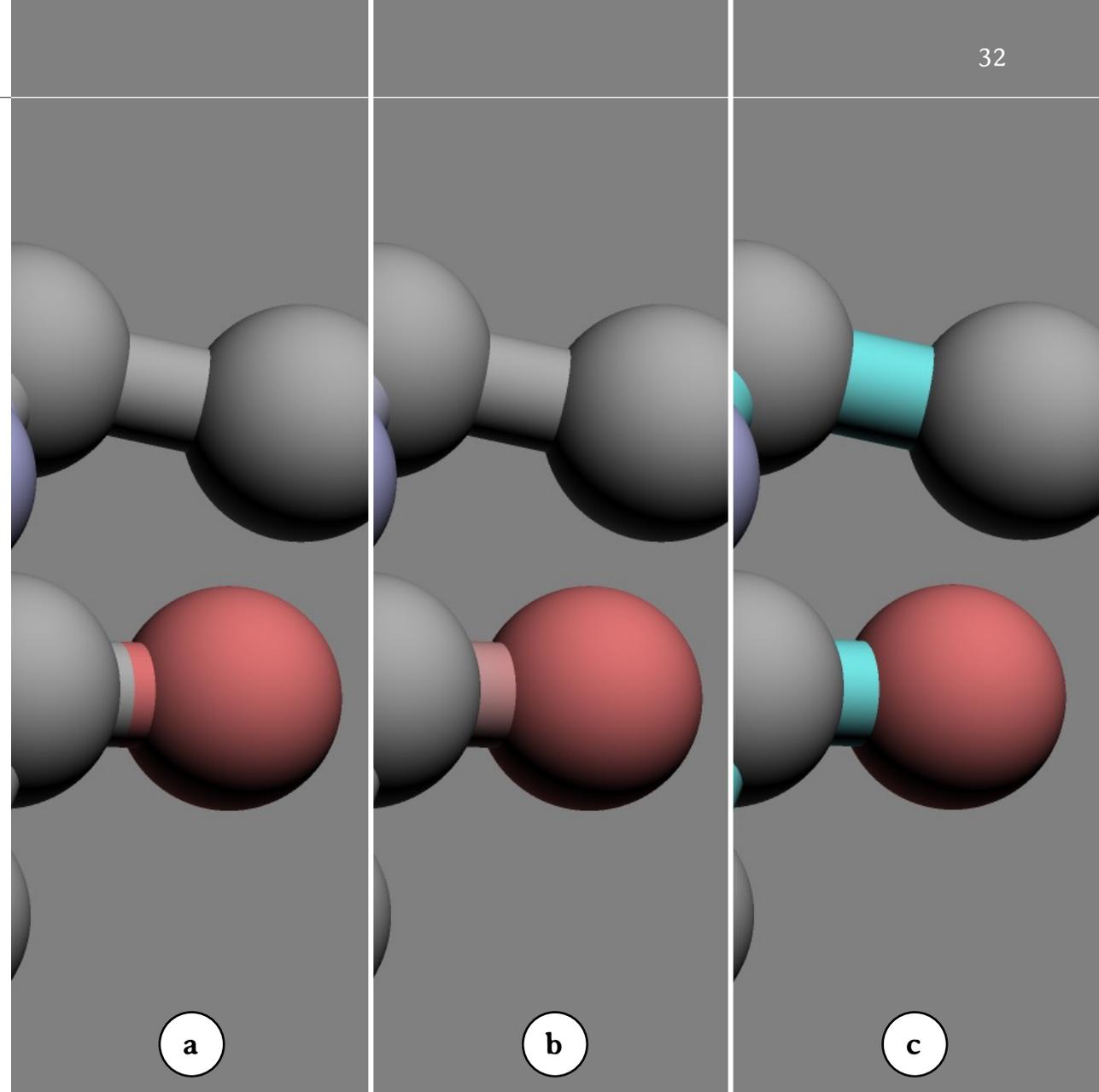


Figura 24 – Ligações químicas na representação em bolas e varetas (*Balls'n'Sticks*).

5.4. Representação de heteroátomos (*'HET' atoms*)

São considerados heteroátomos, aqueles que constituem solventes ou ligantes que foram cristalizados junto à estrutura da proteína ou ácido nucleico. Um exemplo de solvente é a molécula de água ou que podem estar dissolvidos na água. Os ligantes correspondem aos demais heteroátomos que não são classificados como solventes (Hassunuma, Souza, 2015).

O comando heteroátomos permite que os mesmos sejam ou não representados. Na Figura 25, está representada a albumina sérica humana dimérica no programa QuteMol[®], utilizando o arquivo 1AO6.pdb (Sugio, Mochizuki, Noda, Kashima, 2011), na predefinição Apenas luz direta (*Direct light only*) e no modo de representação em bolas e varetas (*Balls'n'Sticks*).

Na Figura 25a, a seta indica um átomo de oxigênio de uma molécula de água exibida no modo heteroátomos (*'HET' atoms*) e na Figura 25b, o mesmo átomo deixa de ser representado sem o modo heteroátomos (*'HET' atoms*).

