

Manual do utilizador

Navmol 2.1

por Rui Fartaria, Florbela Pereira, Daniela Peixoto, Yuri Binev, Ana M. Lobo, João Aires de Sousa

Maio 2016

Índice

1	Descrição básica e Introdução.....	2
2	Requisitos de Software.....	2
3	Modo de navegação de uma molécula.....	2
3.1	Navegação básica.....	2
3.2	Informação do átomo.....	4
3.3	Marcadores.....	4
3.4	Saltar para um átomo.....	5
3.5	Histórico da navegação.....	5
3.6	Navegação por ordem numérica.....	5
3.7	Informação da molécula.....	5
3.8	Abrir um ficheiro com uma nova molécula.....	6
4	Modo de edição de uma única molécula.....	6
4.1	Adicionar um átomo.....	6
4.2	Adicionar uma ligação.....	6
4.3	Remover um átomo.....	7
4.4	Remover uma ligação.....	7
4.5	Eliminar objetos fictícios ou representações.....	7
4.6	Substituir um átomo.....	7
4.7	Mudança da carga de um átomo.....	7
4.8	Alterar a ordem de ligação.....	7
4.9	Guardar um ficheiro com uma nova molécula	8
5	Resumo das instruções de teclado.....	8
6	Seleção do idioma.....	9

1 Descrição básica e Introdução

O Navmol é um software desenvolvido para permitir a navegação e a edição de estruturas moleculares por utilizadores com deficiência visual. Este documento apresenta um conjunto breve de instruções para utilização deste software, bem como uma descrição das principais funcionalidades implementadas na presente versão.

A janela principal do Navmol é composta por uma grande área de visualização e uma pequena área de texto colocada abaixo da primeira. Na área de visualização é mostrado um esboço das moléculas carregadas pelo Navmol com dois objetivos. O primeiro é fazer uma representação da estrutura das moléculas, na forma de desenho, disponível para as pessoas com baixa visão, e o segundo é aumentar a interação entre as pessoas com visão normal e cegos quando se utiliza o software em conjunto, por exemplo, em contexto de sala de aula.

Usando o teclado, o utilizador pode navegar nos átomos da molécula e obter informações adicionais sobre ela; criar marcadores; navegar na história; listar grupos funcionais; adicionar ou remover átomos e ligações; mudar a carga de um átomo; mudar a ordem da ligação; visualizar uma reação química e efetuar nela uma variedade de operações.

2 Requisitos de Software

O Navmol versão 2.1, que ocupa 27,5 MB, é uma aplicação Java e requer a instalação do Java Runtime Environment (Java RE). A versão atual do Navmol funciona com a versão 6 do Java RE ou uma versão mais recente. O download pode ser feito em <http://www.java.com/getjava/>.

A versão atual do Navmol incorpora o sistema de som FreeTTS (<http://freetts.sourceforge.net/>) em inglês. Em alternativa o eSpeak (<http://espeak.sourceforge.net/>) pode ser usado, em inglês e português, se estiver instalado no sistema.

3 Modo de navegação de uma molécula

Aqui apresentamos as principais características de navegação do Navmol. Os itens nesta secção foram pensados de forma a permitir ao utilizador começar a ler as funcionalidades mais utilizadas para a navegação e edição de estruturas moleculares.

3.1 Navegação básica

No início o utilizador será localizado automaticamente num átomo da molécula pelo Navmol. Esse átomo será indicado por uma ou duas letras, o seu nome químico, seguida do número um.

Para navegar na molécula o utilizador tem que pressionar as teclas de setas, **UP** (para **cima**), **DOWN** (para **baixo**), **LEFT** (para **esquerda**) e **RIGHT** (para **direita**). As direções apontadas por essas setas

estão relacionadas com o sentido real no qual os átomos vizinhos se encontram representados. Por exemplo, se o presente átomo se encontra ligado a outro átomo que, no desenho, está acima do átomo onde se encontra o utilizador, se pressionar a seta **UP** irá mover o "cursor" para esse átomo. Além disso, o Navmol utiliza o **sistema de coordenadas do relógio** para comunicar com mais precisão a direção dos átomos vizinhos ligados ao presente átomo. O presente átomo, onde o cursor está posicionado, está localizado no centro do relógio e as ligações funcionam como se fossem os ponteiros do relógio. Quando o cursor é movido para um outro átomo, esse torna-se o átomo central do relógio. Vamos supor que temos a molécula, Cl_2 , e que, no desenho, esta molécula é representada por um traço horizontal entre as letras Cl que indicam de que átomo se trata e como estão ligados. Neste caso os átomos são dois cloros, representados pelo símbolo químico do cloro, Cl. Vamos admitir que o programa começa com o cursor sobre o átomo situado no lado esquerdo. Esse átomo terá apenas um vizinho, do lado direito, às 3 horas do presente átomo. Se o utilizador pressionar na tecla da seta **RIGHT** o cursor será movido para o átomo à direita. Agora, só existe um átomo vizinho para este, posicionado às 9 horas, que é o sentido oposto ao das 3 horas.

