

**UNIVERSIDADE FEDERAL DOS VALES DO JEQUITINHONHA E MUCURI**  
**Mestrado Profissional em Matemática em Rede Nacional – PROFMAT**  
**Alexandre Rodrigues Santos**

**GEOMETRIA DAS DISTÂNCIAS MOLECULARES:  
A MATEMÁTICA DAS MOLÉCULAS**

**Teófilo Otoni**  
**2020**

Alexandre Rodrigues Santos

**GEOMETRIA DAS DISTÂNCIAS MOLECULARES:  
a matemática das moléculas**

Dissertação apresentada ao programa de Pós-Graduação em Matemática em Rede Nacional – PROFMAT da Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri, como requisito parcial para a obtenção de título de Mestre.

Orientador: *Dr.* **Nolmar Melo de Souza**

**Teófilo Otoni**  
**2020**

### Catálogo na fonte - Sisbi/UFVJM

S237 Santos, Alexandre Rodrigues  
2021 geometria das distancias moleculares [manuscrito] : a  
matemática das moléculas / Alexandre Rodrigues Santos. --  
Teófilo Otoni, 2021.  
46 p. : il.

Orientador: Prof. Nolmar Melo de Souza.

Dissertação (Mestrado Profissional em Matemática) --  
Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri,  
Programa de Pós-Graduação em Matemática, Teófilo Otoni, 2020.

1. Teoria de grafos. 2. Geometria das distâncias. 3.  
Geometria das moléculas. 4. Proteínas. 5. Ressonância  
magnética. I. Souza, Nolmar Melo de. II. Universidade Federal  
dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri. III. Título.

Alexandre Rodrigues Santos

GEOMETRIA DAS DISTÂNCIAS MOLECULARES: A MATEMÁTICA DAS MOLÉCULAS

Dissertação apresentada ao MESTRADO PROFISSIONAL EM MATEMÁTICA EM REDE NACIONAL, nível de MESTRADO como parte dos requisitos para obtenção do título de MESTRE EM MATEMÁTICA.

Orientador: Prof. Dr. Nolmar Melo de Souza

Data da aprovação: 18/12/2020



Documento assinado digitalmente  
Weversson Dalmaso Sellin  
Data: 01/02/2022 14:25:17-0300  
Verifique em <https://verificador.iti.br>

---

Prof. Dr. Weversson Dalmaso Sellin

Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri – UFVJM



Documento assinado digitalmente  
FELIPE DELFINI CAETANO FIDALGO  
Data: 01/02/2022 12:03:54-0300  
Verifique em <https://verificador.iti.br>

---

Prof. Dr. Felipe Delfini Caetano Fidalgo

Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC



Documento assinado digitalmente  
Nolmar Melo de Souza  
Data: 18/01/2022 18:01:42-0300  
Verifique em <https://verificador.iti.br>

---

Prof. Dr. Nolmar Melo de Souza

Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri – UFVJM

Dedico este trabalho primeiramente a Deus, que me deu forças para superar todas as situações adversas ao longo do curso. A minha avó, Maria Ramos Pereira dos Santos, (in memoriam). Aos meus filhos de sangue e de coração. À minha esposa e grande companheira.

## AGRADECIMENTOS

Nesses anos de mestrado, de bastante estudo, esforço e cansaço, mas muito empenho, quero agradecer àqueles que contribuíram nesta jornada. Agradeço a Deus, a minha família, esposa, filhos e amigos que me acompanharam e foram fundamentais para a realização dessa conquista. Uma gratidão em especial ao meu orientador, Dr. Nolmar Melo de Souza, pelo apoio e incentivo a alçar o sucesso e pelo direcionamento. Obrigado pela pessoa, profissional que é, pois abracei o tema e absorvi muito conhecimento. Também agradeço a todos os professores do programa PROFMAT da Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri (UFVJM) de Teófilo Otoni-MG, pois contribuíram muito para o meu desenvolvimento acadêmico. Agradeço também a CAPES, pois “o presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES ) – Código de Financiamento 001.”. Muito obrigado!

## RESUMO

A geometria das distâncias moleculares é um tema relativamente novo, mas de grande importância, pois abrange diversas aplicações, devido a sua riqueza de informações úteis. A ideia deste trabalho é apresentar este tema de forma minuciosa para que o leitor possa conhecer um pouco sobre a geometria das moléculas, onde podemos verificar algumas distâncias, formas geométricas, ângulo formado entre átomos, algoritmo para formação de uma molécula. Desse modo, esse trabalho trata-se de uma revisão bibliográfica, sendo uma pesquisa explicativa acerca de grafos, geometria das distâncias (GD), geometria das distâncias moleculares (GDM) e o problema da geometria das distâncias moleculares (PGDM). A partir do ângulo formado entre átomos ligantes, pode-se determinar a sua polaridade, estrutura geométrica e através da Ressonância Magnética Nuclear (RMN), determinar com maior precisão os resultados. Com o estudo relacionado ao PGDM é possível conhecer a função biológica de uma proteína, fazer a análise do DNA de um indivíduo, analisar a geometria molecular de fórmulas químicas, inclusive produzir um determinado tipo de medicamento. Pode-se entender esse conteúdo como interdisciplinar e por isso apresentamos uma sugestão didática, na qual podemos relacionar grafos com a distância entre átomos ligantes, conhecer alguns ângulos formados entre as ligações, encontrar a distância entre átomos usando seu volume e sua densidade, além de manusear estruturas moleculares, verificando o seu tipo de geometria. Assim ao estudar a GD, vamos perceber o quanto o assunto nos permite ampliar nossos conhecimentos sobre tópicos de nosso cotidiano de grande relevância.

**Palavras-Chave:** Geometria. Distâncias. Moleculares. Ressonância Magnética.

## **ABSTRACT**

Molecular geometry distances is a relatively new topic, but of great importance for englobing several applications due to its richness of useful information. This work intends to present that topic thoroughly, in a way that the reader can get to know about molecular geometry and check some bond distances, bond angles, angles between atom forms, algorithms which forms a molecule. Thereby, this work is a bibliographic review, an explanatory research about graphs, distance geometry (GD), geometry of molecular distances (GDM) and the problem of geometry of molecular distances (PGDM). From the angle formed between bonding atoms it is possible to determine polarity and geometrical structure, and through Nuclear Magnetic Resonance (NMR) determine the results with greater precision. Along the study related to PGDM it is possible to know the biological function of a protein, do an individual DNA analysis, analyze the molecular geometry of chemical formulas, including produce a certain type of medicine. This content can be understood as interdisciplinary and therefore it is presented a didactic suggestion, in which we can relate graphs to the distance between bonding atoms, knowing some angles formed between bonds, finding the distance between atoms using its volume and density, in addition to handling molecular structures, checking its type of geometry. So, when studying GD, we will realize how much the subject allows us to expand our knowledge about topics of our daily life of great relevance.

**Keywords:** Geometry. Distances. Molecular. Magnetic Resonance.

---

## LISTA DE FIGURAS

Página

---

1.1	James Joseph Silvester . . . . .	2
1.2	Leonhard Euler . . . . .	3
1.3	Representação das Pontes de Konigsberg . . . . .	3
1.4	Representação em forma de grafo . . . . .	4
1.5	Grafo não direcionado . . . . .	5
1.6	Grafo simples . . . . .	5
1.7	grafo não simples . . . . .	6
1.8	Grafos . . . . .	6
1.9	Grafo de ordem 4 . . . . .	7
1.10	Grafo conexo . . . . .	7
1.11	Grafo completo . . . . .	7
1.12	Enumeração de hidrocarbonetos . . . . .	8
1.13	Aplicação de Grafos em Circuitos Elétricos . . . . .	9
2.14	Esfera . . . . .	12
2.15	Secção da superfície esférica . . . . .	12
2.16	Esferas secantes . . . . .	13
2.17	Interseção de três esferas . . . . .	14
2.18	Árvore binária associada à uma instância com seis átomos . . . . .	16
3.19	Fórmula estrutural do HCl . . . . .	20
3.20	Formatos angulares de moléculas . . . . .	21
3.21	Formatos Trigonais planos de moléculas . . . . .	21
3.22	Formatos piramidais de moléculas . . . . .	22
3.23	Formatos tetraédricos de moléculas . . . . .	22
3.24	Molécula do metano . . . . .	24
3.25	Cubo . . . . .	24

3.26	Tetraedro regular inscrito em uma esfera . . . . .	26
3.27	Formas de representação da molécula de metano . . . . .	26
4.28	Ângulo formado por três átomos consecutivos . . . . .	29
4.29	Tipos de cadeias de proteínas . . . . .	30
4.30	Ordem atômica para uma cadeia principal de $n = p + 2$ aminoácidos. Onde $p$ é a quantidade de aminoácidos genéricos . . . . .	33
4.31	Ordem atômica para uma cadeia de proteína . . . . .	34
5.32	Molécula de água, seu ângulo e comprimento . . . . .	37
5.33	Ligação entre átomos iguais . . . . .	38

As figuras não referenciadas são de autoria própria.

---

# SUMÁRIO

Página

---

<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>Teoria de Grafos</b>	<b>2</b>
1.1 Um pouco da História da Teoria dos Grafos . . . . .	3
1.2 Definições, alguns tipos de Grafos . . . . .	4
1.3 Algumas aplicações de grafos . . . . .	8
1.3.1 Árvore . . . . .	9
<b>Geometria das Distâncias</b>	<b>10</b>
2.1 A relação dos grafos com o PGD . . . . .	11
2.2 Superfícies esféricas, intersecção . . . . .	12
2.2.1 Superfícies Esféricas . . . . .	12
2.2.2 Elementos de uma superfície esférica . . . . .	12
2.2.3 Interseção de algumas superfícies esféricas . . . . .	13
2.3 Algoritmos . . . . .	14
2.3.1 Exemplo de algoritmo [6] . . . . .	15
2.3.2 Algoritmo branch-and-prune (BP) . . . . .	16
<b>Geometria das Moléculas</b>	<b>18</b>
3.1 Geometria das moléculas e a relação com medicamento . . . . .	18
3.2 Estruturas moleculares . . . . .	19
3.3 Formação das moléculas . . . . .	20
<b>Proteínas e Ressonância Magnética</b>	<b>27</b>
4.1 Ressonância Magnética e aplicações . . . . .	27
4.2 Ressonância Magnética Nuclear (RMN) na matemática . . . . .	28

4.3	Proteínas . . . . .	29
4.4	Estrutura de uma proteína encontrada com o algoritmo Branch and Prune (BP)	31
	<b>Sugestão de Aplicação em sala de Aula</b>	<b>35</b>
5.1	Sequência didática . . . . .	35
5.1.1	Atividade proposta . . . . .	36
	<b>Considerações Finais</b>	<b>41</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>42</b>

---

## Introdução

---

O presente trabalho trata-se de um estudo sobre Geometria de Distâncias (GD) com aplicações a geometria das moléculas. A geometria de distâncias (GD) é um ramo da matemática que investiga as relações entre distância entre pontos e suas localizações em um espaço geométrico (CAMARGO, 2015).

A geometria das distâncias pode ser aplicada em diferentes áreas do conhecimento, tais como: estatística, robótica, bioquímica, astronomia, etc e atualmente tem um grande destaque no cálculo de estruturas de moléculas onde a disposição dos átomos está no espaço  $3D$ , e o cálculo dessas estruturas são importantes, pois estão intimamente ligadas às funções das moléculas (LAVOR 2017). Assim, conhecer a estrutura dessas moléculas tem contribuído, por exemplo, na criação de novas drogas (setor farmacêutico), pois a química medicinal envolve aspectos das ciências biológicas, médica e farmacêutica, onde tem a missão de planejamento, descoberta, invenção, identificação e preparação de compostos ativos (SAR) [<http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/medchem/>]. Então, a partir de um problema real, podemos usar a matemática para entender, modelar e buscar soluções para o mesmo. O título deste trabalho sugere conhecer, compreender um ramo dessa ciência envolvida nas moléculas e como as áreas de química, biologia e matemática podem se associar, elas contribuem para estudar de forma interdisciplinar em âmbito escolar.

Utilizando o conceito de grafo, é possível modelar as estruturas moleculares onde os vértices estão associados aos seus átomos e as arestas aos pares de átomos cujas distâncias são conhecidas.

Desse modo o trabalho abordará um pouco sobre os grafos, usando situações de nosso cotidiano, como ir de um local até outro ou situações do ambiente escolar numa ligação química, em especial os hidrocarbonetos. Como é um ramo que tem várias aplicações em diversas áreas de conhecimento, será apresentada também uma proposta de apresentação no Ensino Médio.