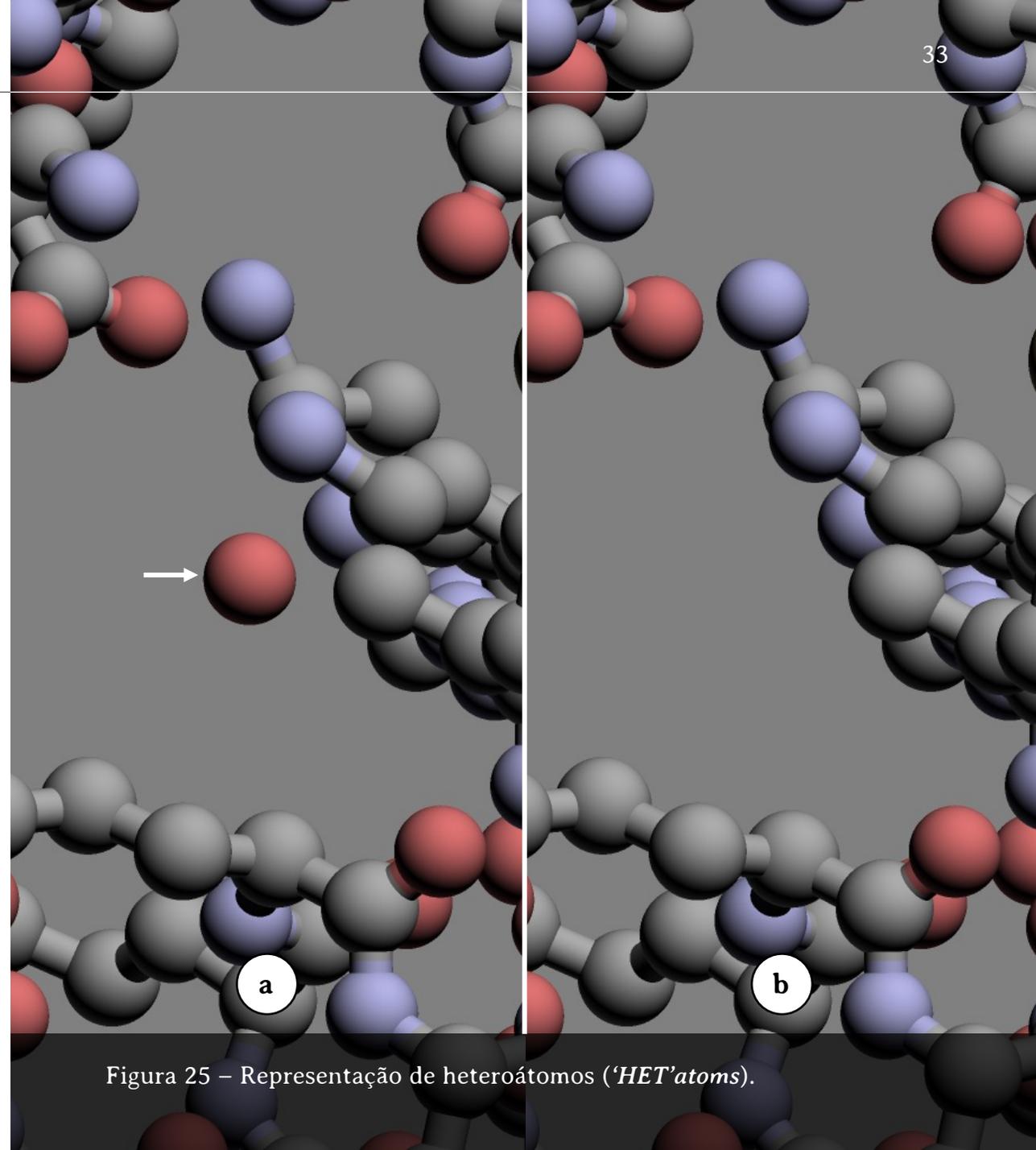


Figura 25 – Representação de heteroátomos (*'HET' atoms*).

5.5. Cor do material (*Material color*)

Na seção **Cor do material** (*Material color*), o usuário do programa pode escolher entre a cor por átomo (*Per atom*) ou por cadeia (*Per chain*).

Na Figura 26, está representada uma área ampliada da albumina sérica humana dimérica, utilizando o arquivo 1AO6.pdb (Sugio, Mochizuki, Noda, Kashima, 2011), na predefinição Apenas luz direta (*Direct light only*) e no modo de representação em Espaço preenchido (*Space-fill*).

Na Figura 26a, a molécula está representada na cor por átomo (*Per atom*), que utiliza o padrão CPK, que foi estabelecido por Robert Corey e Linus Pauling em 1952 e modificado por Walter L. Koltun em 1965.

Na Figura 26b, observa-se a representação de cor por cadeia (*Per chain*), onde os átomos da cadeia posicionada na parte superior da figura estão representados na cor verde e os da parte inferior da figura na cor roxa. O QuteMol® apresenta uma combinação de cores predefinidas que pode ser alterada usando o **botão Mudar esquema de cores** (*Change color schema*). Neste programa, não é possível que o usuário escolha as cores de cada cadeia individualmente.

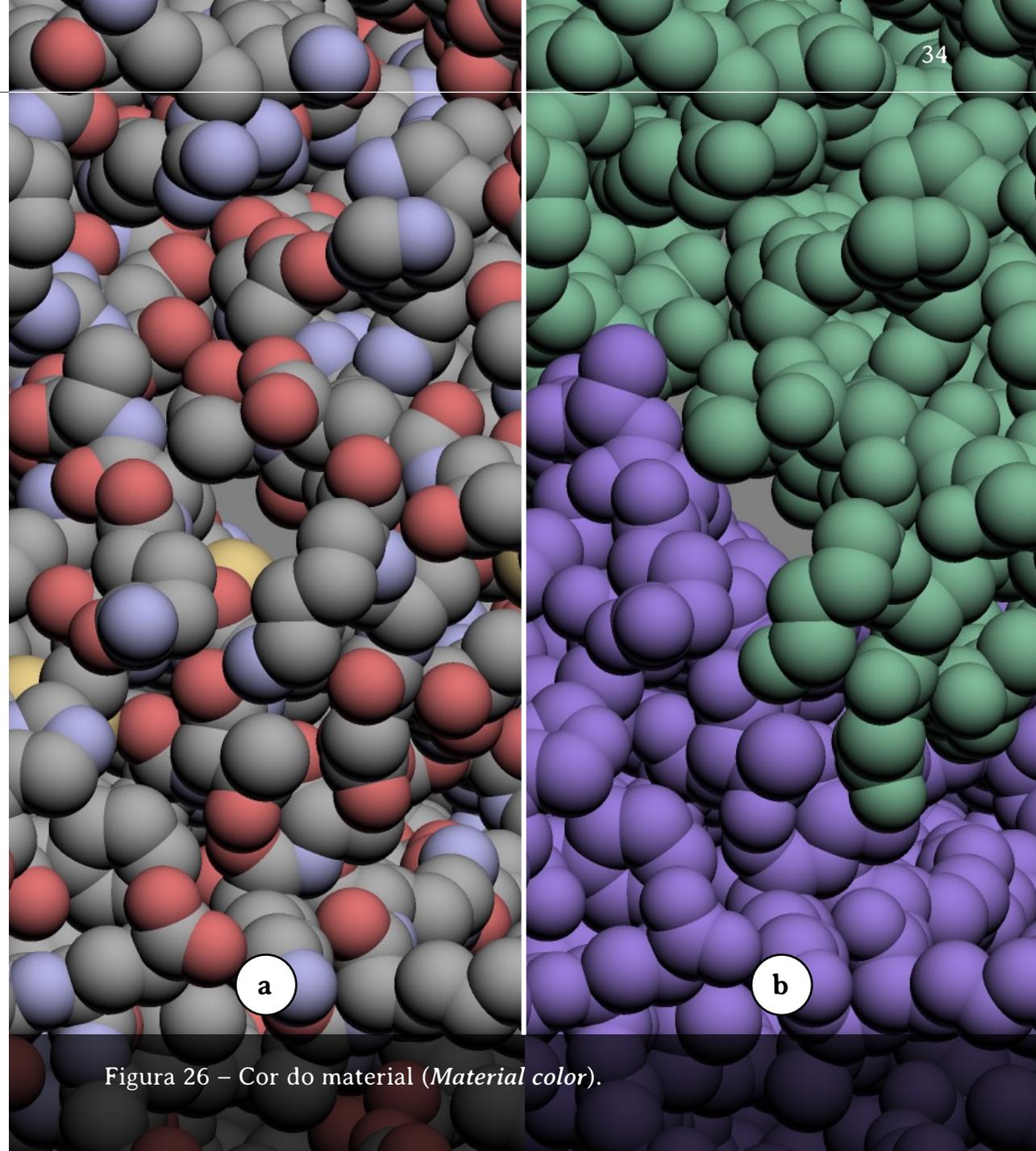


Figura 26 – Cor do material (*Material color*).