Quando um movimento é feito, o Navmol dará a seguinte informação ao utilizador:

1. O átomo para onde o cursor se moveu.
2. As coordenadas do relógio para a direção do movimento.
3. O tipo de ligação através do qual o movimento foi realizado.
4. Se esta é a primeira vez que o átomo é visitado.

Por exemplo, no caso de Cl_2 em que a navegação começou em Cl1, no primeiro movimento, para a direita, o Navmol diria:

“Moveu-se para o átomo: Cl2, às 3 horas, através de uma ligação simples. Visitado pela primeira vez.”

A correspondência entre o **sistema de coordenadas do relógio** e as teclas de seta é feita da seguinte forma:

- O círculo do relógio é dividido em quatro quadrantes, correspondendo a ter um sinal de multiplicar sobreposto num círculo.
- O quadrante **superior** está relacionado com a direção para **cima** (tecla da seta **UP**) e corresponde às coordenadas **11, 12 e 1** horas.
- O quadrante **direito** está relacionado com a direção para a **direita** (tecla da seta **RIGHT**) e corresponde às coordenadas **2, 3 e 4** horas.

- O quadrante **inferior** está relacionado com a direção para **baixo** (tecla da seta **DOWN**) e corresponde às coordenadas **5, 6 e 7** horas.
- O quadrante **esquerdo** está relacionado com a direção para a **esquerda** (tecla da seta **LEFT**) e corresponde às coordenadas **8, 9 e 10** horas.

3.2 Informação do átomo

Os átomos, no Navmol, são descritos pelo seu símbolo químico, que pode ter uma ou duas letras, seguido do seu número de identificação na molécula, ID. Quando o utilizador está num dado átomo, a informação pode ser solicitada para o presente átomo (onde o cursor está posicionado), pressionando a tecla de **espaço**. Navmol irá descrever as seguintes propriedades:

1. O símbolo químico e número de identificação (ID) do átomo.
2. Número de vizinhos ligados, seguido por uma lista de todos os vizinhos e das respetivas coordenadas do relógio e o tipo de ligação (*i.e.* simples, dupla ou tripla) com cada vizinho ligado.
3. Carga formal deste átomo, se este for carregado.

Por exemplo, no caso da molécula do cloro Cl₂, depois de estar posicionado no átomo de cloro número dois, Cl2, e pressionar a tecla de **ESPAÇO** o Navmol diria:

“Átomo: Cl2. Tem 1 vizinho: Cl1 às 9 horas através de uma ligação simples.”

3.3 Marcadores

O Navmol permite que o utilizador configure uma série de marcadores (*bookmarks*) em locais diferentes da molécula. Desta forma, o utilizador pode marcar locais, por exemplo, átomos de grupos funcionais na molécula e, em seguida, saltar entre eles. Os marcadores são definidos pressionando as teclas **Control** mais as teclas dos números **1 a 0**, **CTRL + 1 a 0**, o que significa que o utilizador pode configurar dez marcadores diferentes. A fim de saltar para um átomo referido por um marcador o utilizador pressiona uma das dez teclas de **1 a 0**. Por exemplo, o utilizador pode configurar o número do marcador **1**, pressionando a tecla **Control** mais tecla do número **um**, **CTRL + 1**, no átomo de carbono com ID número 3, digamos na molécula de hexano que tem seis carbonos, e em seguida seguir em frente para outros átomos. Se o utilizador, esteja onde estiver na sua navegação, quiser voltar de imediato novamente para o átomo de carbono com ID número 3, terá apenas que pressionar a tecla **1**, a fim de o fazer. Os marcadores são por isso particularmente importantes para anotar especificidades em determinados átomos da estrutura onde o utilizador está a navegar.

3.4 Saltar para um átomo

Ao pressionar a tecla **J**, o utilizador será solicitado a inserir o número de ID do átomo que quer navegar (para acabar deverá pressionar a tecla **RETURN**). Isto, naturalmente, implica que o utilizador já tem algum conhecimento da ordenação dos átomos na molécula.

Ao saltar de um átomo para outro o Navmol irá descrever o movimento que foi feito com as seguintes informações:

1. Símbolo químico do átomo e número ID para onde o cursor saltou.
2. As coordenadas do relógio para a direção do salto.
3. O número de ligações entre os dois átomos envolvidos no salto.
4. Se esta é a primeira vez que o átomo é visitado. Visitas posteriores feitas ao mesmo átomo já não serão assinaladas pelo programa.