Temos também a abordagem de algumas moléculas, mostrando sua polaridade, geometria e ângulo entre os átomos, e um pouco sobre as proteínas, sendo uma fundamentação teórica com base em artigos, dissertações que versam acerca da geometria das distâncias e como incentivo o livro um convite à Geometria das distâncias, Carlile Lavor (Durban e New York, 4 de julho de 2014).

O termo grafo foi usado pela primeira vez por James Joseph Sylvester em um artigo publicado em 1877, na *Nature*, mas primeira definição formal só veio no século *XX* com o problema das sete pontes de Königsberg, que foi resolvido por Leonhard Euler [20].

Uma maneira de organizar dados em forma de grafos pode ser definida a partir de um conjunto de vértices ou nós e um conjunto de arestas, que são utilizadas para ligar dois vértices e no caso um conjunto de objetos poderia representar os vértices e as arestas seriam as relações entre eles [12].

Fig. 1.1: James Joseph Sylvester



Fig. 1.2: Leonhard Euler



## 1.1 Um pouco da História da Teoria dos Grafos

A origem da teoria dos grafos foi atribuída a Leonardo Euler<sup>1</sup> no ano de 1736, quando o mesmo se deparou com um problema curioso que pairava na cidade de Königsberg (antiga Prússia), atualmente Kaliningrado, Rússia.

Na cidade havia duas ilhas ligadas ao continente por sete pontes (Figura 1.3). O problema consiste em encontrar as possíveis maneiras de atravessar todas as sete pontes, passando por cada ponte uma única vez [10].

Euler resolveu o problema utilizando a ideia de Grafo, um conceito “moderno” que na época definia um desenho simples onde ponto é conectado a pares de arestas.

Fig. 1.3: Representação das Pontes de Königsberg

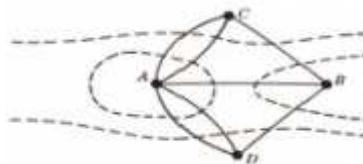


Fonte: IMPA – Instituto de Matemática Pura e Aplicada\Facebook

Nessa representação (figura 1.4), Euler demonstrou a relação entre dois elementos, no

<sup>1</sup>Leonhard Euler foi um matemático e físico suíço que passou a maior parte de sua vida na Rússia e na Alemanha. Fez importantes descobertas em várias áreas da matemática como o cálculo e a teoria dos grafos.

Fig. 1.4: Representação em forma de grafo



qual as pontes representam o conjunto de Elos ( $E$ ) chamados de arestas e os pontos, o conjunto de vértices ( $V$ ).

Note que, de cada vértice, partem arestas, assim, ao passar por cada vértice, é necessário cruzar duas arestas, uma para entrar no vértice e outra para sair, ou seja, cada vértice deve possuir um par de arestas. No entanto, no caso das pontes de Königsberg, os vértices se conectam com três ou cinco arestas, logo, Euler chegou à conclusão de que o problema não tem uma solução.

Posteriormente, seguindo o modelo de Euler, outros cientistas passaram a aplicar a teoria dos grafos. Gustav Robert Kirchhoff, ao estudar circuitos elétricos, e Arthur Cayley na enumeração de hidrocarbonetos, em química orgânica.

Grafos, então, é um ramo da matemática que abrange várias áreas do conhecimento e, atualmente, vem sendo utilizado na modelagem de problemas que envolvem a computação, engenharia, bioquímica, dentre outros.

## 1.2 Definições, alguns tipos de Grafos

**Definição 1.1.** Um grafo  $G(V, A)$  é definido pelo par de conjuntos  $V$  e  $A$ , onde temos:

$V$  - conjunto não vazio: os **vértices** ou **nós** do grafo;

$A$  - conjunto de pares não ordenados  $a = (v, w)$ ,  $v$  e  $w \in V$ : as **arestas** do grafo.

Seja, por exemplo, o grafo  $G(V, A)$  dado por:

$V = \{p | p \text{ é um aluno do profmat}\}$

$A = \{(v, w) | v \text{ vem da mesma cidade que } w\}$

Neste exemplo estamos considerando que a relação “ $v$  vem da mesma cidade que  $w$ ” é uma relação simétrica, ou seja, se “ $v$  vem da mesma cidade que  $w$ ”, então “ $w$  vem da mesma cidade que  $v$ ”. Como consequência, as arestas que ligam os vértices não possuem qualquer orientação.

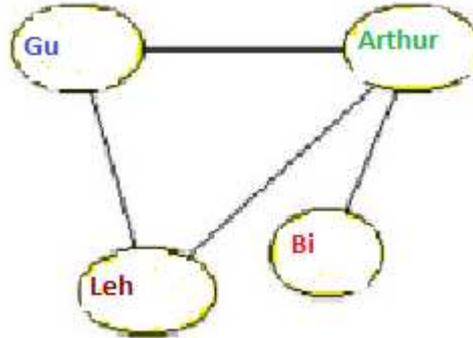
Esta definição representa toda uma família de grafos. Um exemplo de elemento desta família (ver grafo 1.5 abaixo) é dado por:

$V = \{Gu, Leh, Bi, Arthur\}$

$A = \{(Gu, Leh), (Leh, Gu), (Leh, Arthur), (Arthur, Leh), (Gu, Arthur),$

$(Arthur, Gu), (Arthur, Bi), (Bi, Arthur)\}$

Fig. 1.5: Grafo não direcionado



A teoria dos grafos é um ramo importante da matemática que estuda as relações entre objetos de um determinado conjunto e se ligam por arestas os seus vértices. A palavra “grafo” é um neologismo derivado da palavra *graph* (gráfico) em inglês e foi utilizada pela primeira vez pelo matemático inglês James Joseph Sylvester, (Wallis, 2007).

Temos aqui, por exemplo, algumas formas de classificar os grafos, onde eles podem ser denominados segundo a sua natureza em simples e não simples, conectado e não conectado, completo e não completo.

**Definição 1.2.** Um grafo é dito simples quando não possui laços (uma aresta que conecta um vértice a ele mesmo).

Fig. 1.6: Grafo simples

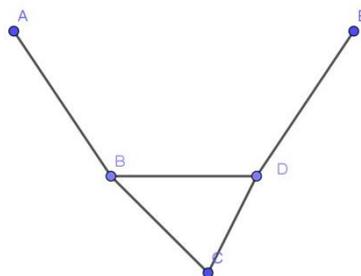
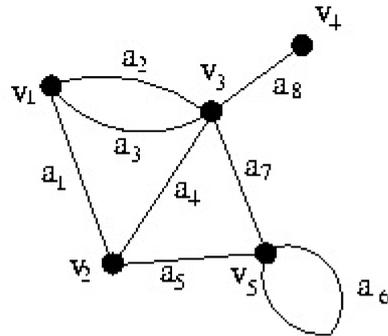


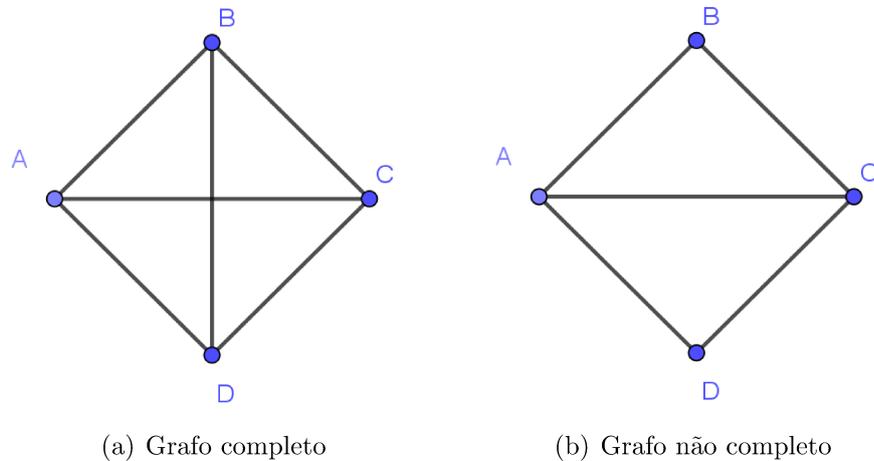
Fig. 1.7: grafo não simples



**Definição 1.3.** Dizemos que um grafo  $G$  é completo se o conjunto de arestas contém todos os pares possíveis do conjunto de vértices.

Um grafo é completo se todos os seus vértices forem adjacentes. Um grafo completo  $K_n$  possui  $\frac{n(n-1)}{2}$  arestas.

Fig. 1.8: Grafos

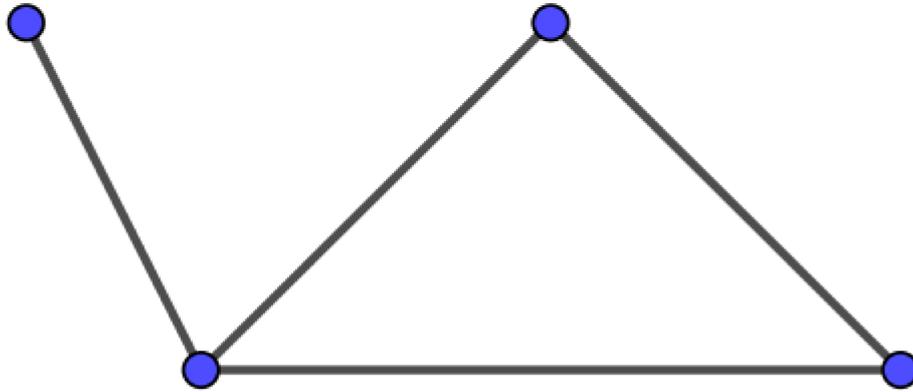


(a) Grafo completo

(b) Grafo não completo

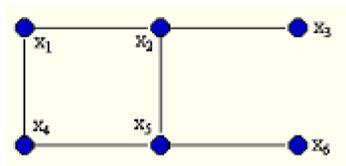
A ordem de um grafo  $G$  é dada pela cardinalidade do conjunto de vértices, ou seja, pelo número de vértices de  $G$ .

Fig. 1.9: Grafo de ordem 4



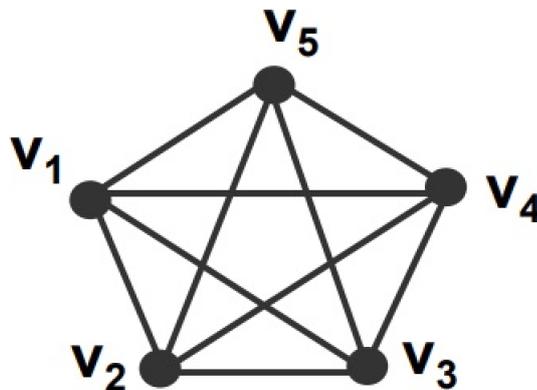
**Definição 1.4.** Seja  $G$  um grafo. Dois vértices  $v$  e  $w$  de  $G$  estão conectados se existe um caminho de  $v$  para  $w$ . Um grafo  $G$  é conexo se dado um par qualquer de vértice  $v$  e  $w$  em  $G$ , existe um caminho de  $v$  para  $w$ . Simbolicamente,  $G$  é conexo  $\Leftrightarrow \forall$  vértices  $v, w \in V(G), \exists$  um caminho de  $v$  para  $w$ . Se a negação desta afirmação for tomada, é possível ver que um grafo não é conexo se existem dois vértices em  $G$  que não estão conectados por qualquer caminho.

Fig. 1.10: Grafo conexo



Fonte: <https://www.inf.ufsc.br/grafos/definicoes/definicao.html>

Fig. 1.11: Grafo completo

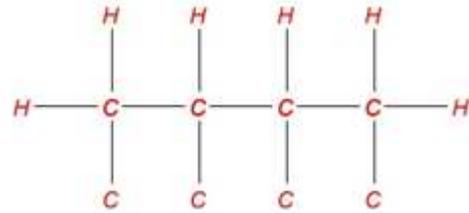


### 1.3 Algumas aplicações de grafos

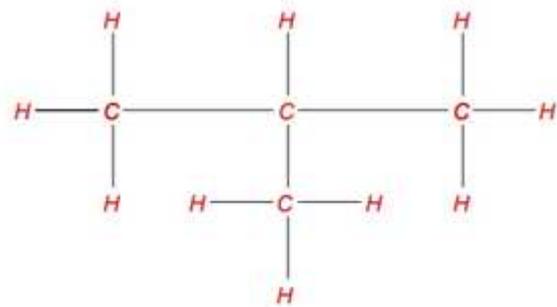
Fig. 1.12: Enumeração de hidrocarbonetos



Arthur Cayley (1821–1895), matemático inglês. Logo após o trabalho de Kirchoff, Cayley usou "árvores matemáticas" para enumerar todos os isômeros para certos hidrocarbonetos.