No modo de representação de cor por cadeia (*Per chain*), ainda é possível variar os tons dos átomos de uma mesma cadeia utilizando o **botão de regulação de Diferença (*Diff*)** (Figura 27). Na Figura 27a, a diferença de cores foi regulada para um valor mínimo e na 27b para um valor máximo, sendo possível observar o aumento entre o contraste das cores dos átomos.

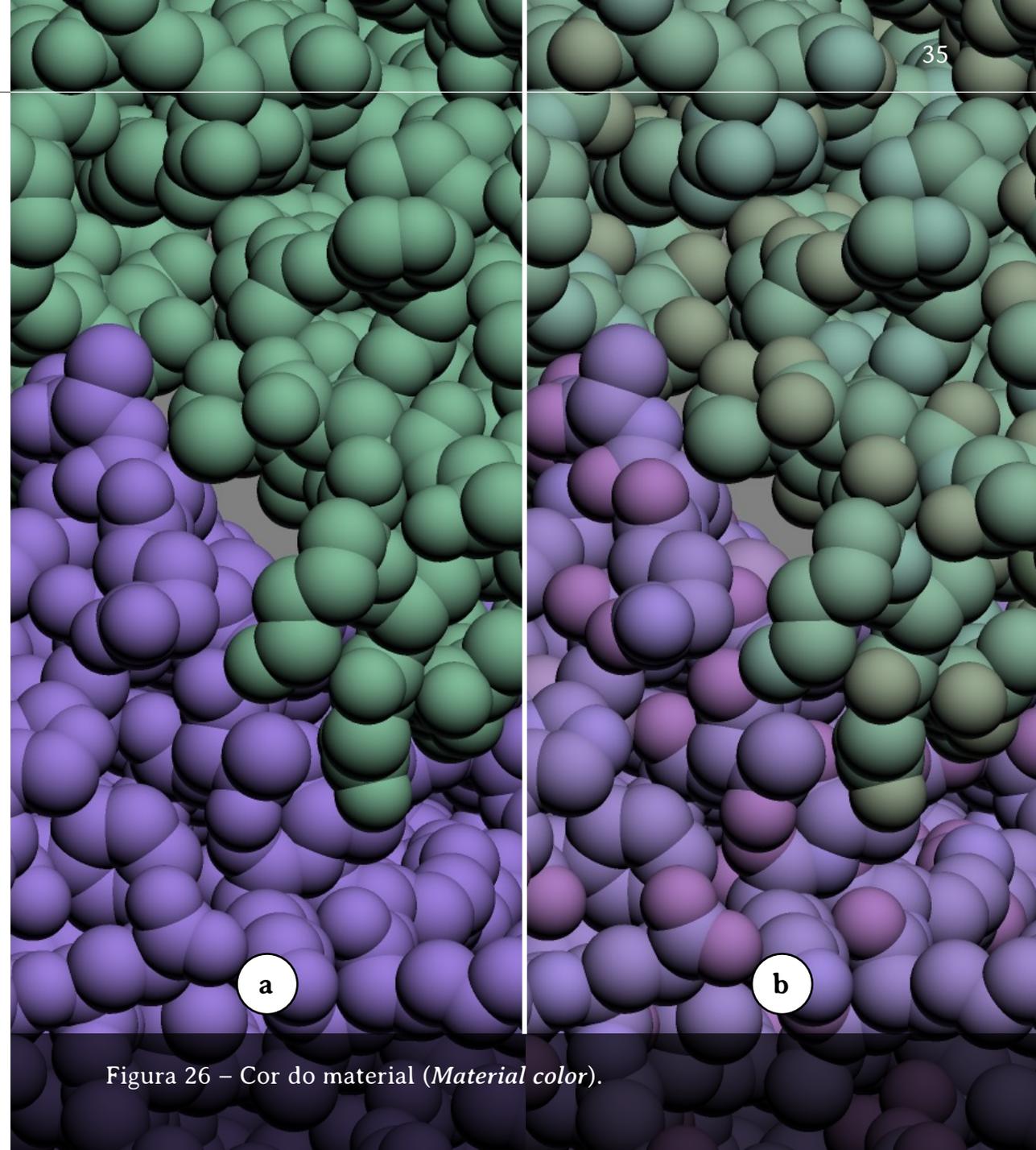
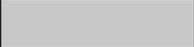


Figura 26 – Cor do material (*Material color*).

O Quadro 1 apresenta o **padrão de cores CPK** utilizado na representação de alguns elementos químicos. A diferença de tonalidade observada nas representações no QuteMol® se deve ao fato de o programa utilizar efeitos de cores, iluminação, textura, entre outros.

Elemento	Cor	Amostra	Valores RGB
Carbono	Cinza claro		[200,200,200]
Oxigênio	Vermelho		[240,0,0]
Hidrogênio	Branco		[255, 255,255]
Nitrogênio	Azul celeste		[143,143,255]
Enxofre	Amarelo		[255,200,50]
Fósforo, Ferro e Bário	Laranja		[255,165,0]
Cloro, Boro	Verde		[0,255,0]
Bromo, Zinco, Cobre, Níquel	Marrom		[165,42,42]
Sódio	Azul		[0,0,255]
Magnésio	Verde folha		[34,139,34]
Cálcio, Manganês, Cromo, Alumínio, Titânio, Prata	Cinza escuro		[128,128,144]
Flúor, Silício, Ouro	Dourado		[218, 165, 32]
Iodo	Púrpura		[160, 32, 240]
Lítio	Vermelho tijolo		[178, 34, 34]
Hélio	Rosa		[255, 192, 203]
Demais átomos	Rosa profundo		[255,20,147]

Quadro 1 – Padrão de cores CPK.

