



ACESSO ABERTO

Data de Recebimento:

11/04/2023

Data de Aceite:

03/05/2023

Data de Publicação:

15/06/2023

***Autor correspondente:**Renato Massaharu Hassunuma,
rhassunuma@gmail.com**Citação:**

HASSUNUMA, R. M. et al. Qutemol[®]: utilizando o recurso computacional na produção de ilustrações digitais e animações de biomoléculas *. **Revista Multidisciplinar em Educação e Meio Ambiente**, v. 4, n. 1, 2023. <https://doi.org/10.51189/integrar/rema/3753>

QUTEMOL[®]: UTILIZANDO O RECURSO COMPUTACIONAL NA PRODUÇÃO DE ILUSTRAÇÕES DIGITAIS E ANIMAÇÕES DE BIOMOLÉCULAS *

Renato Massaharu Hassunuma ¹, Fábio Aparecido da Silva ², Amanda Cristina Moço ¹, Patrícia Carvalho Garcia ¹, Michele Janegitz Acorci-Valério ¹, Marjorie de Assis Golim ³, Sandra Heloisa Nunes Messias ⁴.

¹ Universidade Paulista, Câmpus Bauru. Rua Luís Levorato, 140 - Chácaras Bauruenses, Bauru - SP, 17048-290.

² Irmandade da Santa Casa de Misericórdia de Pederneiras. Av. Paulista, O-325 - Centro, Pederneiras - SP, 17280-000.

³ Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho" – UNESP, Câmpus Botucatu. Av. Prof. Mário Rubens Guimarães Montenegro, s/nº Campus da Unesp - CEP: 18618-867 - Botucatu-SP.

⁴ Universidade Paulista – UNIP, Câmpus Paraíso. Rua Vergueiro, 1211, 8º andar - Paraíso - São Paulo – SP, CEP: 01504-001.

RESUMO

Introdução: Ilustrações digitais e *gifs* animados de biomoléculas são frequentemente utilizados na produção de *sites*, publicações e apresentações na área de Bioquímica. Entretanto, a maioria dos programas computacionais utilizados tradicionalmente para produção deste material requer conhecimentos básicos de programação e elaboração de *scripts* de comandos. **Objetivo:** apresentar uma análise do programa computacional QuteMol[®] como ferramenta didática na produção de ilustrações digitais e de *gifs* animados de biomoléculas. **Material e métodos:** Foram realizados testes com todos os comandos disponíveis em todos os menus do *software*, sendo que, para avaliar a função dos comandos, foi utilizado como modelo o arquivo PDB 2HHB, referente à desoxiemoglobina humana. **Resultados:** As análises dos menus do programa mostraram que ilustrações digitais e animações podem ser geradas no QuteMol[®] utilizando principalmente comandos disponíveis no Menu *Presets*, que apresenta padrões pré-definidos de exibição das biomoléculas; no Menu *Geometry* apresenta comandos que podem alterar a forma de exibição e os padrões de cores da molécula; e no Menu *Customize* que apresenta o maior número de comandos de personalização da molécula (como saturação, iluminação, fundo, profundidade, halos de luz e bordas). **Conclusões:** O QuteMol[®] apresentou uma relativa escassez de recursos relacionados a análises bioquímicas estruturais, quando comparado com outros programas tradicionalmente utilizados, o que reduz a sua aplicação em pesquisas. Entretanto, seus menus intuitivos com botões de controle dos comandos de exibição da molécula tornam o *software* um excelente recurso didático na produção de ilustrações digitais e animações principalmente para usuários iniciantes na área de Bioinformática.

Palavras-chave: Bioinformática. Imagem molecular. Animação. QuteMol.

ABSTRACT

Introduction: Digital illustrations and animated gifs of biomolecules are often used in the production of websites, publications and presentations in the field of Biochemistry. However, most computer programs traditionally used to produce this material require basic knowledge of programming and command scripting. **Objective:** to present an analysis of the QuteMol[®] computer program as a didactic tool in the production of digital illustrations and animated gifs of biomolecules. **Material and methods:** Tests were carried out with all the commands available in all the software menus, and, to evaluate the function of the commands, the PDB 2HHB file, referring to human deoxyhemoglobin, was used as a model. **Results:** The analysis of the program's menus showed that digital illustrations and animations can be generated in QuteMol[®] using mainly commands available in the Presets Menu, which presents pre-defined patterns of display of biomolecules; in the Geometry Menu it presents commands that can change the way of display and the patterns of colors of the molecule; and in the Customize Menu, which presents the largest number of customization commands for the molecule (such as saturation, lighting, background, depth, light halos and edges). **Conclusions:** QuteMol[®] presented a relative scarcity of resources related to structural biochemical analysis, when compared to other traditionally used programs, which reduces its application in research. However, its intuitive menus with control buttons for displaying the molecule's commands make the soft-ware an excellent didactic resource in the production of digital illustrations and animations, mainly for beginner users in the field of Bioinformatics.

Keywords: Bioinformatics. Molecular image. Animation. QuteMol.

1 INTRODUÇÃO

A visualização da estrutura de uma proteína pode ser considerada importante, pois frequentemente está relacionada com a função desempenhada por ela, como observado em proteínas que apresentam estruturas homólogas e desempenham a mesma função (ORENGO, TODD, THORNTON, 1999). Uma aplicação para o estudo da estrutura bioquímica tridimensional de biomoléculas é a modelagem molecular, especialmente no *design* e edição de proteínas. Programas computacionais como o Foldit[®] permitem que proteínas sejam projetadas ou tenham sua estrutura desvendada a partir da análise da conformação das cadeias principal e laterais de polipeptídeos (HASSUNUMA, YONEZAWA, 2022).