3.5 Histórico da navegação

O Navmol regista todas as ações de navegação executadas pelo utilizador. Para navegar de acordo com a história o utilizador tem que pressionar **sucessivamente** as teclas **Control** mais tecla da seta **LEFT (esquerda)**, **CTRL + LEFT**, até “Não há mais história nessa direção” e teclas **Control** mais tecla da seta **RIGHT (direita)**, **CTRL + RIGHT**, para voltar na história. Desta forma, o utilizador pode refazer todos os passos que tenha feito até esse ponto. Quando iniciar uma nova navegação, será registada uma nova história.

3.6 Navegação por ordem numérica

Se o utilizador quer explorar a molécula movendo-se de um átomo para outro, seguindo a ordem numérica dos átomos da molécula, pode fazê-lo por ordem crescente pressionando a tecla **Control** mais tecla da seta **UP (cima)**, **CTRL + UP**, ou por ordem decrescente pressionando a tecla **CTRL** + tecla da seta **DOWN (baixo)**, **CTRL + DOWN**.

3.7 Informação da molécula

O utilizador pode pressionar a tecla **Control** mais a tecla **espaço**, **CTRL + ESPAÇO**, para obter informações gerais sobre a molécula. Esta informação é sempre referida no início da sessão do Navmol, quando a molécula é carregada pela primeira vez. Nessa altura o Navmol, sem intervenção do utilizador, referiu as seguintes propriedades da molécula:

1. Número de átomos, excetuando os hidrogénios. Atenção que pode não haver hidrogénios.
2. Fórmula da molécula. Comparação com o número anterior permitirá ao utilizador confirmar se há

ou não hidrogénios na molécula. Atenção que o programa, durante a navegação, é omissivo em relação aos hidrogénios, à semelhança do que se faz com outros editores moleculares, pressupondo que o utilizador sabendo qual a valência do carbono, e dos outros átomos comuns, automaticamente contará os hidrogénios que a representação não mostra.

3. O símbolo químico e o respetivo número ID do átomo do cursor, que será no início da navegação sempre o número um.

4. Número de vizinhos ligados, seguido por uma lista de todos os vizinhos com respetivas **coordenadas do relógio** e o **tipo de ligação** (isto é se se trata de uma ligação simples, dupla ou tripla) a cada vizinho ligado.

5. Carga elétrica formal deste átomo, se este for carregado.

3.8 Abrir um ficheiro com uma nova molécula

Para carregar uma nova molécula, o utilizador pode pressionar as teclas, **ALT** mais a da letra **O**, **ALT** + **O**. Um diálogo de seleção de ficheiros será exibido para esse efeito. Depois de selecionar um ficheiro a molécula anterior será perdida e uma molécula nova será carregada. Atualmente apenas os ficheiros das moléculas gravados nos formatos SMILES e MDL MOL são suportados pelo Navmol.

4 Modo de edição de uma única molécula

Todos os recursos implementados para o modo de navegação também estão disponíveis para o **modo de edição**. Para entrar no **modo de edição**, o utilizador deve pressionar a tecla da letra **E** quando estiver no modo de navegação. Pressionando novamente a tecla **E** o utilizador volta para o **modo de navegação**.

4.1 Adicionar um átomo

Pressionando a tecla da letra **A**, no **modo de edição**, aparece uma caixa de diálogo para escolher um átomo a ser adicionado à molécula. O átomo será ligado ao presente átomo, ou seja, onde se encontra o cursor. O utilizador pode escolher o elemento químico, a direção e as informações estereoquímicas, isto é para cima ou para baixo do plano do seu monitor.

4.2 Adicionar uma ligação

Pressionando tecla da letra **B**, no **modo de edição**, abrirá uma caixa de diálogo para adicionar uma ligação ao presente átomo. O utilizador receberá uma lista de átomos para os quais a ligação pode ser feita. A lista será ordenada em ordem decrescente da distância geométrica ao presente átomo.

4.3 Remover um átomo

A opção de remoção direta de um átomo não existe. Em vez disso, o utilizador pode pressionar as teclas **Control** mais a da letra **A**, **CTRL + A**, e uma caixa de diálogo irá aparecer para transformar o presente átomo e as suas ligações em objetos fictícios ou representações. Os átomos e ligações fictícias não existem no composto químico e são utilizados apenas para ligar este conjunto de átomos. Depois de pressionar as teclas **CTRL + A**, o utilizador deverá confirmar com a tecla da letra **Y (sim)** ou a tecla da letra **N (não)** se quer transformar o presente átomo e todas as ligações a este em objetos fictícios.