6. Menu Customizar (*Customize*)

O terceiro menu do QuteMol® permite que o usuário personalize alguns padrões de exibição da molécula:

- **Cores base (*Base colors*):** regula o nível de saturação;
- **Ponto de luz (*Point light*):** regula os níveis de intensidade (*intensity*), achatamento (*flatten*), reflexo (*shininess*), brilho (*glossiness*), sombras (*shadows*), segunda luz (*2way light*) e simulação de microscopia eletrônica de varredura (*fake SEM*);
- **Luz ambiente (*Ambient light*):** regula a intensidade (*intensity*) de luz ambiente;
- **Autobalanco (*Autobalance*):** regula os níveis de intensidade do Ponto de luz (*Point light*) e de intensidade de Luz ambiente (*Ambient light*) de forma que sejam inversamente proporcionais;
- **Fundo (*Background*):** regula o nível de brilho (*brightn.*) e a cor (*color*) do fundo;
- **Profundidade (*Depth cueing*):** regula o nível de força (*strenght*) de profundidade;
- **Halos (*Halos*):** regula o tamanho (*size*), força (*strenght*) e variação (*variance*) e cor (*color*), sendo que a última pode ser branca ou preta;

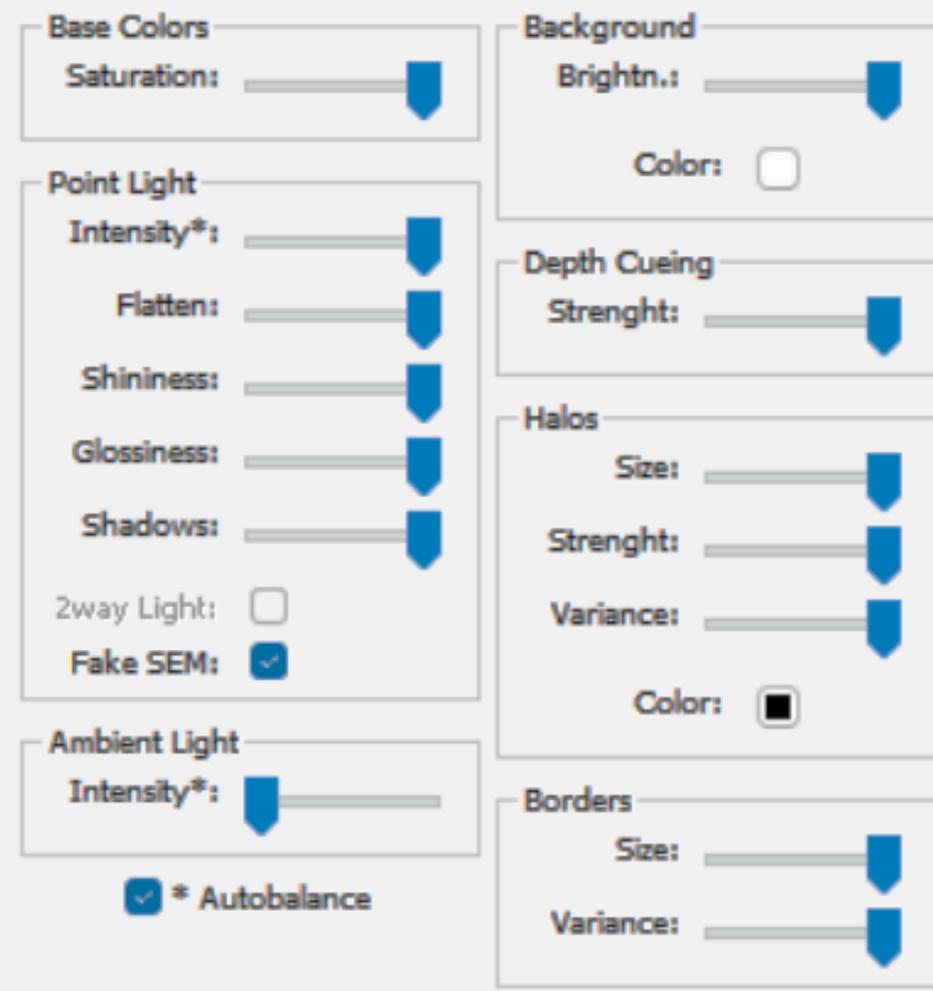


Figura 27 – Menu Customizar (*Customize*).

- **Bordas (*Borders*):** ajusta o tamanho (*size*) e variação (*variance*) (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

Uma das principais limitações observadas neste menu é a ausência de valores numéricos para os itens mencionados anteriormente. O usuário pode mover as setas, modificando o nível dos parâmetros, porém não há um valor numérico exibido. Isso torna difícil a reprodução de figuras customizadas neste programa.

Vale ressaltar também que ao clicar em Cor (*Color*) na seção Fundo (*Background*) é aberta a janela Escolher cor de fundo (*Choose background color*) (Figura 28), onde o usuário pode personalizar as cores do fundo, escolhendo por cores básicas (que são predefinidas pelo QuteMol®) (letra a da Figura 28), cores que o próprio usuário criou (Cores personalizadas) (b) e salvou em Adicionar às cores personalizadas (c). Ou ainda o usuário pode ajustar a cor de fundo, clicando no quadro de cor (d) e de brilho (e) ou digitar os valores de matiz (*matiz*), saturação (*sat*), luminosidade (*lum.*), níveis de vermelho, verde e azul (f).

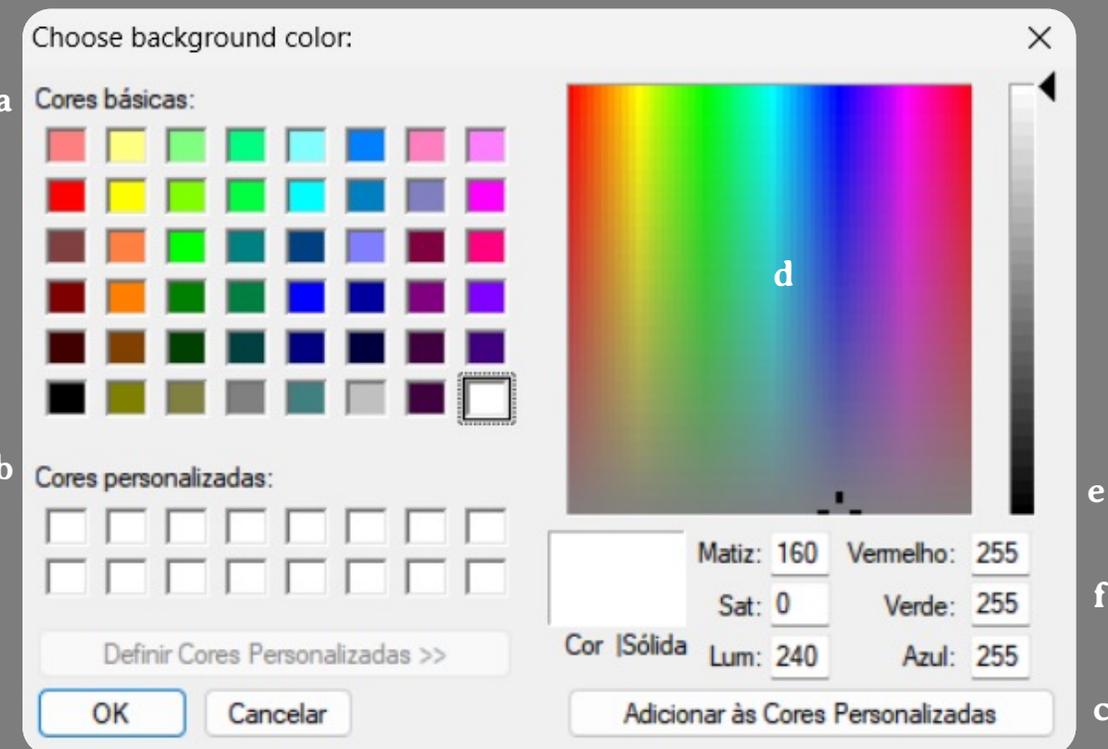


Figura 28 – Janela Escolher cor de fundo (*Choose background color*).