O estudo da estrutura bioquímica de proteínas também é importante em pesquisas de docagem molecular, também conhecida como ancoragem molecular, que consiste na utilização de programas computacionais para prever a interação de um ou mais ligantes a uma proteína de estrutura tridimensional conhecida (MORRIS; LIM-WILBY, 2008).

Nos estudos de docagem molecular, é observado que as interações do ligantes com proteínas geralmente ocorrem em bolsos ou cavidades presentes na superfície de proteínas. Isto se deve ao fato de o ligante conseguir obter uma alta afinidade apenas quando localizado em uma região da proteína em que existe uma superfície suficientemente grande para interação (SOTRIFFER, KLEBE, 2002).

A visualização tridimensional de biomoléculas também é amplamente observada em *sites* e banco de dados públicos como o *RCBS Protein Data Bank* (BURKLEY *et al.*, 2021). Para produção destas ilustrações digitais e animações de biomoléculas, existem vários programas computacionais tradicionalmente utilizados como o RasMol[®] (BERNSTEIN, 2009), Jmol[®] (HERRÁEZ, 2006), Chimera[®] (PETTERSEN *et al.*, 2004), PyMOL (RIGSBY, PARKER, 2016), entre outros.

Entretanto, a maioria dos programas computacionais utilizados tradicionalmente na simulação computacional de biomoléculas apresenta uma certa complexidade para produção e personalização das

imagens tridimensionais. Um software com uma interface muito mais intuitiva e de fácil utilização, especialmente para novos usuários, é o QuteMol[®] desenvolvido pelos programadores Marco Tarini e Paolo Cignoni em 2007.

No QuteMol[®], a imagem de uma ou mais moléculas é produzida a partir de arquivos do tipo PDB, que podem ser baixados gratuitamente no *site RCBS Protein Data Bank* (BURKLEY *et al.*, 2021). O programa apresenta uma série de padrões de exibição pré-determinados que podem ser escolhidos pelo usuário de acordo com a preferência.

As moléculas observadas no QuteMol[®] são visualizadas em um ambiente fechado, onde é possível controlar a forma de representação e o tipo de superfície da molécula, a iluminação direta e ambiente, as sombras, contornos, halos, profundidade da molécula, cor do fundo, entre outros. As técnicas de visualização do QuteMol[®] visam melhorar a clareza e uma compreensão mais fácil do formato tridimensional de moléculas (TARINI; CIGNONI; MONTANI, 2006).

O QuteMol[®] pode ser utilizado como recurso didático na produção de imagens estáticas e do tipo gif animado que podem ser utilizados na produção de apresentações e de publicações. Entretanto, não existem livros ou artigos disponíveis em português até a presente data, o que pode dificultar sua utilização por usuários que não dominem o idioma inglês ou que possuam pouca experiência na utilização de programas computacionais deste tipo.

Assim, o objetivo principal da presente pesquisa foi analisar os menus e comandos do *software* QuteMol[®], com o propósito de apresentar o programa como recurso didático na produção de ilustrações digitais e animações do tipo GIF e introduzindo o assunto para usuários iniciantes.

2 MATERIAL E MÉTODOS

O presente estudo refere-se a uma pesquisa narrativa de natureza aplicada, de abordagem qualitativa, cujo objetivo é exploratório, que visa propor a utilização do *software* QuteMol[®] como ferramenta didática na produção de gifs animados que podem ser usados na análise bioquímica estrutural, bem como em apresentações e vídeos. Esta pesquisa foi realizada entre janeiro e fevereiro de 2023.

Para explicar a utilização do programa computacional de uma forma mais prática, foi utilizado como modelo o arquivo PDB 2HHB, que se refere à molécula de desoxiemoglobina humana (FERMI; PERUTZ, 2011). Este arquivo será utilizado como modelo para análise dos comandos disponíveis nos quatro menus no programa: *Presets* (predefinições, na tradução livre), *Geometry* (Geometria), *Customize* (Personalizar) e *Info* (Informações).