4.4 Remover uma ligação

A opção para remover diretamente uma ligação não existe. Em vez disso, o utilizador pode pressionar as teclas **Control** mais a da letra **B**, **CTRL + B**, e uma caixa de diálogo irá aparecer para transformar uma ligação num objeto fictício ou representação. O utilizador receberá uma lista das ligações que ligam ao presente átomo.

4.5 Eliminar objetos fictícios ou representações

O utilizador deve ir para um átomo real (ou seja, um átomo não-simulado) e pressionando as teclas **Control** mais a da letra **C**, **CTRL + C**, irá eliminar efetivamente todos os objetos fictícios. O utilizador deverá confirmar esta operação com **Y (sim)** ou **N (não)**.

4.6 Substituir um átomo

Pressionando a tecla da letra **R** o utilizador abrirá uma caixa de diálogo para escolher qual o átomo para substituir o átomo atual. O utilizador pode escolher o elemento a ser adicionado.

4.7 Mudança da carga de um átomo

Pressionando a tecla da letra **C** abrirá uma caixa de diálogo para alterar a carga formal do presente átomo de -8 a +8.

4.8 Alterar a ordem de ligação

O utilizador deve em primeiro lugar ir para um dos átomos envolvidos na ligação na qual quer mudar a ordem da ligação. Em seguida, deve pressionar as teclas **Control** mais **SHIFT** mais a da letra **B**, **CTRL + SHIFT + B**, e imediatamente aparecerá uma caixa de diálogo para selecionar a ligação cuja ordem o utilizador deseja alterar. Após a seleção, uma segunda caixa de diálogo irá aparecer para selecionar a ordem da ligação pretendida (por exemplo, ligação simples, dupla ou tripla).

4.9 Guardar um ficheiro com uma nova molécula

Para guardar um ficheiro com uma nova molécula, o utilizador pode pressionar as teclas **ALT** mais a da letra **S**, **ALT + S**. O diálogo para guardar o ficheiro irá aparecer. Depois de guardar o novo ficheiro, o Navmol irá informar o utilizador que a extensão **.mol** será adicionada ao nome do ficheiro. Atualmente, apenas o formato **MDL MOL** é suportado para guardar um ficheiro.

5 Resumo das instruções de teclado

Esta é a lista de teclas e combinações de teclas usadas para navegar de uma molécula no programa Navmol. Também está acessível no programa Navmol se pressionar a tecla da letra **H**.

Lista das teclas:

- **TECLA CTRL + TECLA S:** selecionar o sistema de som
- **TECLA CTRL + TECLA SHIFT + TECLA S:** desativa ou ativa o som.
- **TECLA CTRL + TECLA MAIS OU MENOS:** aumenta ou diminui a velocidade de fala, respetivamente.
- **TECLA SETA CIMA:** ir para um átomo ligado às 11, 12 ou 1 horas.
- **TECLA SETA RIGHT (DIREITA):** ir para um átomo ligado às 2, 3 ou 4 horas.
- **TECLA SETA DOWN (BAIXO):** ir para um átomo ligado às 5, 6 ou 7 horas.
- **TECLA SETA LEFT (ESQUERDA):** ir para um átomo ligado às 8, 9 ou 10 horas.
- **TECLA CTRL + TECLA SETA CIMA OU BAIXO:** ir para o átomo seguinte ou anterior seguindo o número de identificação.
- **TECLA CTRL + TECLA SETA ESQUERDA OU DIREITA:** seguir o histórico de navegação de forma direta ou inversa, respetivamente.
- **TECLA J:** Saltar para o átomo identificado com um dado número.
- **TECLA ESPAÇO:** fornece informações sobre o átomo em que se encontra.
- **TECLA CTRL + TECLA ESPAÇO:** fornece informações sobre o átomo em que se encontra e vizinhos.
- **TECLA F:** fornece lista de grupos funcionais encontrados na molécula.
- **TECLA CTRL + TECLA 0 A 9:** definir um marcador.
- **TECLA 0 A 9:** ir para um marcador assinalado.
- **TECLA ALT + TECLA O:** abrir um novo ficheiro com uma nova molécula.
- **TECLA ALT + TECLA S:** salvar molécula num ficheiro.
- **TECLA E:** entrar em modo de edição de moléculas simples.

- **TECLA A:** adicionar um átomo (em modo de edição).
- **TECLA CTRL + TECLA F:** muda o sistema de som para o freeTTS.
- **TECLA CTRL + TECLA S:** seleção de sistema de som.
- **TECLA H:** abre o menu de ajuda.
- **TECLA CTRL + TECLA L:** seleção de idioma.
- **TECLA CTRL + TECLA Q:** sair do programa Navmol.

6 Selecção do idioma

O utilizador pode seleccionar entre os idiomas disponíveis, inglês e português pressionando as teclas **CTRL + L**.