7. Comando Salvar um instantâneo (*Save a snapshot*)

No QuteMol®, as imagens produzidas podem ser salvas pelo menu principal (Figura 29), clicando no **ícone de máquina fotográfica (a)** próximo ao canto superior esquerdo, logo abaixo do botão abrir o usuário pode salvar as imagens produzidas nos seguintes formatos:

- **PNG (lossless):** onde uma figura estática é salva no formato PNG com menor perda de resolução;
- **JPEG (lossy):** onde a figura estática é salva no formato JPEG mais compacto, mas com maior perda de resolução;
- **GIF animation:** onde a figura em movimento é salva no formato GIF (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

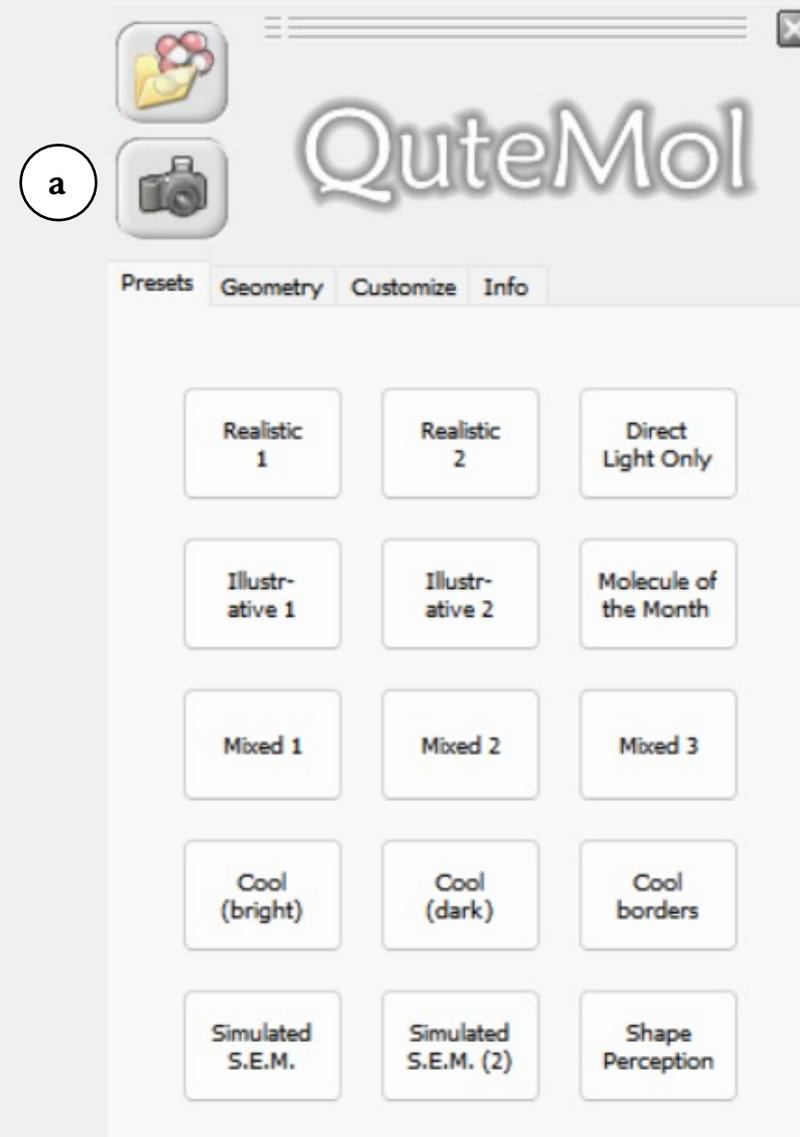


Figura 29 – Comando Salvar um instantâneo (*Save a snapshot*).

7.1. PNG (*lossless*)

Ao optar por salvar a imagem no formato PNG (*lossless*), é aberta a janela Opções de instantâneo PNG (*PNG snapshot options*) (Figura 30), que permite escolher:

- **Resolução da imagem (*Resolution*):** que pode variar de 32 a 8192 pixels (a);
- **Função Antisserrilhamento (*AntiAlias*):** que suaviza os contornos da molécula, reduzindo o serrilhamento nas bordas causada pela baixa resolução de pixels (b);
- **Função PNG transparente (*Transparent PNG*):** onde a figura em movimento é salva no formato GIF (c) (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

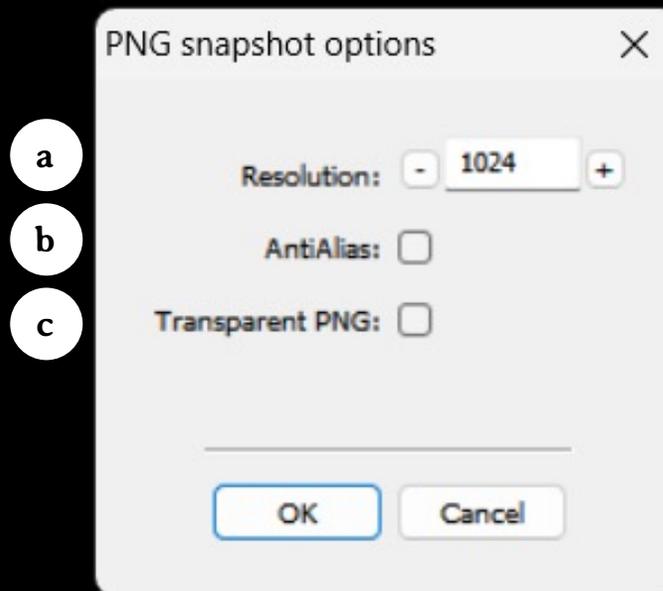


Figura 30 – Janela Opções de instantâneo PNG (*PNG snapshot options*).