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

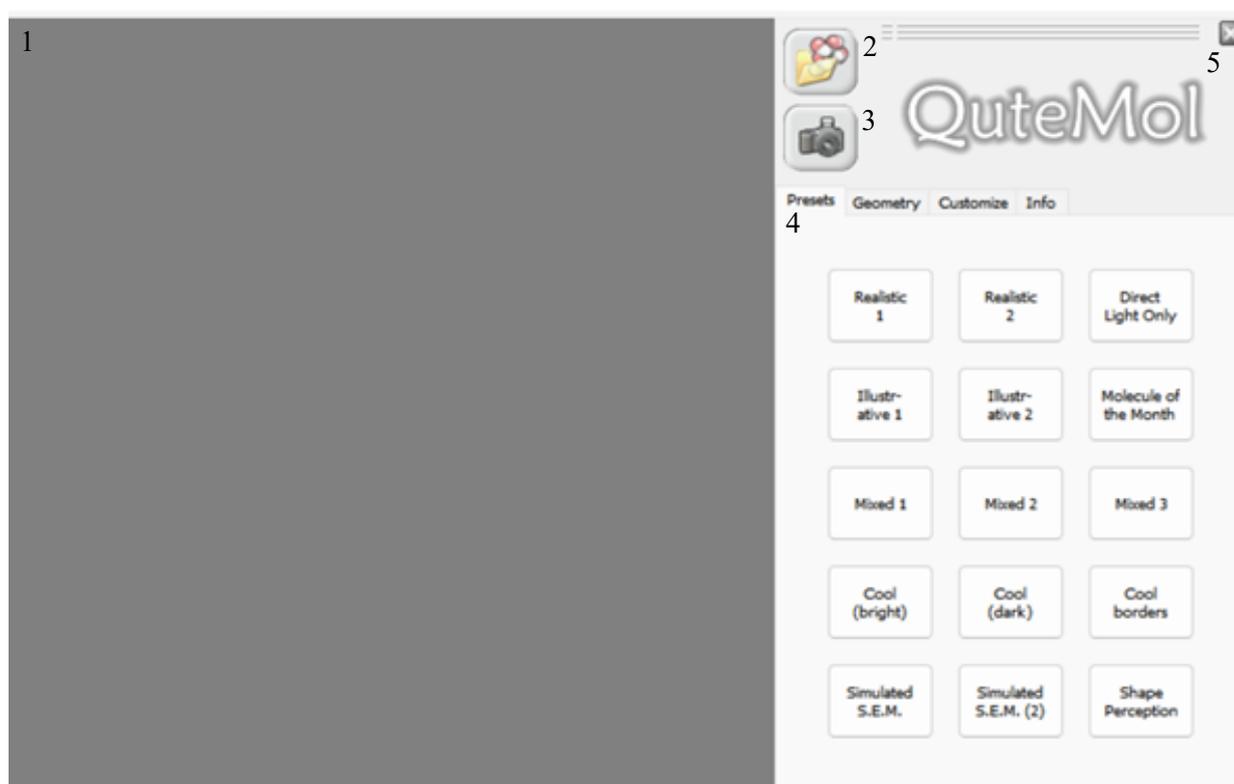
O programa computacional QuteMol[®] (TARINI; CIGNONI, 2007; TARINI; CIGNONI; MONTANI, 2006) pode ser utilizado para produzir animações do tipo GIF a partir de arquivos PDB, os quais podem ser obtidos gratuitamente no *site Protein Data Bank* (Disponível em: <www.rcsb.org>). A seguir será apresentado uma sequência de instruções que explicarão como gerar uma animação do tipo GIF a partir de um arquivo PDB.

O arquivo a ser utilizado como modelo é o 2HHB.pdb (FERMI, PERUTZ, 2011), que apresenta a estrutura cristalina da desoxiemoglobina humana com resolução de 1,74Å, sendo o mesmo arquivo utilizado para apresentar os diferentes comandos dos quatro menus no programa: *Presets*, *Geometry*, *Customize* e *Info*.

O programa computacional QuteMol[®] pode ser baixado gratuitamente no *link*: <<https://qutemol.sourceforge.net/>>. A versão atual do *software* corresponde à 0.4.1 (disponibilizada em 06 de junho de 2007) e está disponível para os sistemas operacionais Windows e Mac OSX. Após realizar o *download* do programa, o usuário deve executar o programa baixado e seguir as orientações de instalação. Após o programa ser instalado será disponibilizado um ícone na área de trabalho, por meio do qual, é possível abrir o programa.

Ao clicar no ícone do programa, será aberta a janela apresentada na Figura 1, onde é possível observar a área de trabalho (1), o botão para selecionar e abrir o arquivo PDB (2), o botão para salvar imagens e gifs (3), os menus do programa (4) e o botão fechar (5) que encerra o programa.

Figura 1: QuteMol[®].