Butano



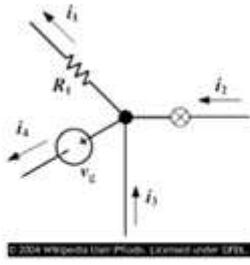
Isobutano

Fonte: Grafos Loureiro DCC\UFMG

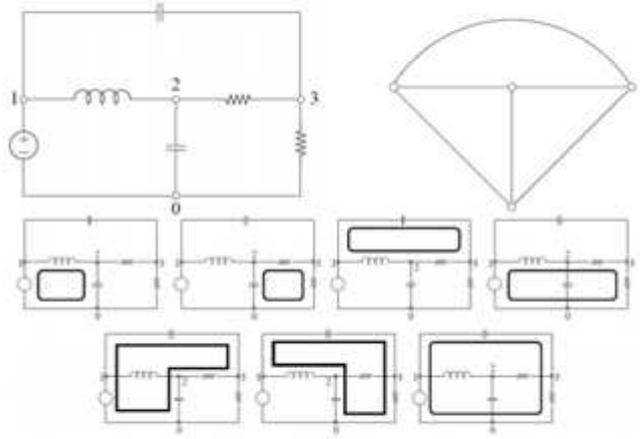
Fig. 1.13: Aplicação de Grafos em Circuitos Elétricos



Gustav Kirchoff (1824–1887), físico alemão. Foi o primeiro a analisar o comportamento de “árvores matemáticas” com a investigação de circuitos elétricos.



$$i_1 + i_4 = i_2 + i_3$$

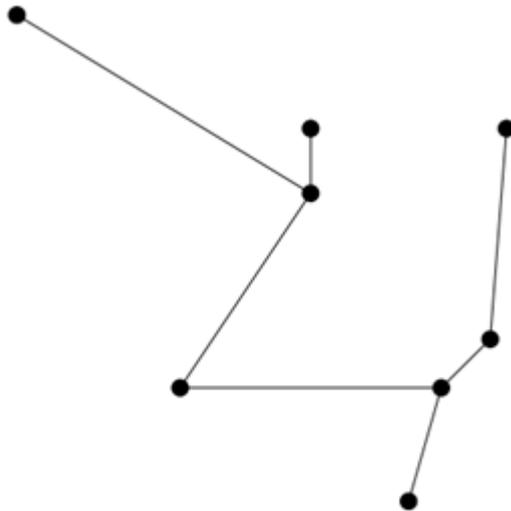


Fonte: Grafos Loureiro DCC\UFMG

### 1.3.1 Árvore

**Definição 1.5.** Uma árvore (também chamada de árvore livre) é um grafo não dirigido acíclico e conexo [5].

Uma árvore representa uma estrutura de dados formada durante a busca, onde cada vértice indica a solução parcial do problema e cada um de seus ramos representa um conjunto de possíveis soluções viáveis a partir de um determinado vértice.



---

## Geometria das Distâncias

---

Neste capítulo, apresentamos um breve histórico da Geometria das Distâncias (GD), conceito e relação com o Problema da Geometria das Distâncias (PGD). A geometria das distâncias é uma área de pesquisa que tem a matemática e a computação como base e se aplica em diferentes áreas do conhecimento tais como [6]:

- Bioquímica;
- Estatística;
- Robótica;
- Comunicação.

Partindo do princípio da relação existente entre distâncias entre pontos, objetos e localização desses em um espaço geométrico, podemos desenvolver ramos de grande importância, com enorme utilidade.

A noção de distância é um conceito inserido no cotidiano das pessoas para definir deslocamento, comprimento de um lugar a outro, ou seja, tratamos desse assunto de maneira usual, corriqueira, mas sempre fazendo uso do conhecimento matemático.

A geometria das distâncias (GD) surgiu em 1928, quando Menger caracterizou vários conceitos geométricos usando a ideia de distância, porém só mais tarde em 1953 após alguns acontecimentos, o tema se tornou uma nova área do conhecimento, na qual o problema principal dessa área de pesquisa demonstrava interesse na riqueza de suas aplicações dentre elas a conformação molecular, visualização de dados e outros [7].

Através da geometria das distâncias (GD), podemos:

- Localizar pontos espalhados em um dado espaço;
- Encontrar a medida entre duas demarcações;

- Determinar estruturas tridimensionais de moléculas;
- Encontrar a posição de corpos no espaço;
- Estipular o alcance de um braço mecânico;
- Demarcar pontos de sinais com roteadores;
- Através da RMN (Ressonância Magnética Nuclear) analisar e determinar moléculas de proteínas tridimensionais.

O problema da geometria das distâncias (PDG) consiste em encontrar um determinado conjunto de pontos, em um dado espaço geométrico, cuja distância entre alguns deles seja conhecida. Tomamos então a definição do problema (Lavor, 2014).

## 2.1 A relação dos grafos com o PGD

O problema da geometria das distâncias (PGD) está em encontrar um determinado conjunto de pontos, em um dado espaço geométrico, cuja distância entre alguns deles seja conhecida. Tomamos, então, a definição do problema (Lavor, 2014).

### Problema:

Dado um natural  $K > 0$  e um grafo simples não direcionado  $G(V, E)$ , cujas arestas são ponderadas por uma função  $d : E \rightarrow \mathbb{R}^+$ , determine se existe uma função  $x : V \rightarrow \mathbb{R}^K$  tal que:

$$\forall \{u, v\} \in E, \|x_u - x_v\| = d(u, v)$$

Para resolver o problema basta associar a cada vértice de  $G$  um único ponto em  $\mathbb{R}^k$ , satisfazendo a equação acima. Ou seja, ao posicionarmos os vértices  $u, v \in V$  em  $\mathbb{R}^k$ , temos que “acertar” a distância calculada  $\|x_u - x_v\|$  com o valor dado  $d(u, v)$ . Para simplificar a notação, usaremos  $x_u, x_v$ , no lugar de  $x(u), x(v)$ , e  $d_{uv}$ , no lugar de  $d(u, v)$ . A função  $x$  é chamada de realização de  $G$  (Lavor, 2017).

### Geometria de Distâncias no $\mathbb{R}^k$

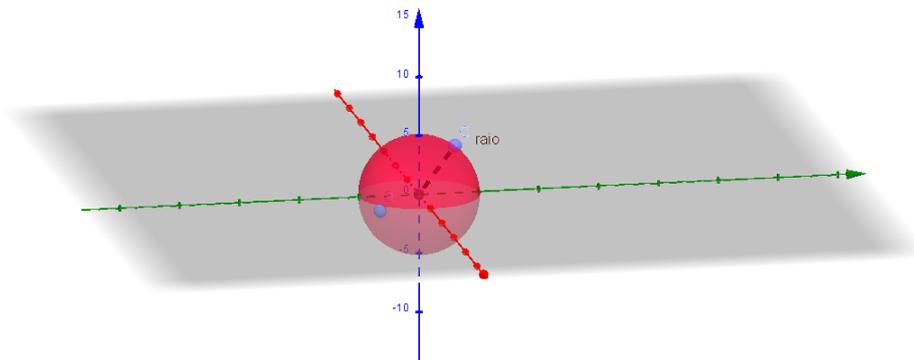
O problema fundamental da GD, que chamaremos de Problema de Geometria de Distâncias, denotado por PGD, é determinar um conjunto de pontos, em um dado espaço geométrico, cujas distâncias entre alguns deles são conhecidas. O PGD pode ser definido de maneira genérica, considerando o espaço geométrico e o conceito de distância associados de maneira bem abstrata [17, 18].

## 2.2 Superfícies esféricas, intersecção

### 2.2.1 Superfícies Esféricas

Considera-se um ponto  $O$  do espaço e uma medida  $R$ , sendo  $R > 0$  chama-se superfície da esfera de centro  $O$  e raio  $R$ , o conjunto de todos os pontos no espaço, cujas distâncias ao ponto  $O$  é igual a  $R$ . A superfície esférica é um objeto que pode ser obtido através da rotação completa de um semicírculo em torno de um eixo que contém um diâmetro em seus extremos [9].

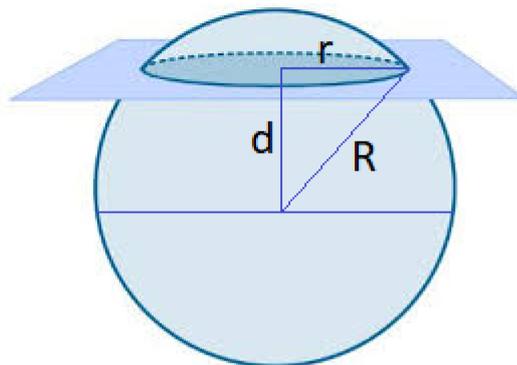
Fig. 2.14: Esfera



### 2.2.2 Elementos de uma superfície esférica

- **Secção da superfície esférica** - Corte feito na superfície esférica formando um círculo.

Fig. 2.15: Secção da superfície esférica



Para seção transversal, vale a relação:

$$R^2 = d^2 + r^2$$

$r$  = raio da circunferência formada;

$R$  = raio da esfera;

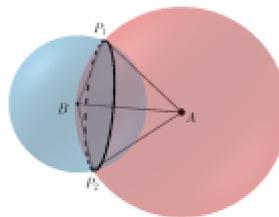
$d$  = distância do centro da esfera até a secção transversal.

- Polos: o ponto “mais alto” e o “mais baixo” de uma esfera. São as interseções entre o diâmetro do semicírculo que foi girado e o sólido resultante.
- Paralelo: é a circunferência observada na secção transversal da esfera com relação ao seu eixo de rotação.  
Lembre-se: secção transversal da esfera é a secção perpendicular ao eixo de rotação dela.
- Equador: É o paralelo cuja secção transversal passa pelo centro da esfera. Assim, é o maior paralelo e possui raio igual ao da esfera.
- Meridiano: circunferência resultante da secção de uma esfera por um plano que contém seu eixo de rotação. De certa forma, podemos dizer que paralelos e meridianos são perpendiculares.

### 2.2.3 Interseção de algumas superfícies esféricas

**SUPERFÍCIES ESFÉRICAS SECANTES:** Para que sejam secantes, precisam ter dois pontos em comum e a condição mínima necessária é que a distância entre seus centros seja menor que a soma das medidas de seus raios. Observe a figura 2.16.

Fig. 2.16: Esferas secantes



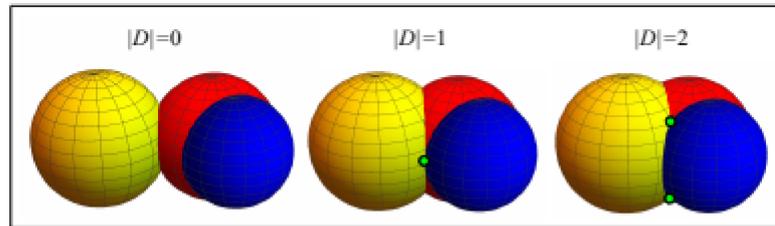
Fonte: <http://ce.resd.facom.ufms.br/sbrc/2010/024.pdf>

#### INTERSEÇÃO DE TRÊS ESFERAS

Para estimar a estrutura de uma molécula determina-se a posição no espaço de seus átomos e através do algoritmo *Branch and Prune* (BP) que enumera todas as possíveis posições dos átomos e descarta aquelas que são inválidas, torna-se possível utilizar as esferas, então utilizando o cálculo de interseção de esferas e considerando uma molécula com vários átomos na qual a distância entre os pares desses átomos seja conhecida, monta-se então uma estrutura tridimensional da molécula, respeitando as distâncias já conhecidas e a partir da informação da interseção de três esferas com centros não colineares, temos os possíveis resultados [18]:

- Pode ser vazia;
- Pode apresentar um ponto;
- Pode apresentar dois pontos.

Fig. 2.17: Interseção de três esferas



Fonte: [http://repositorio.unicamp.br/jspui/bitstream/REPOSIP/306798/1/Camargo\\_ValterSoaresde\\_D.pdf](http://repositorio.unicamp.br/jspui/bitstream/REPOSIP/306798/1/Camargo_ValterSoaresde_D.pdf)

## 2.3 Algoritmos

**Algoritmo:** Um algoritmo pode ser definido como uma sequência finita de passos (instruções) para resolver um determinado problema. Sempre que desenvolvemos um algoritmo estamos estabelecendo um padrão de comportamento que deverá ser seguido (uma norma de execução de ações) para alcançar o resultado de um problema. Para o desenvolvimento de um algoritmo eficiente é necessário obedecermos algumas premissas básicas no momento de sua construção [16]:

- Definir ações simples e sem ambiguidade;
- Organizar as ações de forma ordenada;
- Estabelecer as ações dentro de uma sequência finita de passos;
- Os algoritmos são capazes de realizar tarefas como:
  - Ler e escrever dados;
  - Avaliar expressões algébricas, relacionais e lógicas;
  - Tomar decisões com base nos resultados das expressões avaliadas;
  - Repetir um conjunto de ações de acordo com uma condição.