7.2. JPEG (*lossy*)

Ao optar por salvar a imagem no formato JPEG (*lossy*), é aberta a janela Opções de instantâneo JPG (*JPG snapshot options*) (Figura 31), que permite escolher:

- **Resolução da imagem (*Resolution*):** que pode variar de 32 a 8192 pixels (a);
- **Função Antisserrilhamento (*AntiAlias*):** que suaviza os contornos da molécula, reduzindo o serrilhamento nas bordas causada pela baixa resolução de pixels (b) (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

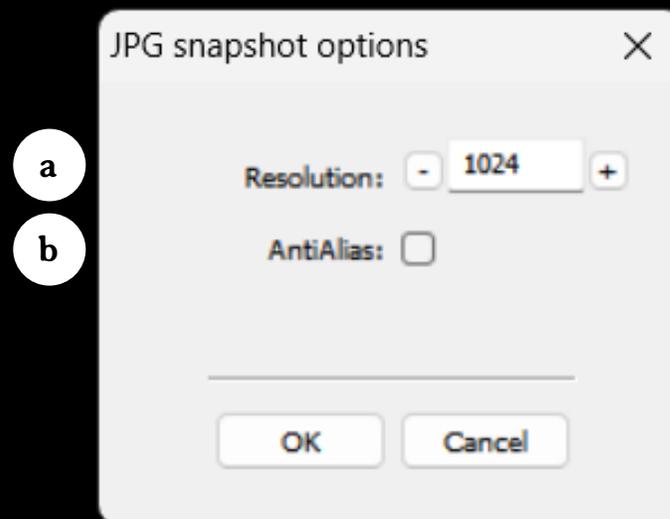


Figura 31 – Janela Opções de instantâneo JPG (*JPG snapshot options*).

7.3. GIF animation

Ao optar por salvar a imagem no formato *GIF animation*, é aberta a janela Opções de GIF animado (*GIF animation options*) (Figura 32), que permite escolher:

- **Resolução da imagem (*Resolution*):** que pode variar de 32 a 8192 pixels (a);
- **Função Antisserrilhamento (*AntiAlias*):** que suaviza os contornos da molécula, reduzindo o serrilhamento nas bordas causada pela baixa resolução de pixels (a)
- **Comando de Pausa inicial em milissegundos (*Initial pause (ms)*):** que ajusta o período (entre 0 a 10.000 ms) em que a molécula permanece parada antes que o movimento seja iniciado;
- **Modos de movimentação da molécula:**
 - Modo de rotação completa (*Full rotation mode*);
 - Modo de inspeção (*Inspection mode*);
 - Modo de seis lados (*Six-Sides mode*) (Tarini, Cignoni, Montani, 2006);

Cada um dos modos de movimentação serão explicados a seguir.

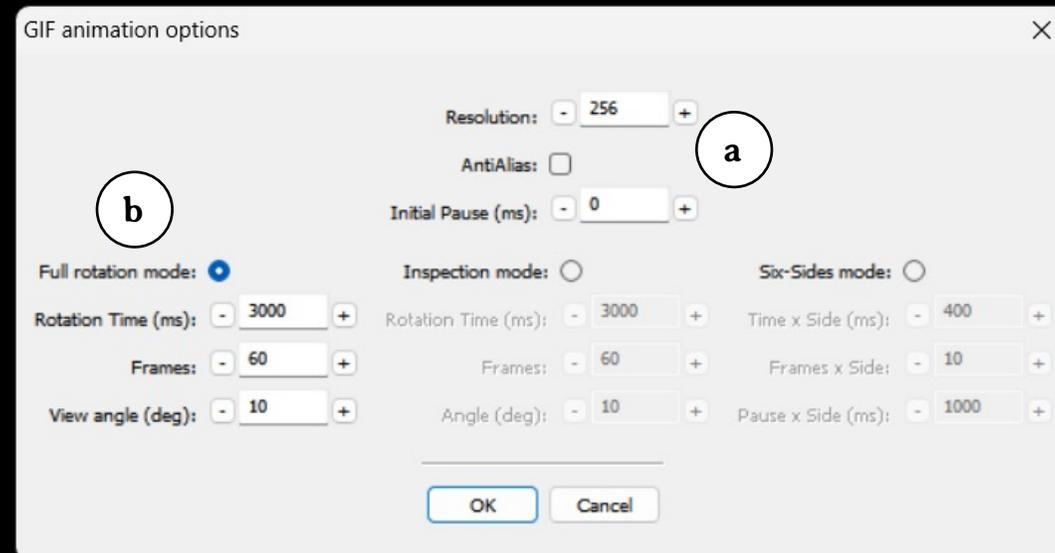


Figura 32 – Janela Opções de GIF animado (*GIF animation options*).

7.3.1 Modo de rotação completa (*Full rotation mode*)

No **Modo de rotação completa** (*Full rotation mode*) (indicado por a na Figura 33), a molécula realiza um giro de 360 graus ao redor do eixo Y no sentido anti-horário. Nesse modo, o usuário pode ajustar:

- **Tempo de rotação em milissegundos** (*Rotation time (ms)*): que pode variar de 500 a 10.000, girando a molécula em velocidade mais rápida ou mais lenta, respectivamente;
- **Quadros** (*Frame*): que pode variar de 10 a 1000 quadros por giro da molécula;
- **Ângulo de visão (graus)** (*View angle (deg.)*): que permite ajustar o ângulo em que a molécula é observada, podendo variar de -5 a 45 graus, para uma visão mais inferior ou superior, respectivamente (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

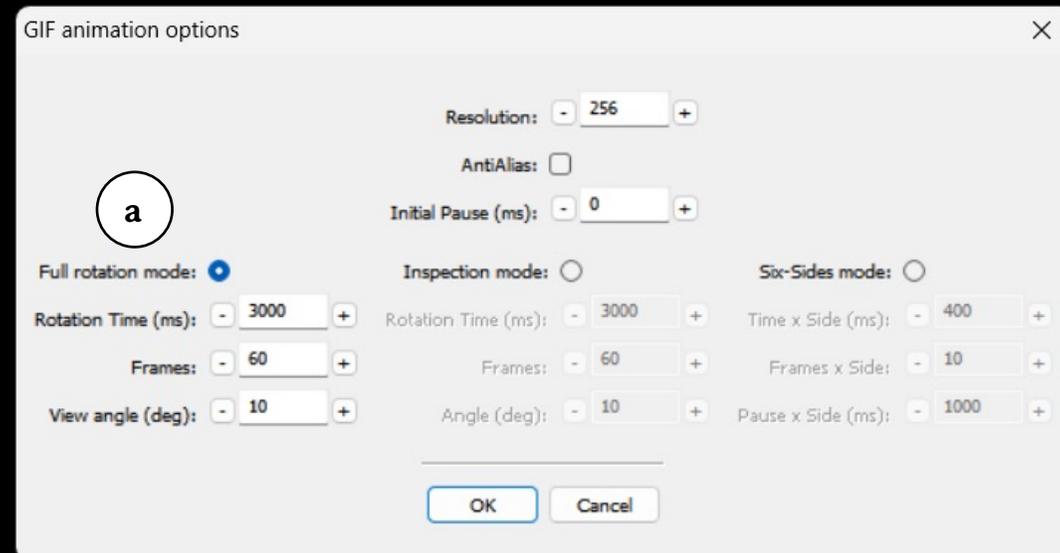


Figura 33 – Modo de rotação completa (*Full rotation mode*).