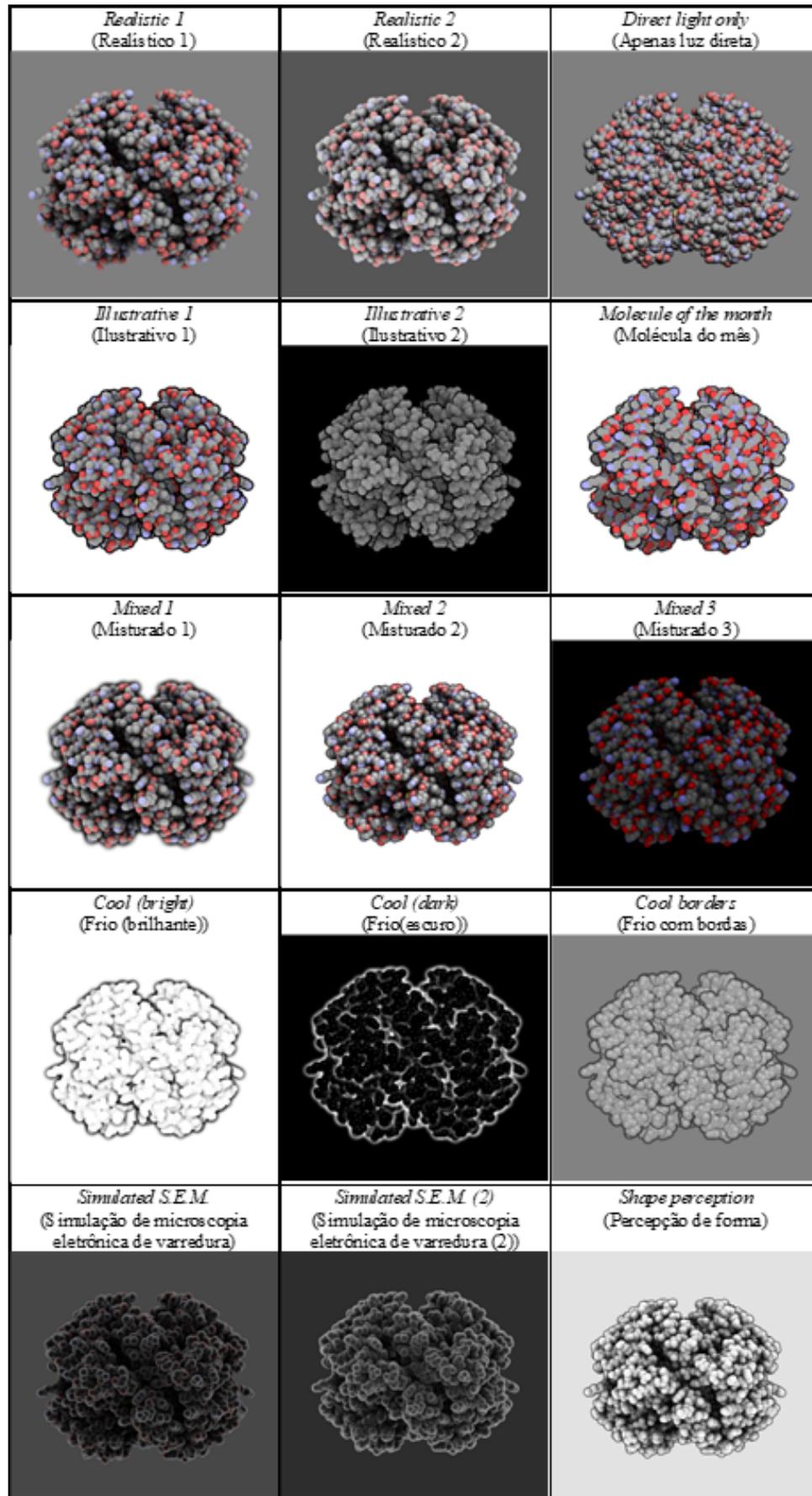


Fonte: QuteMol[®], 2023.

Para exibir uma molécula na área de trabalho (indicado pelo número 1 na Figura 1) do QuteMol[®], o usuário deve clicar no botão de seleção de arquivo (2) e selecionar o arquivo PDB baixado previamente. Após selecionar e abrir o arquivo, será exibida a molécula na área de trabalho utilizando o último padrão de exibição do Menu Presets (4) escolhido pelo usuário.

3.1 Menu *Presets* (Predefinições)

O primeiro Menu do QuteMol[®], intitulado *Presets* (Predefinições), apresenta 15 padrões pré-definidos de exibição da biomolécula. As imagens geradas por cada um dos padrões estão apresentadas no Quadro 1.

Quadro 1 – Imagens geradas no Menu *Presets*.

Fonte: Autores, 2023.

A partir da análise do Quadro 1, é possível observar que os padrões de exibição pré-definidos, obviamente demonstram a mesma estrutura bioquímica, porém a escolha depende de fatores a serem definidos pelo usuário como:

- Padrões que produzem imagens em fundo branco: *Illustrative 1* (Ilustrativo 1), *Molecule of the month* (Molécula do mês), *Mixed 1* (Misturado 1), *Mixed 2* (Misturado 2), *Cool (bright)* (Frio (brilhante)) e *Shape perception* (Percepção de forma);
- Padrões que produzem imagens em fundo com diferentes tons de cinza: *Realistic 1* (Realístico 1), *Realistic 2* (Realístico 2), *Direct light Only* (Apenas luz direta), *Cool borders* (Frio com bordas), *Simulated S.E.M.* (Simulação de microscopia eletrônica de varredura), *Simulated S.E.M. (2)* (Simulação de microscopia eletrônica de varredura (2));
- Padrões que produzem imagens em fundo preto: *Illustrative 2* (Ilustrativo 2), *Mixed 3* (Misturado 3), *Cool (dark)* (Frio(escuro));
- Padrões que produzem imagens com átomos representados no modo de cor CPK (Corey, Pauling e Koltun): *Realistic 1* (Realístico 1), *Realistic 2* (Realístico 2), *Direct light Only* (Apenas luz direta), *Illustrative 1* (Ilustrativo 1), *Molecule of the month* (Molécula do mês), *Mixed 1* (Misturado 1), *Mixed 2* (Misturado 2), *Mixed 3* (Misturado 3);
- Padrões que produzem imagens com átomos representados no modo de cor monocromático (branco, cinza ou preto): *Illustrative 2* (Ilustrativo 2), *Cool (bright)* (Frio (brilhante)), *Cool (dark)* (Frio(escuro)), *Cool borders* (Frio com bordas), *Simulated S.E.M.* (Simulação de microscopia eletrônica de varredura), *Simulated S.E.M. (2)* (Simulação de microscopia eletrônica de varredura (2)), *Shape perception* (Percepção de forma).