Um algoritmo quando programado num computador é constituído pelo menos das 3 partes, sendo elas:

- Entrada de dados;
- Processamento de dados;
- Saída de dados.

Na parte de entrada, são fornecidas as informações necessárias para que o algoritmo possa ser executado. Estas informações podem ser fornecidas no momento em que o programa está sendo executado ou podem estar embutidas dentro do mesmo.

Na parte do processamento são avaliadas todas as expressões algébricas, relacionais e lógicas, assim como todas as estruturas de controle existentes no algoritmo (condição e/ou repetição).

Na parte de saída, todos os resultados do processamento (ou parte deles) são enviados para um ou mais dispositivos de saída, como: monitor, impressora, ou até mesmo a própria memória do computador.

### 2.3.1 Exemplo de algoritmo [6]

#### Algoritmo: molécula de metano ( $\text{CH}_4$ )

- 1º pegue uma tabela periódica e observe os números atômicos dos elementos Carbono e Hidrogênio;
- 2º faça a distribuição eletrônica em níveis e subníveis;
- 3º construa a fórmula eletrônica;
- 4º faça a fórmula estrutural;
- 5º determine sua geometria;
- 6º por fim, estabeleça sua polaridade.

#### Entrada:

- Quantidade de átomos:  $n$
- Organização dos átomos:  $C$  e  $H$
- Distância entre os átomos separados por uma ligação covalente  $\{d_{1,2}, d_{2,3}, \dots, d_{n-1,n}\}$  para  $i = 2, \dots, n$ .

#### Processamento:

- Fazer a distribuição eletrônica em níveis e subníveis de energia
- Esboçar a fórmula eletrônica e estrutural da molécula
- Conhecer a geometria molecular e a polaridade.

#### Saída:

Estabelecer as posições  $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^n$  dos  $n$  átomos da molécula.

Na molécula de metano ( $\text{CH}_4$ ), o átomo de carbono (C) ocupa o centro de um tetraedro regular em cujos os vértices estão os átomos de hidrogênio (H), na qual a tarefa a ser determinada seria montar a fórmula estrutural dessa substância, onde então é criada uma estratégia de busca e basicamente, o algoritmo observa a distância entre os átomos e lista suas possíveis posições, organizando assim sua fórmula estrutural pois os átomos são invisíveis, uma vez que são menores que o menor comprimento de onda visível, então por meio de uma máquina de ressonância magnética nuclear, determina-se as medidas de distâncias entre átomos e a partir dessas distâncias dadas, obtém-se suas posições usando as estratégias de busca do algoritmo *Branch and Prune* (BP).

### 2.3.2 Algoritmo branch-and-prune (BP)

O algoritmo *branch and prune* é um método utilizado em modelo de programações por restrições.

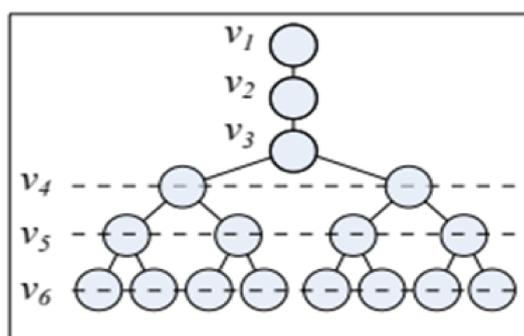
A forma de agir do BP de acordo a árvore binária mostra que o algoritmo a cada duas possibilidades para posicionamento de um átomo vai descartando algumas possibilidades, até chegar naquele que é efetiva. No caso de uma proteína para detalhar sua estrutura, precisa conhecer todas as ligações covalentes e os ângulos.

A busca para solução do problema então, ocorre numa árvore binária, que é construída de acordo a situação do problema.

Exemplo:

Representação de uma árvore binária.

Fig. 2.18: Árvore binária associada à uma instância com seis átomos



Fonte: LAVOR, 2017

Três vértices fixos e mais três vértices variáveis em outras possíveis posições, então o algoritmo *Branch and Prune* (BP) vai explorando possibilidades até chegar num caminho efetivo, que é a solução para o problema.

O algoritmo *branch and prune*, nos auxilia para determinar as coordenadas cartesianas de todos os átomos de uma molécula, onde se conhece todas as distâncias entre esses átomos, tornando possível estabelecer a geometria da molécula através da busca e poda das estruturas não viáveis, ou seja o algoritmo é um procedimento computacional que traça um caminho de entrada e saída na construção, sendo este um grafo ele percorre seus vértices e arcos e vai eliminando caminhos, até chegar na solução adequada do problema.

Exemplo de algoritmo *branch and prune*

- 1º) Parâmetro de entrada, um nó e um nível da árvore;
- 2º) Calcula os nós filhos, do nó atual e respeita as restrições das distâncias conhecidas;
- 3º) Cada nó filho realiza nova busca recursivamente;

4<sup>o</sup>) A busca acaba quando não existe mais nós.

Algoritmo *Branch – Prune* (galho e poda, em inglês), é uma estratégia para busca e se tratando de átomos, verifica a distância entre três átomos até um quarto átomo, anota as possíveis posições para esse quarto átomo e busca definir uma boa ordenação, que são geralmente usadas para resolver problemas de restrição, onde apresenta buscas exaustivas relacionadas às suas ramificações (galhos) e poda, então as soluções inviáveis (*prune*). O algoritmo é desenvolvido através de uma árvore formada durante a busca pela solução exata, onde cada nó demonstra uma solução parcial do problema e cada ramo dessa árvore mostra um conjunto de possíveis soluções, onde avalia todas as soluções viáveis considerando as restrições do problema. No caso, em uma árvore de busca, a poda é a remoção das soluções inviáveis, sem precisão, ou seja, a retirada das partes que não fornecem informações adequadas.

O algoritmo *Branch– and–Prune* (BP) representa um espaço de busca que é constituído a partir das possibilidades de posições para cada átomo de uma cadeia principal de uma molécula onde ocorre uma busca em profundidade e com ramificações na qual tem algumas restrições, o que faz acontecer a eliminação das soluções inviáveis através da poda [19].

---

## Geometria das Moléculas

---

A geometria relaciona-se com a química, quando esta determina a forma das moléculas, a polaridade, o ângulo formado entre os elementos, observando-se níveis eletrônicos, ligantes entre os átomos, a força da atração dos ligantes e dependendo da distância entre os átomos, onde os mesmos seriam os vértices e as ligações seriam as arestas, representamos em forma de grafos essas estruturas moleculares, formando assim a molécula e caracterizando suas propriedades. As moléculas mantêm determinada distância, a ponto de permanecerem unidas através de forças intermoleculares, que auxiliam para estabelecer uma ligação covalente, onde essas forças podem ser dipolo induzido, dipolo-dipolo ou ligação de hidrogênio.

A arrumação dos átomos em uma determinada posição é estabelecida por meio de uma distância adequada que minimiza a energia dos átomos, gerando maior estabilidade da molécula, fazendo a ligação ficar mais coesa.

Assim, a geometria das moléculas oferece subsídios que podem solucionar questões de vida ou morte, pois as reações químicas ocorrem constantemente, em todos os organismos vivos. Como também nos processos industriais, já que vivem de transformações químicas, e só são possíveis se houver um rearranjo adequado das moléculas, aumentando a estabilidade, e assim, ocorrendo as transformações.

### 3.1 Geometria das moléculas e a relação com medicamento

Como vimos a GD é aplicada em diferentes áreas do conhecimento, mas atualmente, tem um grande destaque no cálculo de estruturas de moléculas em *3D*. O cálculo delas é importante, pois está intimamente ligada às funções dessas moléculas.

No setor farmacêutico, conhecer a estrutura das moléculas é fundamental para investigar as origens moleculares da atividade biológica dos fármacos, determinando os parâmetros que relacionam estrutura e atividade e aplicando esses fundamentos no planejamento racional dos fármacos (COHEN, BLANEY, ET al,1990).

Existem, atualmente, programas computacionais que dispõe de ferramentas e de banco

de dados que realizam análise das propriedades e atividade biológica das moléculas com o intuito de descobrir e criar novos medicamentos [1].

A atividade farmacológica funciona no modelo de chave-fechadura, em que as moléculas dos compostos ativos no organismo seriam chaves que se interagiriam com macromoléculas do próprio organismo (bioreceptores), que seriam as fechaduras (BARREIRO, 2001).

Desse modo, conhecendo a natureza funcional das moléculas de um fármaco, é possível antecipar, prever os efeitos dessas substâncias no organismo, o que não é tarefa fácil. Um dos métodos mais eficazes é por meio da RMN (Ressonância Magnética Nuclear), que permite maior precisão em termos de distâncias e ângulos de torções [2].

## 3.2 Estruturas moleculares

As estruturas moleculares são feitas ligando formas geométricas que são usadas na representação dos átomos e hastes que são as arestas ou grafos, onde temos o desenho de uma ligação química [19].

Atualmente para o desenho tridimensional de uma molécula utiliza-se softwares computacionais, que são desenvolvidos a partir de algoritmos específicos, logo após sintetiza-se em laboratório para que possa estudar de forma mais detalhada suas propriedades e desenvolver novas substâncias que podem ser usadas como princípio ativo de um medicamento, ou mesmo outras coisas que podem alterar o nosso futuro [18].

Dentre várias modelagens computacionais podemos ter a síntese de músculos artificiais para uma prótese, devido a uma amputação de um membro, uma enzima de prevenção ou tratamento de doenças degenerativas, moléculas que guardam informações e potencializam a velocidade de processamento dos computadores, etc.

Na construção de uma molécula a matemática está presente, pois na teoria de repulsão dos pares de elétrons da camada de valência, determina-se uma distância, na qual deve ser a maior possível, formando o maior ângulo de separação possível entre duas ligações químicas, com o objetivo de diminuir a sua energia potencial, tornando a molécula estável.

Dentre as estruturas moleculares temos a molécula da vida, um modelo tridimensional construído a partir de dados experimentais, onde foi construída uma estrutura com duas cadeias helicoidais, que se enrolam em torno do mesmo eixo e serve para explicar o mecanismo de cópia do material genético.

Portanto a modelagem computacional das moléculas gera uma economia de tempo e dinheiro, e permite trabalhar com moléculas selecionadas e de interesse na qual é possível desenvolver fármacos, diminuindo os custos do mesmo, tornando o processo viável e útil, pois cria a estrutura molecular desejada, modifica o pH do meio se necessário e em uma modelagem computacional pode se estudar a estrutura completa da molécula, melhorar algum aspecto, aumentar a eficácia e produzir o que se deseja, minimizando qualquer margem de erros, pois ao analisar os parâmetros geométricos da molécula, como comprimento de ligação e ângulo formado, teremos uma estrutura mais precisa ou seja, com alto grau de precisão [3].

### 3.3 Formação das moléculas

A geometria molecular é uma forma de representar de maneira espacial as ligações covalentes de uma fórmula química, mostrando como os átomos se distribuem em torno do átomo central, quando essa molécula tem mais de dois átomos, atendo a teoria de repulsões dos pares eletrônicos.

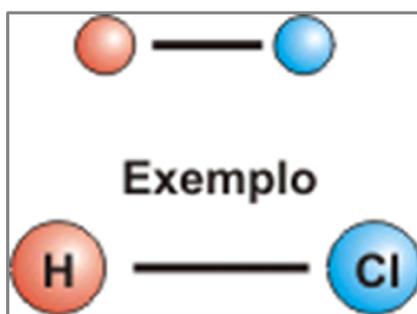
Na sua busca pela estabilidade, os átomos se afastam uns dos outros estabelecendo uma distância e um ângulo na qual a molécula fique o mais coesa possível.

Existem moléculas de apenas dois átomos até moléculas com centenas de átomos, com formatos muito simples até muito complexos.