7.3.2 Modo de inspeção (*Inspection mode*)

No **Modo de inspeção (*Inspection mode*)** (indicado por a na Figura 34), a molécula realiza um movimento circular no plano frontal no sentido anti-horário. Nesse modo, o usuário pode ajustar:

- **Tempo de rotação em milissegundos (*Rotation time (ms)*):** que pode variar de 500 a 10.000, girando a molécula em velocidade mais rápida ou mais lenta, respectivamente;
- **Quadros (*Frame*):** que pode variar de 10 a 1000 quadros por giro da molécula;
- **Ângulo (graus) (*Angle (deg.)*):** que permite ajustar o ângulo em que a molécula é observada, podendo variar de 5 a 35 graus o ângulo de amplitude do movimento circular, que pode ser menor ou maior respectivamente (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

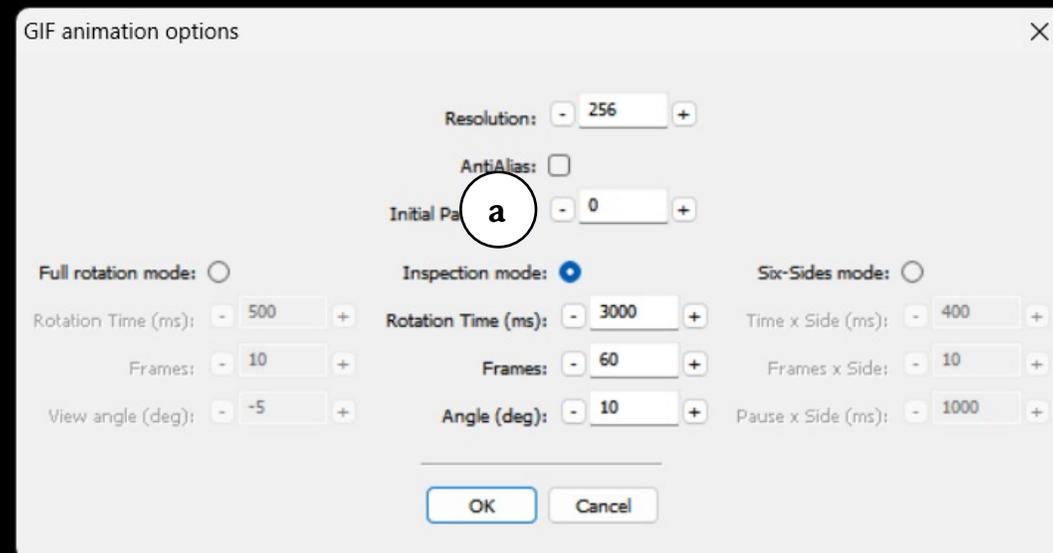


Figura 34 – Modo de inspeção (*Inspection mode*).

7.3.3 Modo de seis lados (*Six-Sides mode*)

No **Modo de seis lados (*Six-Sides mode*)** (indicado por a na Figura 35), a molécula realiza dois ciclos de dois movimentos de 90 graus no eixo y no sentido anti-horário e um movimento de 90 graus no eixo x no sentido posteroanterior, completando um total de seis movimentos. Nesse modo, o usuário pode ajustar:

- **Tempo x Lado em milissegundos (*Time x Side (ms)*)**: que pode variar de 200 a 2.000 ms, determinando quanto tempo a molécula realiza cada movimento, podendo ser menor ou maior respectivamente;
- **Quadros x Lado (*Frame*)**: que pode variar de 10 a 200 quadros para cada movimento da molécula;
- **Pausa x Lado em milissegundos (*Pause x Side (ms)*)**: que permite ajustar o tempo em que a molécula é mantida parada ao final de cada movimento, podendo variar de 500 a 10.000 ms, podendo ser menor ou maior respectivamente (Tarini, Cignoni, Montani, 2006).

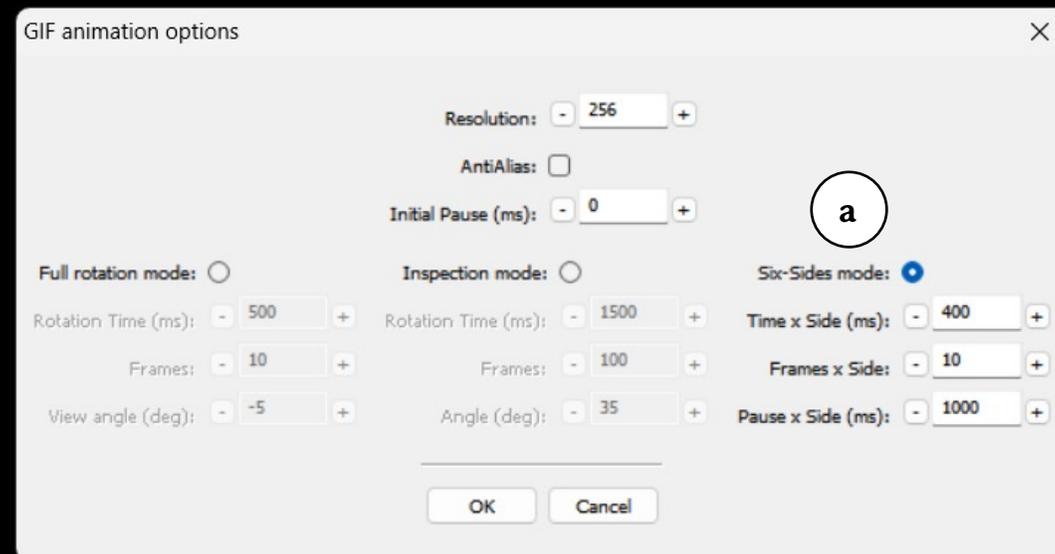


Figura 34 – Modo de seis lados (*Six-Sides mode*).

Créditos das figuras

Figuras 1 a 34.

Fonte: QuteMol®. 2023 [acesso 08 jan 2023]. Disponível em: <https://qutemol.sourceforge.net/>.

* Todas figuras mencionadas acima foram obtidas no *software* QuteMol® (incluindo o logo do programa) e utilizadas com a permissão do Dr. Paolo Cignoni.

Capa, páginas capitulares e contracapa.

Fundo. Fonte: Joshgmit. Fundo de papel de parede tecnologia [Internet]. 2020 apr 12 [acesso 21 abr 2024]. Disponível em: <https://pixabay.com/pt/illustrations/fundo-papel-de-parede-tecnologia-5035258/>. Figura registrada como: *Creative Commons Zero (CC0) license*.

Estrutura bioquímica da albumina sérica humana dimérica. Fonte: Autores, 2023. Figura desenvolvida utilizando o arquivo 1AO6.pdb referente à albumina sérica humana dimérica (Sugio, Mochizuki, Noda, Kashima, 2011) e o programa computacional QuteMol®.

Página 4: Agradecimentos.