Note que alguns padrões de exibição, tornam difícil a visualização das cavidades presentes na superfície da desoxiemoglobina como: *Direct light Only* (Apenas luz direta), *Simulated S.E.M.* (Simulação de microscopia eletrônica de varredura), *Simulated S.E.M. (2)* (Simulação de microscopia eletrônica de varredura (2)), *Shape perception* (Percepção de forma). Nestes padrões de exibição, percebe-se uma perda relativa do aspecto tridimensional da biomolécula. A visualização das cavidades presentes na superfície das proteínas pode ser importante em análises bioquímicas que envolva a docagem molecular, onde pode ser estudada as áreas de interações de ligantes com a proteína exibida, que geralmente ocorrem nestas cavidades (MENG *et al.*, 2011).

Vale mencionar também que o padrão *Molecule of the month* (Molécula do mês, na tradução livre), faz referência aos tipos de imagens apresentadas no *site* de mesmo nome, conduzido por David S. Goodsell e disponível no *link*: <https://pdb101.rcsb.org/> (Goodsell, 2023).

3.2 Menu *Geometry* (Geometria)

O segundo menu corresponde ao *Geometry* (Geometria), onde é possível escolher os padrões de exibição da molécula:

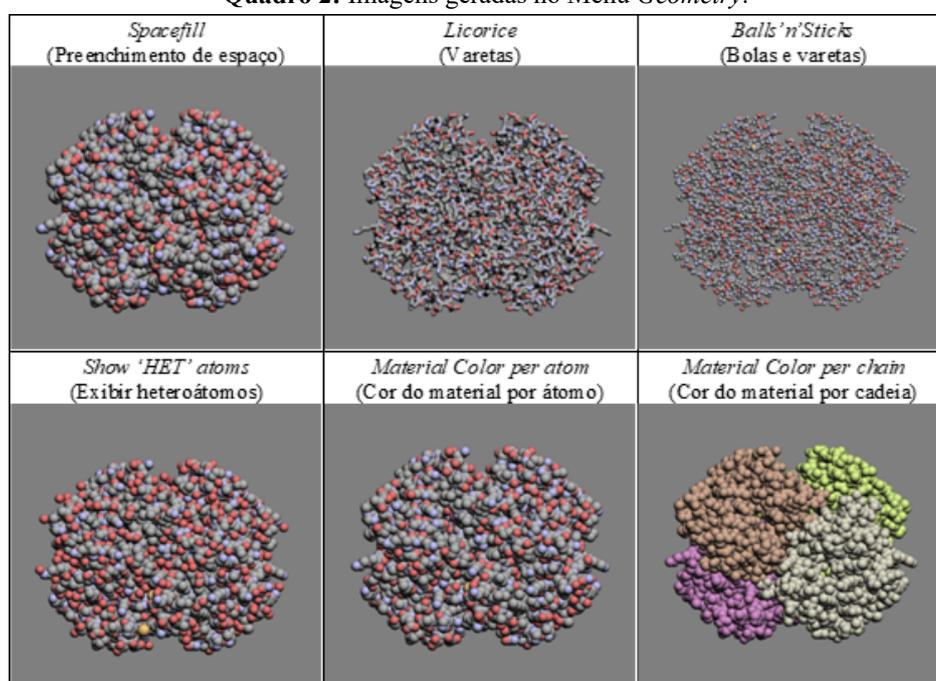
- *Spacefill* (preenchimento de espaço, na tradução livre): que representa os átomos na forma de esferas;
- *Licorice* (alçaçuz): na qual os átomos são representados na forma de varetas;
- *Balls 'n' Sticks* (bolas e varetas): neste padrão, os átomos são representados na forma de esferas e as ligações químicas na forma de varetas.

Neste menu ainda é possível exibir os heteroátomos (*Show 'HET' atoms*), que correspondem a cofatores, coenzimas, grupos prostéticos, íons metálicos, açúcares, drogas, peptídeos, derivados de átomos pesados, resíduos/nucleotídeos de aminoácidos não padronizados, moléculas de água entre outros átomos que não fazem parte da constituição da proteína principal representada. Nos arquivos PDB, os heteroátomos são indicados pela entrada HETATM (GURUPRASAD; SAVITHA; BABU, 2005).

Nesse menu, ainda existem os Comandos do *Material Color* (cor do material, na tradução livre), que pode representar os átomos ou as cadeias por diferentes cores. O botão *Diff* aumenta ou reduz a diferenciação entre as cores dos átomos ou cadeias e o botão *Change Colour Schema* alteram o padrão de cores escolhido (apenas no modo *Material Color Per Chain*).

As imagens geradas utilizando o Menu *Geometry* utilizando o arquivo PDB 2HHB estão apresentadas no Quadro 2.

Quadro 2: Imagens geradas no Menu *Geometry*.



Fonte: Autores, 2023.

Além do observado no Quadro 2, é possível realizar outras personalizações como:

- No padrão *Licorice*, o usuário também pode determinar a espessura da vareta (mais ou menos espessa);
- No padrão *Balls'n'Sticks*, é possível modificar a espessura da vareta, bem como sua cor, que pode ser:
 - *Split* (dividida, na tradução livre): onde cada uma metade da ligação é apresentada com a cor do átomo ao qual está ligado e a outra metade com a cor do outro átomo da ligação;
 - *Blended* (misturada): as ligações aparecem de uma cor originada da mistura das cores dos dois átomos envolvidos na ligação;
 - *Constant* (constante): no qual a cor é única, escolhida e determinada pelo usuário;
- No submenu *Material Color per chain* (Cor do material por cadeia), é possível aumentar ou diminuir o contraste entre os tons das cadeias (*Diff*) e alterar o esquema de cores (*Change color schema*) das cadeias que são representadas em diferentes cores em uma quantidade de combinações de cores pré-determinadas pelo programa que depende do número de cadeias da molécula (quanto maior o número de cadeias, maior será o número de combinações de cores).