Exemplos de alguns formatos planos simples:

- formato linear

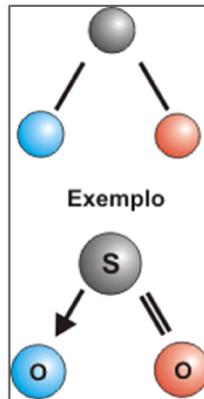
Fig. 3.19: Fórmula estrutural do HCl



Fonte: <https://www.alfaconnection.pro.br/fisica/moleculas/estrutura-molecular/geometria-das-moleculas/>

- formato angular

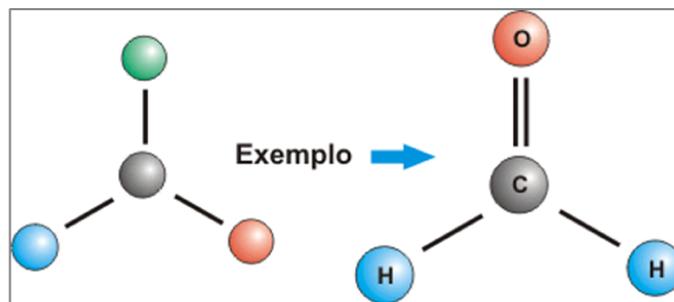
Fig. 3.20: Formatos angulares de moléculas



Fonte: <https://www.alfaconnection.pro.br/fisica/moleculas/estrutura-molecular/geometria-das-moleculas/>

- formato trigonal plano

Fig. 3.21: Formatos Trigonais planos de moléculas

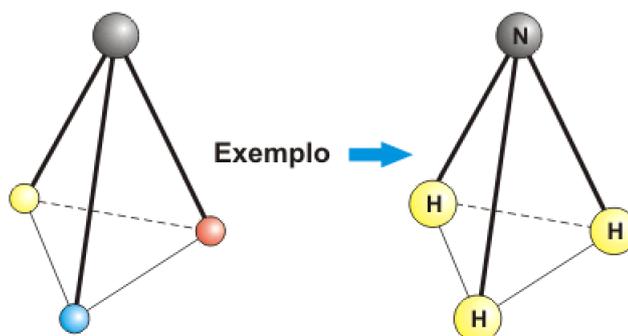


Fonte: <https://www.alfaconnection.pro.br/fisica/moleculas/estrutura-molecular/geometria-das-moleculas/>

Exemplos de alguns formatos espaciais simples:

- formato piramidal

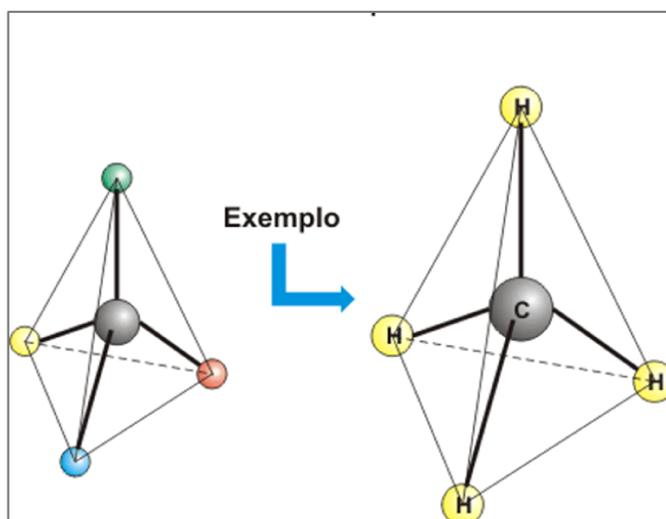
Fig. 3.22: Formatos piramidais de moléculas



Fonte: <https://www.alfaconnection.pro.br/fisica/moleculas/estrutura-molecular/geometria-das-moleculas/>

- formato tetraédrico

Fig. 3.23: Formatos tetraédricos de moléculas



Fonte: <https://www.alfaconnection.pro.br/fisica/moleculas/estrutura-molecular/geometria-das-moleculas/>

De acordo a disposição das moléculas, é possível descobrir várias propriedades das substâncias, além da possibilidade de produção de medicamentos. Essa geometria também pode ser determinada com base na repulsão de elétrons de um átomo em sua camada mais externa, onde a distância entre os pares de elétrons em torno do átomo central se repelem o tempo todo em seus vários tipos de ligações (simples, duplas, triplas ou dativas).

Na Geometria das Moléculas, verifica-se também a polaridade de uma substância e o momento dipolar, que pode ser determinado em função do ângulo existente entre o átomo central e os seus ligantes.

Ao estabelecer a união entre os átomos e verificar a sua estabilidade, é necessário mantê-las o mais afastado possível, devido à grande repulsão das cargas.

Portanto, de acordo a geometria e a polaridade, forma-se o desenho de molécula e assim pode-se calcular seu momento dipolar através da regra do paralelogramo. De acordo a estrutura adotada por uma molécula, sua intensidade na ligação pode ser maior ou menor e isso determina ponto de fusão (PF), ponto de ebulição (PE), o que faz com que o elemento tenha um estado de agregação de uma molécula. Uma molécula de determinada substância pode se misturar e dissolver algo, dependendo de sua polaridade, onde polar dissolve polar e apolar dissolve apolar.

Na Química Orgânica, existem muitas funções orgânicas que apresentam fórmulas moleculares, em alguns casos iguais, mesmo sendo funções diferentes (isômeras). O que difere é a sua fórmula estrutural e, nesse caso, é necessário determinar essa estrutura calculando a distância entre os elementos em torno de um átomo central e com isso, deve-se saber qual a geometria da molécula, observando a interpenetração dos átomos, vencendo as forças de repulsão núcleo-núcleo e eletrosfera-eletrosfera. Essa interação pode ser calculada usando a fórmula da Geometria Analítica:

$$D_{A, B} = \|B - A\| = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}, \text{ sendo } A = (x_1, y_1) \text{ e } B = (x_2, y_2).$$

Segundo (LAVOR, 2011) é necessário enumerar todas as possíveis posições do átomo, a fim de calcular a distância com melhor precisão. Também através da interpenetração dos átomos e o uso de recursos computacionais, por meio de um par de distâncias conhecidas, é possível prever as outras distâncias e encontrar as posições desconhecidas,  $x_1, x_2, \dots, x_u$ .

No problema molecular da geometria das distâncias (PMGD), temos  $n$  átomos e suas respectivas distâncias dados por  $x_{i,1}; x_{i,2}; x_{i,3}$ , com  $x_{i,k} \in \mathbb{R}$  ( $k = 1, 2, 3$ ), onde  $i$  está em  $\mathbb{R}^3$  e  $i \in (1, 2, \dots, n)$ . Já que se conhece a distância dos  $n$  átomos, podemos encontrar qualquer outra distância não conhecida com a fórmula.

$$d_{i,j} = \|x_i - x_j\|.$$

Porém, conhecer a distância não é suficiente, pois é necessário estabelecer a geometria da molécula, para que a mesma possa ser estudada de maneira mais objetiva, então torna-se interessante descobrir a posição dos  $n$  átomos no espaço  $\mathbb{R}^3$ . Nas distâncias podem conter erros e portanto usa-se cotas inferiores e superiores para estas distâncias, de modo que:

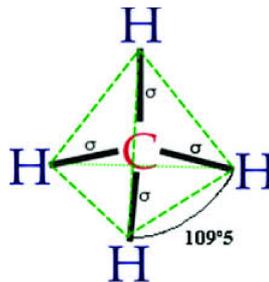
$$l_{i,j} \leq \|x_i - x_j\| \leq u_{i,j} \text{ sendo que } (i, j) \in S$$

Essas distâncias entre os pares de átomos de uma molécula podem ser encontradas

através dos ângulos de ligações e ressonância magnética nuclear (RMN) e no caso a determinação da molécula trabalha-se com duas possibilidades: conhecendo todos os pares de distâncias interatômicas ou com um conjunto onde não se conhece todas as distâncias.

O conjunto de distâncias não é preciso, pois é encontrado através de experimento usando RMN (Ressonância Magnética Nuclear) estimativas teóricas SIT (2010).

Fig. 3.24: Molécula do metano

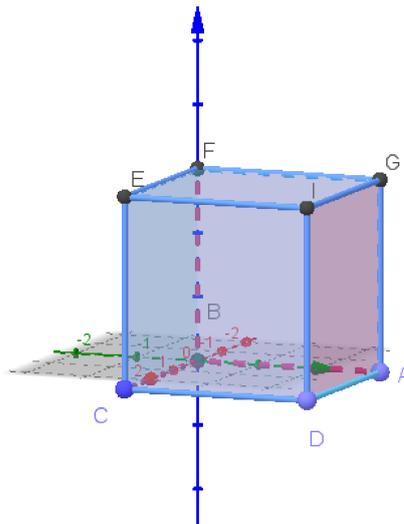


Fonte: <https://pt.wikipedia.org/wiki/Metano>

Na geometria molecular do metano  $\text{CH}_4$ , por exemplo, imaginemos que o átomo de carbono ocupe o centro do tetraedro e os vértices sejam ocupados pelos átomos de hidrogênio, e usando a geometria analítica podemos encontrar o ângulo.

Para determinar o ângulo matematicamente, basta supor um sistema de coordenadas no espaço, criar arbitrariamente medidas de arestas de um cubo com vértices na origem em  $x$ , em  $y$  e em  $z$ .

Fig. 3.25: Cubo



Dados os vértices:

$$B = (0, 0, 0), D = (a, a, 0), E = (a, 0, a), G = (0, a, a)$$

A distância entre dois vértices de lados opostos do cubo, passando pelo interior do mesmo, forma uma diagonal, onde os vértices são ocupados por átomos de hidrogênio e o carbono se encontra no centro do cubo  $I = \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right)$ .

Sendo os vetores:

$$\begin{aligned} v &= IG = \left(-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right) \\ u &= ID = \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, -\frac{a}{2}\right) \end{aligned}$$

Para encontrar o ângulo entre as valências do carbono, basta utilizar a fórmula do produto escalar entre os vetores  $u$  e  $v$ .

$$\cos \theta = \frac{v \cdot u}{\|u\| \cdot \|v\|}$$

Temos que:

$$\begin{aligned} v \cdot u &= -\frac{a^2}{4} \\ |v| &= \frac{a\sqrt{3}}{2} \\ |u| &= \frac{a\sqrt{3}}{2} \end{aligned}$$

Substituindo as grandezas  $\|v\|$  e  $\|u\|$ , na fórmula de  $\cos \theta$ , temos:

$$\begin{aligned} \cos \theta &= \frac{-\frac{a^2}{4}}{\frac{a\sqrt{3}}{2} \cdot \frac{a\sqrt{3}}{2}} \\ \cos \theta &= \frac{-\frac{a^2}{4}}{3a^2} \\ \cos \theta &= -\frac{1}{3} \end{aligned}$$

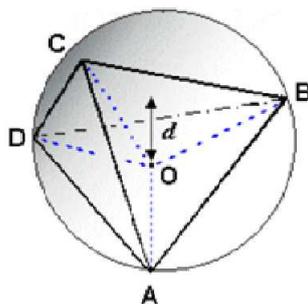
Logo,  $\theta = 109^\circ 28'$ .

#### A geometria das moléculas

Em um tetraedro regular, no caso a forma geométrica da molécula do metano ( $\text{CH}_4$ ), que apresenta geometria tetraédrica sendo substância apolar, temos nos seus vértices átomos de hidrogênio (H) e no seu interior o átomo de carbono (C) e sendo esse tetraedro inscrito em uma esfera de raio  $r$  e centro  $O$ .

No ponto central ( $O$ ), temos o carbono (C).

Fig. 3.26: Tetraedro regular inscrito em uma esfera



Fonte: [https://www.researchgate.net/figure/Figura-13-Tetraedro-regular-inscrito-em-uma-esfera-de-raio-r-e-centro-O\\_fig3\\_277920698](https://www.researchgate.net/figure/Figura-13-Tetraedro-regular-inscrito-em-uma-esfera-de-raio-r-e-centro-O_fig3_277920698)

A distância entre os lados de um tetraedro e um ponto em seu interior equidistante aos vértices é igual a  $\frac{1}{3}$  da distância entre os vértices e este ponto, então podemos analisar que esse tetraedro pode ser dividido em 4 tetraedros irregulares entre si, onde:

$$V_{ABCD} = \frac{1}{3} \cdot \text{área da base} \cdot (r + d) \text{ e } V_{ABCD} = 4 \cdot V_{CBDO}$$

$$\text{Enquanto o volume } V_{CBDO} = \frac{1}{3} \cdot \text{área da base} \cdot d, \text{ logo: } V_{ABCD} = V_{CBDO}$$

$$\frac{1}{3} \cdot \text{área da base} \cdot (r + d) = 4 \cdot \frac{1}{3} \cdot \text{área da base} \cdot d$$

$$r + d = 4d$$

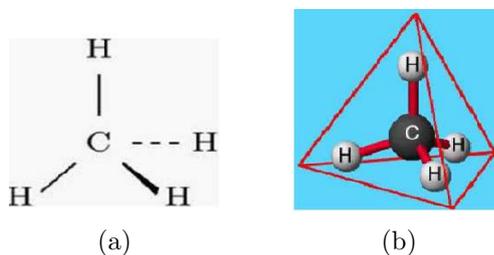
$$r = 4d - d$$

$$r = 3d$$

$$d = \frac{r}{3}$$

A geometria de uma molécula, ou seja, a disposição espacial dos átomos na molécula torna mínima sua energia, fazendo diminuir as repulsões na molécula.