Fonte: Tu Vidriera Digital. A cup of tea a smartphone and a laptop on the table [Internet]. 2023 Jun 29 [acesso 05 jul 2023]. Disponível em: <https://www.pexels.com/photo/a-cup-of-tea-a-smartphone-and-a-laptop-on-the-table-17403454/>. Figura registrada como: *Free to use. No attribution required. Creative Commons Zero (CC0) license*.

Página 5: Apresentação.

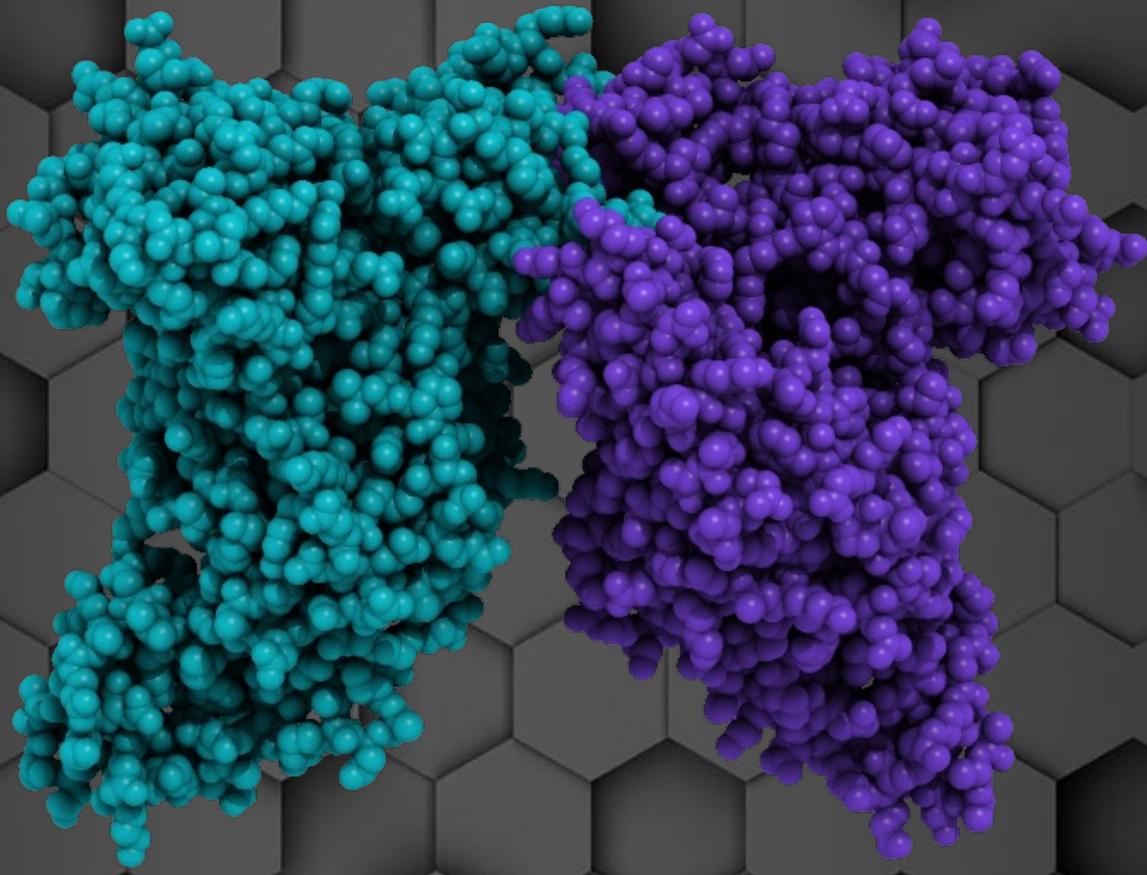
Fonte: Grabowska K. Crop man using touchpad on laptop and notebook with pen [Internet]. 2020 Apr 19 [acesso 05 jul 2023]. Disponível em: <https://www.pexels.com/photo/crop-man-using-touchpad-on-laptop-and-notebook-with-pen-4195397/>. Figura registrada como: *Free to use. No attribution required. Creative Commons Zero (CC0) license*.

Página 37: Quadro 1 – Padrão de cores CPK.

Fonte: Modificado de: Bernstein H J, Bernstein FC. Manual RasMol 2.7.5 [Internet]. 2009 Jul 17 [acesso 08 jul 2023]. Disponível em: http://www.rasmol.org/software/RasMol_2.7.5_Manual.html.

Referências

- Corey RB, Pauling L. Molecular models of amino acids, peptides, and proteins. *Rev Sci Instrum* [Internet]. 1953 [acesso 08 jul 2023];24:621-7. doi: <https://doi.org/10.1063/1.1770803>.
- Hassunuma RM. Guia de comandos em software de simulação computacional de biomoléculas [Internet]. 1ª ed. Bauru: Canal 6 Editora; 2017 [acesso 08 jul 2023]. Capítulo 6, Menu display; p. 16-25. Disponível em: <https://canal6.com.br/livreacesso/livro/guia-de-comandos-em-software-de-simulacao-computacional/>.
- Hassunuma RM, Souza AR. Desenvolvimento de scripts em software de simulação computacional para visualização de biomoléculas [Internet]. 1ª ed. São Paulo: Cultura Acadêmica; 2016 [acesso 08 jul 2023]. Capítulo 3, O software RasMol; p. 32-63. Disponível em: <https://www.culturaacademica.com.br/catalogo/desenvolvimento-de-scripts-em-software-de-simulacao-computacional-para-visualizacao-de-biomoleculas/>.
- Koltun WL. Precision space-filling atomic models. *Biopolymers* [Internet]. 1965 Dec [acesso 08 jul 2023];3(6):665-79. doi: 10.1002/bip.360030606.
- Sugio S, Mochizuki S, Noda M, Kashima A. Crystal structure of human serum albumin [Internet]. 2011 Jul 13 [acesso 06 jul 2023]. doi: 10.2210/pdb1ao6/pdb.
- Tarini M, Cignoni P, Montani C. Ambient occlusion and edge cueing to enhance real time molecular visualization. *IEEE Trans Vis Comput Graph* [Internet]. 2006 Sep-Oct [acesso 29 jun 2023];12(5):1237-44. doi: 10.1109/TVCG.2006.115.



O desenvolvimento de ilustrações digitais de biomoléculas é muito útil na área de Bioinformática, tanto na produção de aulas, quanto no uso em publicações.

Esta obra apresenta o programa computacional **QuteMol®**, uma ferramenta gratuita bastante simples e intuitiva para a produção de imagens estáticas e de gifs animados a partir de arquivos com extensão PDB.

O formato do livro, como um guia rápido, permite que professores e alunos de qualquer nível de ensino possam aprender rapidamente a como utilizar os recursos do programa, obtendo imagens e animações de alta resolução e com qualidade profissional.