Vale a pena mencionar que o padrão escolhido no Menu *Presets* é alterado pelas escolhas determinadas no Menu *Geometry* e vice-versa.

3.3 Menu *Customize* (Customizar)

O *Customize* (Customizar, na tradução livre) corresponde ao menu que permite a maior quantidade de personalizações da molécula exibida. Os parâmetros que podem ser ajustados neste menu estão apresentados no Quadro 3.

Quadro 3: Submenus e comandos apresentados no Menu *Customize*.

Submenu	Comando	Função do comando
<i>Base colors</i> (Cores básicas)	<i>Saturation</i> (Saturação)	Aumenta e reduz a saturação das cores da molécula.
<i>Point light</i> (Luz pontual)	<i>Intensity*</i> (Intensidade*)	Aumenta e reduz a quantidade de luz que incide diretamente sobre a molécula.
	<i>Flatten</i> (Achatamento)	Aumenta e reduz as propriedades tridimensionais da molécula, sendo que o aumento total do comando produz uma ilustração caracteristicamente bidimensional.
	<i>Shininess</i> (Brilho)	Aumenta e reduz o aspecto de lisura da molécula, sendo que a redução cria uma superfície nos átomos mais opaca e o aumento leva à formação de uma superfície de aparência mais lisa e brilhante.
	<i>Glossiness</i> (Luminosidade)	Aumenta e reduz a intensidade da luz que causa o brilho da molécula, sendo que seu ajuste corrige o ponto de brilho na superfície da molécula.
	<i>Shadows</i> (Sombras)	Aumenta e reduz a quantidade de sombras existentes na molécula.
	<i>2way light</i> (Luz de duas vias)	Em alguns modos de representação reduz e aumenta uma luz de 2 vias.
	<i>Fake SEM</i> (Microscopia eletrônica de varredura falsa)	Cria uma imagem simulando o aspecto da molécula observada sob microscopia eletrônica de varredura.
<i>Ambient light</i> (Luz ambiente)	<i>Intensity*</i> (Intensidade*)	Aumenta e reduz a quantidade de luz que incide indiretamente sobre a molécula.
<i>Background</i> (Fundo)	<i>Brightness</i> (Brilho)	Aumenta e reduz o brilho de fundo.
	<i>Color</i> (Cor)	Permite que o usuário escolha as cores de fundo com opções de cores básicas e personalizadas (variando valores de matiz, saturação, luminosidade, vermelho, verde e azul).
<i>Depth cueing</i> (Sugestão de profundidade)	<i>Strenght</i> (Força)	Sobrepõe a cor de fundo sobre a imagem de forma a dar a impressão que a molécula está em uma posição mais anterior ou posterior.
<i>Halos</i> (Auréolas)	<i>Size</i> (Tamanho)	Aumenta e reduz o tamanho do halo ao redor da molécula e dos átomos
	<i>Strenght</i> (Força)	Aumenta e reduz o gradiente do halo ao redor da molécula e dos átomos
	<i>Variance</i> (Variação)	Aumenta e reduz a variação no tamanho dos halos ao redor dos átomos
	<i>Color</i> (Cor)	Permite que o usuário escolha a cor do halo, que pode ser apenas branca ou preta.
<i>Borders</i> (Bordas)	<i>Size</i> (Tamanho)	Aumenta e reduz o tamanho do contorno ao redor da molécula e dos átomos
	<i>Variance</i> (Variação)	Aumenta e reduz a variação no tamanho do contorno ao redor dos átomos
<i>*Autobalance</i> (Equilíbrio automático)		Regula as intensidades de <i>Point light</i> (Luz pontual) e <i>Ambient light</i> (Luz ambiente) de forma que os valores estabelecidos sejam inversamente proporcionais.

Fonte: Autores, 2022.

Comparando os comandos *Halos* (Auréolas) e *Borders* (Bordas), embora existam algumas semelhanças em suas funções, foram notadas algumas diferenças. Observa-se que enquanto no primeiro comando é criado um degradê ao redor da molécula e dos átomos com duas opções de cores (branca e preta), no segundo comando, é desenhado um contorno nítido ao redor dos átomos e molécula, disponível apenas na cor preta. O comando *Borders* é bastante útil quando se deseja desenvolver imagens semelhantes às observadas no site *Molecule of the month* (GOODSELL, 2023).

3.4 Menu *Info* (Informações)

O Menu *Info* (Informações, na tradução livre) apresenta informações gerais sobre o *software*:

- Desenvolvedores: Marco Tarini e Paolo Cignoni;
- Link do programa computacional: <https://qutemol.sourceforge.net/>;
- Instruções para uso do *mouse*:
 - *Left mouse button* (botão esquerdo do *mouse*): *rotate molecule* (rotação da molécula);
 - *Mouse wheel* (roda do *mouse*) ou *Shift+Left* (*Shift*+botão esquerdo do *mouse*): *zoom molecule* (zoom na molécula);
 - *Middle mouse* (botão central do *mouse*) ou *Ctrl+Left mouse*: *pan molecule* (reposicionamento da molécula);
 - *Right mouse button* (botão direito do *mouse*): *move light* (mover a luz);
- Laboratórios: *Virtual Computing Laboratory, Istituto di Scienza e Tecnologie dell'informazione, Consiglio Nazionale delle Ricerche*;
- Versão: ver 0.4.1 (jun 5 2007).