Fig. 3.27: Formas de representação da molécula de metano



Fonte: <https://educacao.uol.com.br/disciplinas/quimica/geometria-molecular-distribuicao-espacial-dos-atomos-em-uma-molecula.htm>

### 4.1 Ressonância Magnética e aplicações

O problema de estimar a estrutura completa da molécula, determinando a posição no espaço de todos os átomos que a compõem, é chamado de Problema de Geometria de Distâncias Moleculares – PGDM (do inglês, *Molecular Distance Geometry Problem* – MDGP) e formulado, tradicionalmente, como um problema de otimização contínua (Silva, 2008).

Em 1953, com a descoberta da estrutura em 3D das moléculas de ácido desoxirribonucleico (DNA) a partir do experimento fotográfico de uma molécula de DNA em raio x, foi possível criar um modelo da estrutura do DNA tal qual conhecemos hoje.

Uma das maneiras de obter a estrutura 3D de uma molécula de proteínas é através de experimentos de Ressonância Magnética Nuclear (RMN). Como esse procedimento fornece apenas distâncias entre átomos próximos, o problema é como utilizar essa informação para obter a posição de todos os átomos da molécula, como veremos a seguir.

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é um ótimo meio para analisar e descobrir uma substância orgânica, já que por meio do salto quântico, um elétron absorve energia ao saltar para um nível mais externo e libera ao voltar para o meio interno. Nessa movimentação, a orientação do *spin*, número quântico relacionado à rotação do elétron, pode alinhar, gerando o magneto.

Nesse magnetismo, percebe-se o número de isótopos de determinado elemento. São analisados se esses elementos estão livres ou cercados e são determinadas sua intensidade e as ligações laterais [4].

A RMN é a maneira mais importante para a demonstração de uma fórmula estrutural de uma molécula, pois detecta muitos núcleos, em especial carbono (C) e hidrogênio (H), que formam o esqueleto de Química Orgânica (hidrocarbonetos) através do método espectroscópico.

A ressonância magnética nuclear acontece quando é produzido um campo magnético externo aos elétrons não pareados, gerando, assim, um alinhamento.

Na física, a RMN é utilizada para determinação de cargas elétricas existentes dentro de diversas moléculas complexas, como polímero, proteínas, etc., e serve também para identificar

tumores no ser humano, auxiliando na medicina.

Na biologia, a RMN fornece detalhes do corpo humano, permite diagnosticá-lo por completo e controlar a evolução de alguma anomalia. Como nosso corpo é uma grande tabela periódica, entre os principais elementos da ressonância (C e H) está o hidrogênio, presente na água do corpo humano, e qualquer alteração em sua parte protonada pode ser convertida em imagem. Como o corpo humano é todo mapeado, é possível perceber qualquer variação, e após tal diferença, verifica-se o que há de patologia, e então estabelece um método de tratamento.

Para a indústria farmacêutica, serve para análise, garantindo um grande controle na qualidade dos produtos farmacêuticos.

Na matemática, essa análise da RMN pode ser apresentada por conjuntos pictogramas e comparação entre tecido sadio e tecido patológico.

## 4.2 Ressonância Magnética Nuclear (RMN) na matemática

Um campo magnético é como um grande imã, pois é capaz de exercer forças sobre cargas elétricas em movimento, sendo uma grandeza física vetorial cuja medida ocorre em tesla e se desenvolve promovendo o alinhamento de domínios magnéticos, onde as moléculas de hidrogênio do corpo humano ficam organizados de acordo esse campo. A ressonância magnética nuclear (RMN) promove uma interação com tudo aquilo que tem massa ou volume e ocupa lugar no espaço, e pode ser medida pela frequência da ressonância, fazendo um diagnóstico através de imagens obtidas do nosso corpo.

A matemática está presente em tudo que nos cerca e a medida de frequência oscila em torno de 0,02 Tesla a 3 Tesla e estas medidas são encontradas através de um dos quatro números quânticos, o *spin*, que por meio de sua orientação, determina diferenças entre o hidrogênio de um corpo normal, para um corpo com uma patologia.

O hidrogênio é um dos elementos mais abundante no tecido humano, uma vez que o corpo é uma verdadeira tabela periódica e o hidrogênio representa mais de  $\frac{2}{3}$  de tudo, pois nosso corpo tem em média 75% de água, cuja fórmula é  $H_2O$ . No caso para detectar algo através da ressonância magnética nuclear (RMN), usa-se o hidrogênio pois é um elemento que apresenta maior sensibilidade á ação dos campos magnéticos, que apresenta 2 componentes:

- Magnetização longitudinal - paralela ao eixo.
- Magnetização transversal – perpendicular ao eixo.

Após um pulso de radiofrequência ocorre o tempo 1 e o tempo 2, onde o tempo 1 é o tempo necessário para a magnetização retornar ao estado de equilíbrio e o tempo 2 é o tempo de magnetização transversa. ([http://www.mr\\_tip.com/tserv1.Php](http://www.mr_tip.com/tserv1.Php))

### 4.3 Proteínas

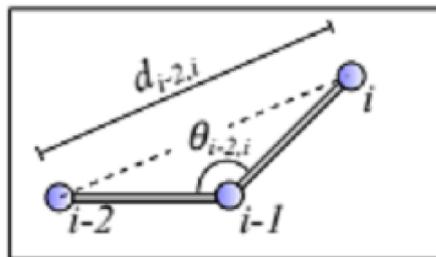
Uma proteína é uma sequência de aminoácidos, cuja ordem é  $N-C_\alpha-C$ , onde temos uma função amina, uma função ácido carboxílico e outra função que é variável.

A função amina é derivada de amônia ( $NH_3$ ), onde substitui um ou mais hidrogênios por um radical, já a função ácido carboxílico tem o grupamento  $-COOH$ .

O carbono  $\alpha$  é o carbono que está ligado a um grupo amina, a um grupo ácido, a um átomo de hidrogênio e a um radical  $R$  qualquer e apresenta dois eixos de rotação.

Dado o valor do ângulo formado entre os três átomos consecutivos, é possível calcular a distância  $D_{N,C}$ , onde nitrogênio (N) e carbono (C), as outras duas distâncias são conhecidas [18].

Fig. 4.28: Ângulo formado por três átomos consecutivos



Fonte: Lavor, 2017

As proteínas são moléculas grandes muito versáteis, têm várias funções biológicas e apresentam diferentes modelos de moléculas com uma geometria arquitetônica. Exemplos:

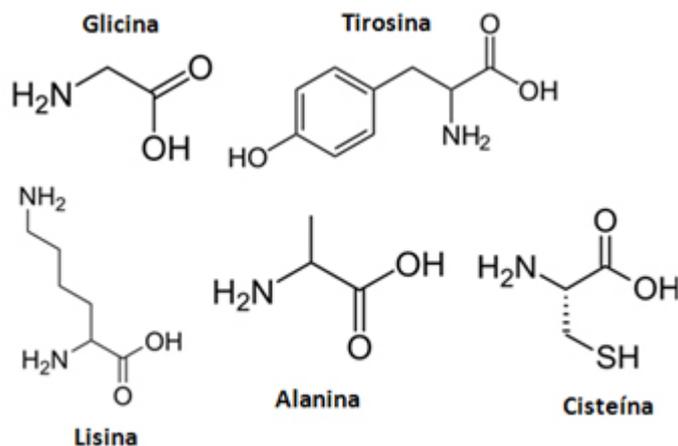
- Caseína fonte de aminoácido (leite);
- Anticorpos destruição de invasores patogênicos;
- Ferretina armazena ferro;
- Actina componente do músculo;
- RNA polimerase catalisa e síntese de RNA dependente do DNA;
- Queratina proteína fibrose resistente (cabelo, unhas, etc.).

A estrutura molecular de uma proteína reflete em sua função biológica e elas podem ter caráter hidrofílico (compacta e globular) ou hidrofílicas (forma de cordão) e, portanto, as globulares apresentam funções biológicas mais dinâmicas (transporte de gases-hemoglobina), enquanto as fibroses se relacionam com formação de tecidos, ossos, tendões, etc.

As proteínas apresentam massas moleculares extremamente grandes e número enorme de aminoácidos, ou seja, um conjunto de aminoácidos formam as proteínas e sua estrutura tridimensional depende da ordem que esses aminoácidos foram dispostos. A ligação covalente

permite a ligação dos aminoácidos, através de uma reação de condensação.

Fig. 4.29: Tipos de cadeias de proteínas



Fonte: [https://pt.wikibooks.org/wiki/Bioqu%C3%ADmica/Estrutura\\_e\\_classifica%C3%A7%C3%A3o\\_dos\\_amino%C3%A1cidos](https://pt.wikibooks.org/wiki/Bioqu%C3%ADmica/Estrutura_e_classifica%C3%A7%C3%A3o_dos_amino%C3%A1cidos)

O grupo carboxila de um aminoácido e o grupo de amina de outro aminoácido formam a proteína. As proteínas com sua Geometria Molecular (GM) podem apresentar estruturas primárias, secundárias, terciárias, quaternárias.

**Estrutura Primária** de uma proteína consiste em uma descrição de todas as ligações covalentes que ligam os aminoácidos dessa molécula [18].

**Estrutura Secundária** refere-se a uma secção arbitrária da cadeia polipeptídica a fim de descrever o arranjo espacial dos átomos da chamada Cadeia Principal (a ser definida e melhor estudada a posteriori), sem preocupar-se com os outros segmentos ou com as cadeias laterais [18].

**Estrutura Terciária** consiste no arranjo tridimensional de todos os átomos em uma proteína. Em comparação com as outras duas estruturas anteriores, esta se concentra na proteína como um todo como no modo como a proteína toda se desdobra e retorce no espaço tridimensional, e não em propriedades locais, como a determinação de  $\alpha$ -hélices [18].

**Estrutura Quaternária** de uma proteína se refere ao arranjo tridimensional de subestruturas independentes de proteína, ou seja, que não sejam interligadas mas pertençam à mesma molécula [18].

A história das proteínas começa no século *XVIII*, a partir da descoberta de que alguns componentes do mundo vivo coagulam a altas temperaturas e em meio ácido, como a clara de ovo (albúmen), o sangue, o leite, dentre outros. Substâncias com tais características foram denominadas albuminóides. Já no século *XIX*, descobriram que os principais componentes das células eram albuminóides.

A primeira sequência de aminoácido a ser determinada foi uma pequena proteína, a

insulina. Porém, para prever a estrutura de uma proteína, não é tarefa fácil, sendo a taxa de acertos algo em torno de 60%. Portanto, ainda é necessário muito estudo e pesquisa relacionados ao problema da geometria das distâncias moleculares (PGDM), pois somente a partir dessa distância é possível estabelecer mais precisão na localização adequada de um átomo.

Desse modo, podemos citar as seguintes hipóteses definidas para iniciar o cálculo da estrutura dessas proteínas:

*Hipótese 1: As distâncias fornecidas pela RMN estão associadas aos pares de distâncias conhecidos.*

*Hipótese 2: Todos os átomos da molécula da proteína cuja estrutura 3D queremos calcular são conhecidos.*

*Hipótese 3: Todos os átomos da molécula de proteína estão ligados a um outro átomo cuja distância é conhecida.*

Observe que a cadeia principal é o esqueleto da proteína, dando uma ideia da tridimensionalidade de sua estrutura.

Na geometria das proteínas, também se verifica os ângulos definidos por três átomos conhecidos ligados de forma consecutiva (figura 2.15).

## 4.4 Estrutura de uma proteína encontrada com o algoritmo Branch and Prune (BP)

Utilizando-se dos grafos e estabelecendo uma ordem de forma a atender as condições mínimas necessárias do Problema da Geometria das Moléculas (PGDM), torna-se possível estabelecer a fórmula de uma proteína, na qual é formada por um conjunto de aminoácidos, e através do algoritmo *branch and prune* (BP) é possível traçar um caminho na qual torna-se mais rápido a determinação da molécula, onde:

1º) Para o primeiro aminoácido, determina-se a sequência.

$$R_1 = \{N^1, H^1, H^0, C_\alpha^1, N^1, H_\alpha^1, C_\alpha^1, C^1\}$$

2º) Para o segundo aminoácido, temos:

$$R_2 = \{N^2, C_\alpha^2, H^2, N^2, C_\alpha^2, H_\alpha^2, C^2, C_\alpha^2\}$$

3º) Para um aminoácido genérico:

$$R_i = \{N^i, C_\alpha^{i-1}, C_\alpha^i, H^i, N^i, C_\alpha^i, H_\alpha^i, C^i, C_\alpha^i\}$$

4º) Para um último aminoácido da proteína, tem-se:

$$R_p = \{N^p, C_\alpha^{p-1}, C_\alpha^p, H^p, N^p, C_\alpha^p, H_\alpha^p, C^p, C_\alpha^p, O_1^p, C^p, O_2^p\}$$

Sendo  $p$  o número de aminoácidos genéricos, juntamente com o último aminoácido.

Então, devemos seguir as sequências citadas anteriormente  $R_1, R_2, R_i, R_p$ , de forma que átomo tenha um índice  $k = 1, \dots, |V_r|$ , onde  $V_r$  é encontrado a partir dos vértices que pertencem a  $V$ , porém devem ser reorganizados considerando-se todas as repetições que se fazem necessárias, e  $|V_r|$  é o número de elementos de  $V_r$ . Monta-se então uma tabela de ordenação para uma cadeia principal com 4 aminoácidos e com base nessa tabela pode-se calcular a distância

$d_{k,i}$  entre os vértices  $k$  e  $i$ , para  $k = i-3, i-2, i-1$ , de maneira que o algoritmo BP possa ser desenvolvido, então dessa forma, as distâncias  $d_{k,i}$  podem ser calculadas.

- 1º) Se  $\{k, i\} \in \mathbb{R}$ , representar uma ligação covalente, então  $k$  e  $i$  apresentam distância  $d_{k,i}$  conhecida.
- 2º) Se existirem duas ligações covalentes entre os vértices  $k$  e  $i$ , a distância será calculada a partir do Ângulo de ligação.
- 3º) Quando há 3 ligações covalentes entre  $k$  e  $i$ , calcula-se  $d_{k,i}^L$  para o ângulo de torção  $\omega_{i-3,i} = 0$  e  $d_{k,i}^U$  para  $\omega_{i-3,i} = \pi$ , para se obter o intervalo  $[d_{k,i}^L, d_{k,i}^U]$ , onde  $d_{k,i}^L$  e  $d_{k,i}^U$  são os extremos do intervalo, local mais provável de localizar os átomos, pois nem todas as distâncias são obtidas por RMN, portanto algumas distâncias são encontradas a partir de informações acerca da molécula e nesse intervalo teremos uma melhor ordenação [4].
- 4º) E no caso das distâncias entre os átomos serem iguais, são consideradas exatas e iguais a zero.

#### Estrutura de uma proteína

Uma proteína ao ser submetida a ressonância magnética nuclear (RMN), todos os átomos da molécula já são conhecidos, portanto determina-se os pontos  $x_i \in \mathbb{R}^3$ ,  $i, \dots, n$ , onde  $\|x_i - x_j\| = d_{ij}, \forall (i, j) \in E$ , onde  $E \subset \{1, \dots, n\} \times \{1, \dots, n\}$  e  $d_{ij}$  são os valores das distâncias, na qual se conhecem através da RMN e os átomos da molécula estão ligados a pelo menos outro átomo.

Os pontos  $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^3$  estão associados as posições dos átomos N, C $_{\alpha}$ , C da cadeia principal e também considera-se conhecidos os ângulos definidos por três átomos consecutivos e nesse caso pode-se determinar as distâncias  $d_{i-2, i}$  e também a distância entre os átomos com duas ligações covalentes já se conhecem.

As matrizes abaixo foram extraídas de [11, 18].

As coordenadas cartesianas  $(x_{i1}, x_{i2}, x_{i3})$  para cada átomo  $i$  na molécula é dado por:

$$\begin{bmatrix} x_{i1} \\ x_{i2} \\ x_{i3} \\ 1 \end{bmatrix} = B_1 \cdot B_2 \cdot \dots \cdot B_i \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \forall i, \text{ então ficando o primeiro átomo na origem,}$$

pode-se determinar a posição dos três primeiros átomos.

$$B_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad B_2 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & -d_{1,2} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$B_3 = \begin{bmatrix} -\cos \theta_{1,3} & -\text{sen} \theta_{1,3} & 0 & -d_{2,3} \cdot \cos \theta_{1,3} \\ \text{sen} \theta_{1,3} & -\cos \theta_{1,3} & 0 & d_{2,3} \cdot \text{sen} \theta_{1,3} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ e}$$

$$B_i = \begin{bmatrix} -\cos\theta_i & -\text{sen}\theta_i & 0 & -d_{i-1,i} \cdot \cos\theta_i \\ \text{sen}\theta_i \cdot \cos\omega_i & -\cos\theta_i \cdot \cos\omega_i & -\cos\omega_i & d_{i-1,i} \cdot \text{sen}\theta_i \cdot \cos\omega_i \\ \text{sen}\theta_i \cdot \text{sen}\omega_i & -\cos\theta_i \cdot \text{sen}\omega_i & \cos\omega_i & d_{i-1,i} \cdot \text{sen}\theta_i \cdot \text{sen}\omega_i \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Usando as matrizes acima e fixando os comprimentos das ligações  $d_{1,2}$  e  $d_{2,3}$  e o valor do ângulo  $\theta_{1,3}$  os três primeiros átomos são dados por:

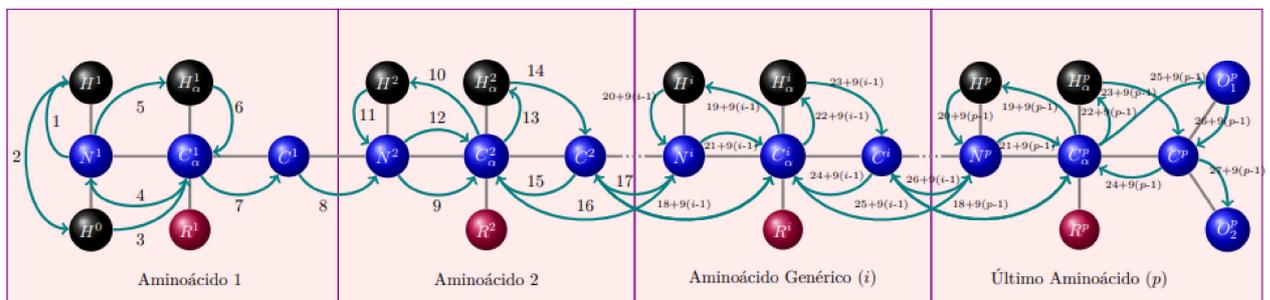
$$x_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad x_2 = \begin{bmatrix} -d_{1,2} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad x_3 = \begin{bmatrix} -d_{1,2} + d_{2,3} \cos\theta_{1,3} \\ d_{2,3} \text{sen}\theta_{1,3} \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Desta forma, as coordenadas cartesianas de todos os átomos da cadeia principal podem ser determinadas na molécula através de  $\cos(\theta_{i-2,i})$ ,  $\text{sen}(\theta_{i-2,i})$ ,  $\cos(\omega_{i-3,i})$  e do  $\text{sen}(\omega_{i-3,i})$ , onde o ângulo de torção assume apenas dois valores possíveis, dado por:

$$\text{sen}(\omega_{i-3,i}) = \pm\sqrt{1 - \cos^2(\omega_{i-3,i})}.$$

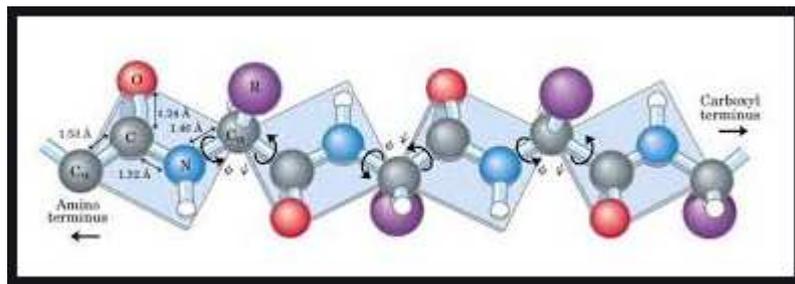
Tendo a cadeia principal da proteína dada pelo conjunto  $\{N, C_\alpha, C\}$  e o carbono alfa é o único que dá liberdade de rotação rígida para eles. Esta rigidez das ligações nos planos limitam o número de conformações possíveis para esta proteína. A partir desses resultados, defini-se 3 ângulos chamados de **ângulos de torção**, que são rotações possíveis ao redor das ligações peptídicas que fornecem grau de liberdade [18].

Fig. 4.30: Ordem atômica para uma cadeia principal de  $n = p + 2$  aminoácidos. Onde  $p$  é a quantidade de aminoácidos genéricos



Fonte: Costa, 2013

Fig. 4.31: Ordem atômica para uma cadeia de proteína



Fonte: SILVA, 2008

---

## Sugestão de Aplicação em sala de Aula

---

Nessa sequência, mostrando a prática educativa, de forma a ordenar o ensino de maneira articulada para que os objetivos sejam alcançados com êxito, onde se pretende mostrar que a partir da ressonância magnética nuclear (RMN), cria-se uma sequência, usando grafos, estabelecendo cálculos com algoritmos que levem a formação de uma molécula.

Fazendo um ajuste adequado, com atividade interligadas, qualquer aprendizado poderá se tornar efetivo e adequado, porém para isso precisa montar uma boa sequência didática, para então, desenvolver os planos de aula em prol do desenvolvimento da unidade que por sua vez detalha a sequência.

Em sala de aula, a geometria das moléculas pode instigar o aluno, propondo a pesquisa, a elaboração de modelos e de estruturas de moléculas de maneira interdisciplinar com a Matemática, a Química, a Biologia, intercalando, quando possível, o conteúdo com o cotidiano.

A geometria das distâncias está presente em praticamente tudo, e quando passamos a ter contato com esse assunto, enxergamos a sua importância, criando-se uma motivação intrínseca que nos permitirá viajar no conteúdo, uma vez que podemos analisar as enzimas, relacionando chave substrato, catalisando algumas reações, promovendo resultados com velocidades excelentes que geram processos de cura de algumas anomalias e lucros em processos industriais.

Na química, percebendo as estruturas tridimensionais das moléculas, o seu encaixe perfeito e a possível descoberta de medicamentos que possam ser usados no combate e controle de algumas doenças; na Matemática, determinando a posição e a área de alcance de alguns sinais com uso de roteadores.

### 5.1 Sequência didática

Para este trabalho, a sequência didática ou conjunto de exercícios com o objetivo de explorar o ensino da estrutura de uma molécula, relacionando-a com a geometria, de maneira a tornar a aprendizagem mais significativa, trocando saberes entre discente e docente.

Uma boa sequência didática, deve escolher o tema determinando os objetivos a serem alcançados, estabelecendo o tempo necessário, os materiais a serem utilizados e a forma de avaliação a ser aplicada para a melhor verificação do nível de aprendizagem.

Os discentes geralmente apresentam muita dificuldade para aprender matemática e química em diversas modalidades de ensino, pois muitas vezes falta dar significado aquilo que estão abordando, e é preciso usar também um pouco do lado lúdico. O conteúdo pode se tornar mais atraente, a aula fica mais dinâmica e a educação pode ser mais prazerosa.

No século XIX, muitos químicos com o objetivo de estudar melhor uma estrutura molecular desenvolveram modelos em escalas e, com isso, sabendo a distância entre seus átomos, puderam encontrar o ângulo formado e estudar de forma mais clara a estrutura tridimensional de uma molécula (Carey, 2011).

### 5.1.1 Atividade proposta

Na busca de novos caminhos que facilitem o aprendizado do corpo discente a interdisciplinaridade é um meio importante com a interligação de conteúdos que fazem grande diferença pois quanto mais pessoas falarem do mesmo assunto, melhor ele será absorvido.

Disciplina: Matemática e Química

3º ano do ensino médio

**Tema:** Distância entre os átomos, ângulos formados e a geometria das moléculas.

<b>Conteúdo:</b>	Grafos Distância entre pontos Ângulo formado Geometria molecular
<b>Habilidades:</b>	Calcular distâncias Montar moléculas Analisar geometria molecular e polaridade
<b>Duração:</b>	5 aulas
<b>Organização da turma:</b>	grupos de 3 ou 4 alunos
<b>Objetivos:</b>	Trabalhar de forma interdisciplinar, contextualizada e atrativa

### Desenvolvimento

Montagem das estruturas moleculares determinando a geometria molecular, em seguida, exposição dos trabalhos para a turma.

1-Molécula de  $\text{CO}_2$

Fórmula estrutural  $\text{O} = \text{C} = \text{O}$ .

Uma molécula, duas ligações duplas e formato linear.

As formas geométricas dessas moléculas são respectivamente:

Tab. 1: Fórmulas

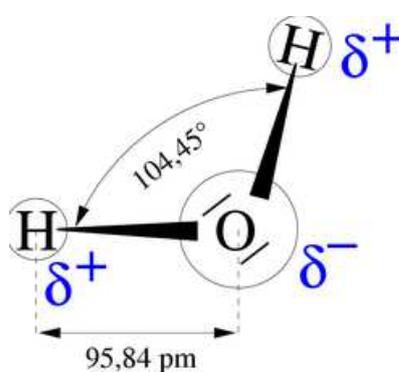
Fórmula	H <sub>2</sub> O	NH <sub>3</sub>	CH <sub>4</sub>
Ângulo	104°45'	107°	109°28'

angular, piramidal, tetraédrica.