Alguns controles do *mouse* como os movimentos de rotação e translação da molécula, bem como o controle do zoom, são comumente observados em outros programas computacionais. Entretanto, vale ressaltar a facilidade com que o usuário pode determinar a posição da luz que incide sobre a molécula, bastando apenas usar o controle do *mouse* mencionado anteriormente. Este tipo de regulação de imagem não é possível em alguns outros programas de simulação computacional de biomoléculas, como o RasMol (BERNSTEIN, 2009; HASSUNUMA, 2017).

3.5 Salvando imagens e gifs animados

O salvamento de figuras e gifs animados é executado clicando no botão com a representação de uma máquina fotográfica que fica ao lado esquerdo do logo do QuteMol®. Ao clicar neste botão, o usuário pode escolher salvar o arquivo nos seguintes formatos:

- PNG (lossless): salva a imagem no formato PNG, sem perda de qualidade de imagem, sendo possível escolher:
 - a função *resolution*: que determina a resolução da imagem de 32 a 8192 pixels;
 - a função *anti-alias*: que suaviza os contornos da imagem;
 - a função *transparent PNG*: que cria uma imagem da biomolécula com um fundo transparente;

- JPEG (lossy): salva a imagem no formato JPEG, com perda de qualidade, mas com arquivo de menor tamanho, sendo possível escolher:
 - a função *resolution*: que determina a resolução da imagem de 32 a 8192 pixels;
 - a função *anti-alias*: que suaviza os contornos da imagem;
- GIF animation: salva uma animação do tipo GIF, sendo possível escolher:
 - a função *Resolution* (Resolução): que determina a resolução da imagem de 32 a 8192 pixels;
 - a função *Anti-alias* (Antisserrilhamento): que suaviza os contornos da imagem;
 - a função *Initial pause (ms)* (Pausa inicial em milissegundos): que permite criar uma pausa de 0 a 10000 milissegundos, antes do início da animação;
 - os modos de rotação:
 - *Full rotation mode* (Modo de rotação completa): onde a molécula realiza um giro completo de 360 graus, sendo possível estabelecer:
 - *Rotation time (ms)* (Tempo de rotação em milissegundos): de 500 a 10000 ms;
 - *Frames* (Quadros): de 10 a 1000 quadros;
 - *View angle (deg)* (ângulo de visão em graus): que determina o ângulo de inclinação da rotação da molécula, que pode variar de -5 a 45 graus;
 - *Inspection mode* (Modo de inspeção): onde a molécula realiza um breve movimento circular no sentido antihorário, sendo possível estabelecer:
 - *Rotation time (ms)* (Tempo de rotação em milissegundos): de 500 a 10000 ms;
 - *Frames* (Quadros): de 10 a 1000 quadros;
 - *Angle (deg)* (Ângulo em graus): que determina a amplitude do movimento circular da molécula, que pode variar de 5 a 35 graus;
 - *Six-sides mode* (Modo de seis lados): onde a molécula realiza movimentos giratórios nos eixos x, y e z, sendo possível estabelecer:
 - *Time x side (ms)* (Tempo x lado em milissegundos): de 200 a 2000 ms;
 - *Frames x side* (Quadros x lado): de 10 a 200 quadros;
 - *Pause x side (ms)* (Pausa x lado em milissegundos): de 500 a 10000 ms.

Após a análise de todos os comandos do programa QuteMol[®], foram observadas várias vantagens e desvantagens em sua utilização, que estão sumarizadas no Quadro 2.

Quadro 4: Lista de vantagens e desvantagens para se utilizar o QuteMol® em sala de aula.

Vantagens	Desvantagens
O QuteMol® apresenta vários padrões de exibição prontos que podem ser escolhidos rapidamente, sem a necessidade de programação de cada item de personalização.	No QuteMol® não é possível distinguir e selecionar ligantes para escolha dos modos de exibição dos mesmos.
No Menu <i>Customize</i> existem vários itens personalizáveis para exibição da molécula.	O programa está disponível apenas no idioma inglês.
A utilização do programa é bastante intuitiva, dispendo de botões facilmente controlados que dispensa o desenvolvimento de <i>scripts</i> de comandos.	O <i>software</i> é bastante direcionado para a produção de imagens e gifs animados, possuindo recursos limitados para outras análises bioquímicas (como determinação de distância e ângulo entre átomos).
Tanto a produção de imagem quanto de gifs animados são facilmente acessíveis a usuários inexperientes.	Quando a molécula apresenta muitos heteroátomos é difícil diferenciá-los da molécula principal e também de localizá-los, uma vez que não é possível exibi-los de um modo diferente que o da molécula principal.
O programa é gratuito, disponível para ser baixado na <i>internet</i> e não requer computadores de configuração elevada.	O programa não dispõe do modo de exibição <i>Cartoons</i> que permite analisar a estrutura secundária das proteínas (principalmente áreas de alfa-hélices e fitas beta).

Fonte: Autores, 2022.

4 CONCLUSÃO

A partir da análise do programa computacional QuteMol® foi possível observar que o mesmo pode ser utilizado como recurso didático na produção de imagens e gifs animados de biomoléculas que podem ser facilmente desenvolvidas inclusive por usuários menos experientes na área de Bioinformática, uma vez que sua utilização é bastante intuitiva e baseia-se no acesso de menus com botões.