Na química, usamos grafos para representação de uma forma estrutural de uma molécula, na qual os vértices são átomos e as arestas são as ligações covalentes entre eles. Exemplo:

- Molécula de água H<sub>2</sub>O [6]

Fig. 5.32: Molécula de água, seu ângulo e comprimento



Fonte: [https://pt.wikibooks.org/wiki/Bioqu%C3%ADmica/A\\_%C3%A1gua,\\_solvente\\_da\\_Vida](https://pt.wikibooks.org/wiki/Bioqu%C3%ADmica/A_%C3%A1gua,_solvente_da_Vida)

Geometria: angular

Ângulo: 104°45'

Polaridade: polar

4 nuvens eletrônicas e 2 ligantes

O comprimento da ligação, ou seja, a distância entre dois centros dos átomos ligantes, geralmente é feita através da difração de raios x, que é a técnica cristalográfica mais comum. Quanto maior o comprimento (distância), menor será a energia dessa ligação.

Exemplo:

Tab. 2

Molécula	Ligação entre C	Energia/ KJ·mol <sup>-1</sup>	Comprimento (pm)
Etano	C – C	345	153,51
Eteno	C = C	612	132,9

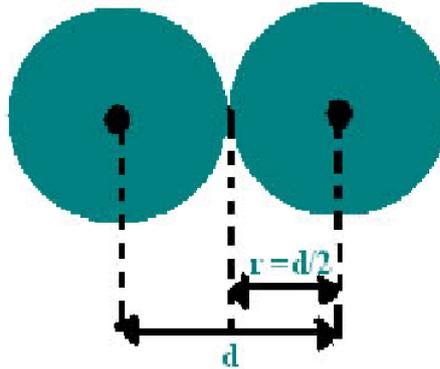
Fonte: [Http://www.iupac.org/goldbook/BT07005.pdf](http://www.iupac.org/goldbook/BT07005.pdf)

Para calcular o tamanho de um átomo ou de uma ligação entre dois átomos, considera-se o átomo como uma esfera, mede-se o raio, mas para isso, usa-se dois átomos iguais, pois a

medida de apenas um átomo não determina precisão, uma vez que a eletrosfera não tem um limite.

A medida é feita com um feixe de raios x, atravessando a amostra do material formado por íons ou átomos de um mesmo elemento químico, onde ocorre os desvios e a imagem extraída determina a posição dos núcleos dos átomos e portanto a distância entre eles [1].

Fig. 5.33: Ligação entre átomos iguais



Fonte: <<https://mundoeducacao.bol.uol.com.br/quimica/raio-atomico-tamanho-atomo.htm>>

A distância entre 2 átomos iguais e vizinhos em uma substância sólida pode ser estimada calculando-se o dobro do raio de uma esfera, cujo volume seja igual ao volume por átomo do material para encontrar a distância entre os átomos vizinhos. Considere os dados a seguir:

$$\begin{aligned} d_{\text{Fe}} &= 7,86 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \\ \text{massa do átomo} &= 9,27 \cdot 10^{-26} \text{kg} \\ &= 9,27 \cdot 10^{-23} \text{g} \end{aligned}$$

Agora vamos calcular o volume do átomo, para podermos calcular o raio:

$$\begin{aligned} d_{\text{Fe}} &= \frac{m_{\text{Fe}}}{V_{\text{Fe}}} \\ 7,86 \text{ g/cm}^3 &= \frac{9,27 \cdot 10^{-23} \text{g}}{V_{\text{Fe}}} \\ V_{\text{Fe}} &= \frac{9,27 \cdot 10^{-23} \text{g}}{7,86 \text{ g/cm}^3} \\ V_{\text{Fe}} &= 1,18 \cdot 10^{-23} \text{cm}^3 \end{aligned}$$

Temos:

$d_{\text{Fe}}$  → densidade do ferro;

$m_{\text{Fe}}$  → massa do ferro;

$V_{\text{Fe}}$  → volume do ferro.

Como a densidade está em  $\frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$ , devemos converter a massa do ferro que está em Kg para g, e para isso basta multiplicar por 1000 ou  $10^3$ , pois  $1\text{Kg} = 1000\text{g}$ .

Ao calcularmos a distância entre os centros de dois átomos vizinhos, consideramos que esses estejam em contato, ou seja, suas superfícies se tangenciam em um ponto e a distância do centro de um deles até o ponto em que se encostam equivale a medida de um raio até o centro do outro átomo, o que significa dizer que precisamos descobrir a distância de 2 raios.

Como o volume da esfera é:

$$V = \frac{4}{3}\pi r^3 = 1,18 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^3 = \frac{4}{3}\pi r^3$$

Logo,  $r = 1,41 \cdot 10^{-8}\text{cm}$

E a distância entre dois átomos iguais vizinhos é estimada calculando o dobro deste raio, ou seja, a distância entre seus centros.

$$d = 2r$$

$$d = 2 \cdot 1,41 \cdot 10^{-8}$$

$$d = 2,82 \cdot 10^{-8}\text{cm}$$

$$\text{Ou } d = 2,82 \cdot 10^{-10}\text{m}$$

E como um angstrom Å é igual  $10^{-10}$  m, tem que  $d = 2,82\text{Å}$ .

## Tempo estimado

Duas aulas expositivas.

Duas aulas para a confecção das fórmulas estruturais.

Uma aula para apresentação e discussão.

## Considerações

Como vimos em seções anteriores, a geometria das distâncias tem diversas aplicações e tem um grande destaque no cálculo de estruturas de moléculas em 3D. O cálculo delas é importante, pois está intimamente ligada às funções das moléculas.

Conceitos como arestas, vértices, presentes no ensino da geometria, foram apresentados através da teoria dos grafos, onde é possível representar estruturas formadas pela relação entre esses elementos.

Nota-se, ainda, a matemática presente nas moléculas a partir do ângulo formado entre átomos ligantes, e assim, pode-se determinar a sua polaridade, ou seja, a sua estrutura geométrica.

Desse modo, a sugestão da sequência didática foi pensada no sentido de proporcionar que o aluno construísse o conhecimento através da experimentação, visualização das moléculas

em  $3D$ , associando o conhecimento da geometria molecular com formas geométricas conhecidas e fazendo uso do conhecimento matemático adquirido

---

## Considerações Finais

---

A geometria das distâncias moleculares é um tema de grande relevância, pois sua abrangência é muito extensa e multidisciplinar e apesar de novo já apresenta muitas aplicações indo desde situações corriqueiras à complexidade das proteínas.

A Matemática é uma ciência de grande utilidade e através de seus ramos, como os grafos, distâncias entre elementos, ângulos formados, teoria de repulsão de pares de elétrons, etc estabelece-se uma relação muito importante usando alguns algoritmos que melhoram ou encurtam caminhos, inclusive na produção de medicamentos, mas também tenta buscar soluções para problemas e mesmo com tudo isso ainda tenta melhorar o tempo gasto na realização de algumas tarefas já desenvolvidas.

Observar os grafos, estudar a sua base, nos permite analisar sequências, caminhos a serem percorridos, ter noção de áreas de alcance de uma torre de telefonia de celular por exemplo, estabelecer as fórmulas estruturais, torna o estudo mais atrativo permitindo assim aproximar o que parecia tão abstrato para o aluno em algo mais próximo de sua realidade.

Com esse trabalho pude perceber o quanto podemos relacionar as distâncias que em geral são contas aritméticas com a Química no que diz respeito à geometria molecular, compreendendo melhor suas estruturas, enxergando mais uma das aplicações dos grafos de maneira que o estudo da matemática possa apresentar mais sentido, podendo inclusive através dos algoritmos facilitar o estudo de alguns conteúdos de maneira a torná-los mais atrativos.

Como sabemos a ciência nunca está pronta e acabada, este trabalho sugere então um estudo mais aprofundado sobre alguns tópicos, tais como o alcance de um braço mecânico, a ressonância magnética nuclear, localização e alcance dos roteadores, etc. Portanto, aqui é apenas um começo pois as estruturas moleculares, a relação da geometria molecular com os medicamentos está longe de estarem prontas e sim tem muito a ser explorado em prol de um futuro melhor, pois nessa era tecnológica, as modelagens podem apresentar avanços grandiosos de relevância em praticamente tudo e criar modelos, estruturas de moléculas que serviriam para revolucionar a humanidade.

O livro um convite à geometria das distâncias de Lavor (UNICAMP, 2017) foi excelente como norteador desse trabalho, pois atenderam as expectativas, pois o livro trás abordagens com linguagem adequada e informação detalhada de acordo minha necessidade para desenvolvimento

desse trabalho, na qual deixo uma sequência didática, relacionando as disciplinas Química e Matemática de forma a aproximar mais os conteúdos encurtando a distância daquilo que se deve estudar com aquilo que para o discente parece abstrato, tornando a matéria mais atrativa.

---

## Referências Bibliográficas

---

- [1] BARREIRO, Eliezer J. **Sobre a química dos remédios e medicamentos**. Cadernos Temáticos de Química Nova na Escola. N° 3 – Maio 2001.
- [2] CARVALHO, Ivone. PUPO, Mônica T. BORGES, Áurea D. L. BERNARDES, Lílian S. C. **Introdução a modelagem molecular de fármacos no curso experimental de química farmacêutica**. *Quim. Nova*, Vol. 26, No. 3, 428 – 438, 2003.
- [3] COHEN, N. C., BLANEY, J. M., Humblet, C., Gund, P. & Barry, D. C. **Molecular modeling software and methods for medicinal chemistry**. *Journal Medicinal Chemistry*, Vol. 33, No. 3, 1990.
- [4] Costa, Virginia Silva da. **Definição de ordens nas cadeias laterais de proteínas para cálculos combinatórios de estruturas tridimensionais/** Virginia Silva da Costa – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2013.
- [5] Silva, Warley. Lavor, Carlile. and Ochiand, Luiz (2008). **Cálculo de estrutura de proteínas**. Simpósio Brasileiro de Pesquisa Operacional.
- [6] Lavor, Carlile. **Geometria das distâncias**. Unicamp, Campinas-SP 2014.
- [7] Lavor, Carlile. Maculan, Nelson. **Álgebra e Geometria no Cálculo de Estrutura Molecular**. 31 Colóquio de matemática, IMPA, Rio de Janeiro - RJ 2017.
- [8] CAMARGO, Valter Soares de. **Álgebra geométrica conforme e geometria de distância**. 2015.Tese (Doutorado em matemática aplicada) - Universidade de Campinas, Campinas, São Paulo, p.102. 2015.
- [9] SILVA, Luiz Paulo Moreira. **Elementos de uma esfera**. Brasil Escola. Disponível em: <<https://brasilecola.uol.com.br/matematica/elementos-uma-esfera.htm>>. Acesso em 20/07/2019.
- [10] SANTOS, Fabiana Nascimento. DA SILVA, Severino Domingos. **GRAFOS E SUAS APLICAÇÕES**. ediPUCRS, Porto Alegre - RS 2009.

- [11] LAVOR, C., LIBERTI, L., MACULAN, N. e MUCHERINO, A. “The discretizable molecular distance geometry problem”. Em *Computational Optimazation and Applications* 52 (2002).
- [12] K. Menger, Untersuchungen uber allgemeine Metrik, *Mathematische Annalen*, 100 (1928), 75 – 163.
- [13] L. Blumenthal, *Theory And Applications of Distance Geometry*, Oxford University Press, Oxford, (1953).
- [14] LOUREIRO, Antônio Alfredo Ferreira. **Grafos: Conceitos**. Disponível em: <[http://https://homepages.dcc.ufmg.br/loureiro/alg/091/paa\\_Grafos.pdf](http://https://homepages.dcc.ufmg.br/loureiro/alg/091/paa_Grafos.pdf)>. ACESSO EM 17/12/21.
- [15] Wallis, W. D. *A Beginner’s Guide to Graph Teory*. Birkhauser, 2007.
- [16] SOFFNER, Renato. *Algoritmos e programação em linguagem C*. São Paulo: Saraiva, 2015.
- [17] Fidalgo, Felipe Delfini Caetano. “Algoritmos para problemas de geometria molecular”. Dissertação de mestrado. UNICAMP – Campinas-SP, 2011.
- [18] Fidalgo, Felipe Delfini Caetano. “Dividindo e conquistando com simetrias em geometria de distâncias”. Tese de doutorado. UNICAMP-SP, 2015.
- [19] M. Souza. “Suavização hiperbólica aplicada à otimização de Geometria Molecular”. Tese de doutorado. COPPE - UFRJ, 2010.
- [20] <https://www.inf.ufsc.br/grafos/definicoes/definicao.html> ACESSO EM 20/ 01/ 21.