Embora tenha sido observada uma certa limitação nos recursos disponíveis, é justamente por esse motivo que o programa pode ser considerado um recurso didático de fácil utilização. Vale ressaltar que o QuteMol® pode ser utilizado amplamente na produção de ilustrações digitais para publicações e apresentações, mas que apresenta um uso limitado em pesquisa para análises bioquímicas estruturais, devido à relativa escassez de comandos, se comparado com outros programas de Bioinformática tradicionalmente utilizados.

CONFLITO DE INTERESSE

Não há conflito de interesse na presente pesquisa.

REFERÊNCIAS

BERNSTEIN, H. J. Home page for RasMol and OpenRasMol [Internet]. Disponível em: <<http://www.openrasmol.org/>>, 2009 Jul. 24. Acesso em: 13 fev. 2023.

BURLEY, S. K. et al. RCSB Protein Data Bank: powerful new tools for exploring 3D structures of biological macromolecules for basic and applied research and education in fundamental biology, biomedicine, biotechnology, bioengineering and energy sciences. **Nucleic Acids Res.** [Internet], v. 49, n. D1, p. D437-D451, 2021 Jan 8. Disponível em: <<https://academic.oup.com/nar/article/49/D1/D437/5992282>>.

Acesso em: 14 fev. 2023.

FERMI, G.; PERUTZ, M. F. The crystal structure of human deoxyhaemoglobin at 1.74 angstroms resolution [Internet]. Disponível em: <<https://www.rcsb.org/structure/2hhb>>, 2011 Jul. 13. Acesso em: 05 fev. 2023.

GOODSELL, D. Molecule of the month [Internet]. Disponível em: <<https://pdb101.rcsb.org/>>, 2023. Acesso em: 11 fev. 2023.

GURUPRASAD, K.; SAVITHA, S.; BABU, A. V. Computational tools for the analysis of heteroatom groups and their neighbours in protein tertiary structure. **Int. J. Biol. Macromol.** [Internet], v. 37, n. 1-2, p. 35-41, 2005 Oct 30. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0141813005001595>>. Acesso: 11 fev 2023.

HASSUNUMA, R. M. **Guia de comandos em software de simulação computacional de biomoléculas.** Bauru: Canal 6, 2017.

HASSUNUMA, R. M.; YONEZAWA, W. M. Aplicação didática do jogo Foldit no ensino de *design* e edição de proteínas. **Revista Multidisciplinar de Educação e Meio Ambiente**, [S. l.], p. 1–12, 2022. Disponível em: <https://editoraime.com.br/revistas/index.php/rema/article/view/3447>. Acesso em: 14 fev. 2023.

HERRÁEZ, A. Biomolecules in the computer: Jmol to the rescue. **Biochem. Mol. Biol. Educ.** [Internet], v. 34, n. 4, p. 255-61, 2006 Jul. Disponível em: <<https://iubmb.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/bmb.2006.494034042644>>. Acesso em 14 fev 2023.

MENG, X. Y. *et al.* Molecular docking: a powerful approach for structure-based drug discovery. **Curr. Comput. Aided. Drug Des.** [Internet], v. 7, n. 2, p. 146-57, 2011 Jun. Disponível em: <<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC3151162/>>. Acesso em: 06 fev. 2023.

MORRIS, G. M.; LIM-WILBY, M. Molecular docking. **Methods Mol. Biol.** [Internet], v. 443, p. 365-82, 2008. Disponível em <https://link.springer.com/protocol/10.1007/978-1-59745-177-2_19>. Acesso em: 14 fev. 2023

ORENGO, C. A.; TODD, A. E.; THORNTON, J. M. From protein structure to function. **Curr. Opin. Struct. Biol.** [Internet], v. 9, n. 3, p. 374-82, 1999 Jun. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0959440X99800517>>. Acesso em: 13 fev. 2023.

PETTERSEN, E. F. *et al.* UCSF Chimera – a visualization system for exploratory research and analysis. **J. Comput. Chem.** [Internet], v. 25, n. 13, p. 1605-12, 2004 Oct. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jcc.20084>>. Acesso em: 14 fev. 2023.

RIGSBY, R. E.; PARKER, A. B. Using the PyMOL application to reinforce visual understanding of protein structure. **Biochem. Mol. Biol. Educ.** [Internet], v. 44, n. 5, p. 433-7, 2016 Sep 10. Disponível em: <<https://iubmb.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/bmb.20966>>. Acesso em: 17 fev 2023.

SOTRIFFER, C.; KLEBE, G. Identification and mapping of small-molecule binding sites in proteins: computational tools for structure-based drug design. **Farmaco** [Internet], v. 57, n. 3, p. 243-51, 2002 Mar. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0014827X02012119>>. Acesso em: 14 fev. 2023.

TARINI, M.; CIGNONI, P. QuteMol [Internet]. Disponível em: <<https://qutemol.sourceforge.net/>>, 2007. Acesso em: 05 fev. 2023.

TARINI, M.; CIGNONI, P.; MONTANI, C. Ambient occlusion and edge cueing for enhancing real time molecular visualization. **IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics** [Internet], v. 12, n. 5, p. 1237-44, 2006. Disponível em: <<https://ieeexplore.ieee.org/document/4015487>>. Acesso em: 06 fev. 2023.