# III SIMPÓSIO DE EDUCAÇÃO DO TRIÂNGULO MINEIRO

Utilizando o software
ChemSketch® para demonstrar
estruturas espaciais de
compostos químicos

JOÃO RIBEIRO FRANCO NETO

Mestrando em Química – UFU

Orientadora: Profa. Dra. Rejane Maria Ghisolfi da Silva

2006

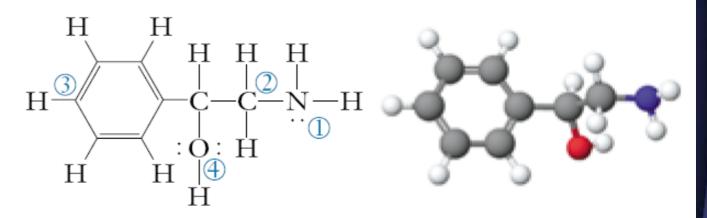
#### **Abstract**

Software ChemSketch® use for visualization of structures of chemical compositions, demonstrating his potentiality as pedagogic appeal in the chemistry classes, as well as the easiness that he presents in integrating with text editors in the construction of pedagogic materials.

### Visualização de objetos moleculares

Objetos moleculares: são as representações dessas partículas submicroscópicas, cujo meio de veiculação pode variar desde o papel, passando pelos conjuntos plásticos, isopor e madeira, chegando à tela do computador. (GIORDAN, 2005)

- Objetos moleculares podem ser vistos em livros didáticos e em artigos científicos, servindo de referência para designar uma molécula.
  - (e) ephedrine, a nasal decongestant1



<sup>1</sup>In these kinds of structural drawings, each intersection of lines represents a C atom.

WHITTEN (2004). General Chemistry – pg. 348)

integração de atividades de laboratório na aula em classe

uso de modelos concretos

uso de tecnologias como ferramentas de aprendizado

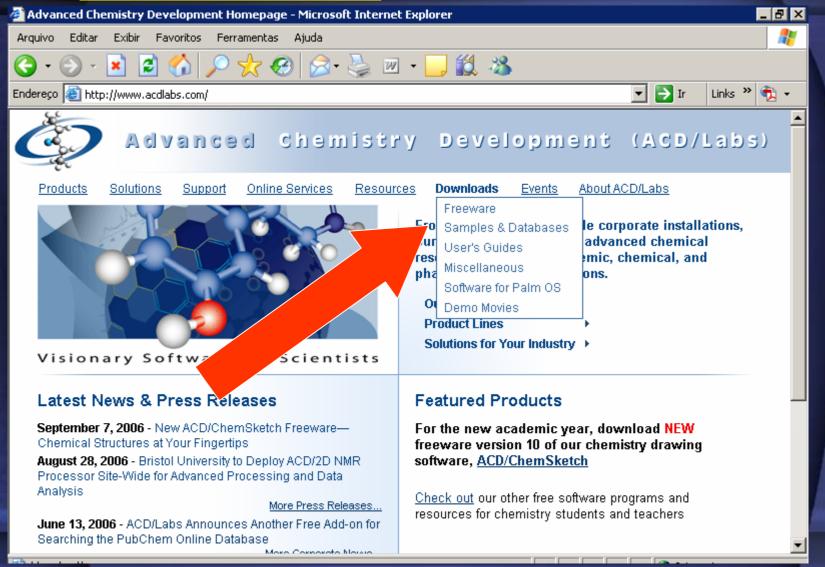
uso de modelos concretos juntamente com tecnologias como ferramentas de aprendizado

Abordagens instrucionais como apoio ao ensino de química

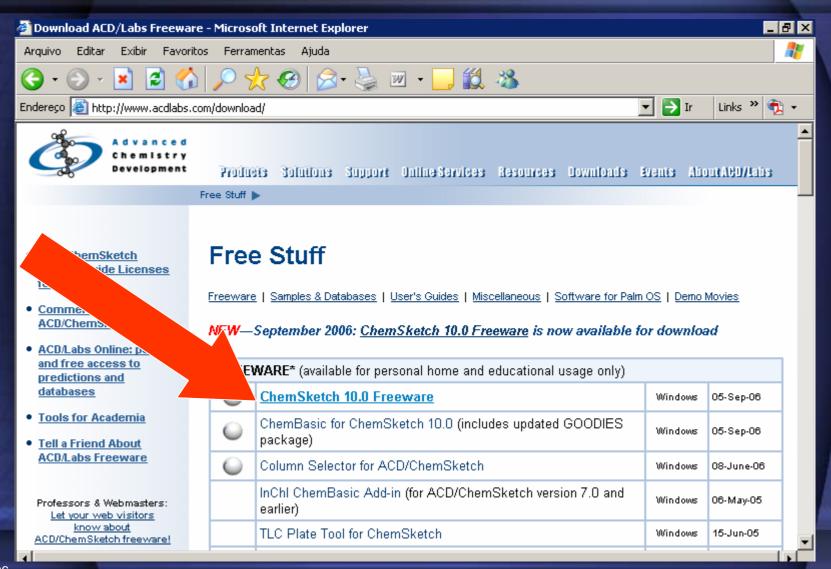
Baixando e instalando o software

- Chemsketch® é um software de desenvolvimento da Química Avançada. A empresa que o fez projetou para ser usado separadamente ou integrado com outras aplicações.
- Chemsketch é usado para desenhar estruturas químicas, reações e diagramas esquemáticos. Também pode ser usado para projeções em 3D.

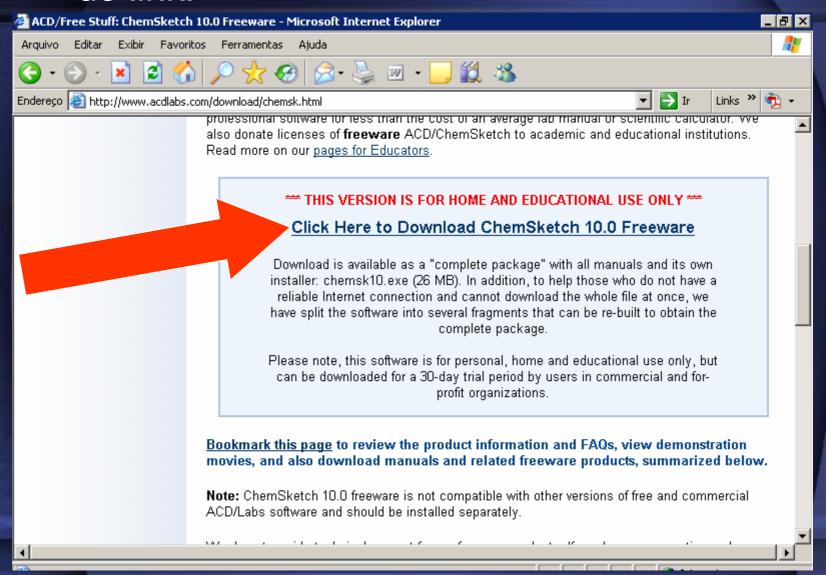
## Fazendo o download no site www.acdlabs.com



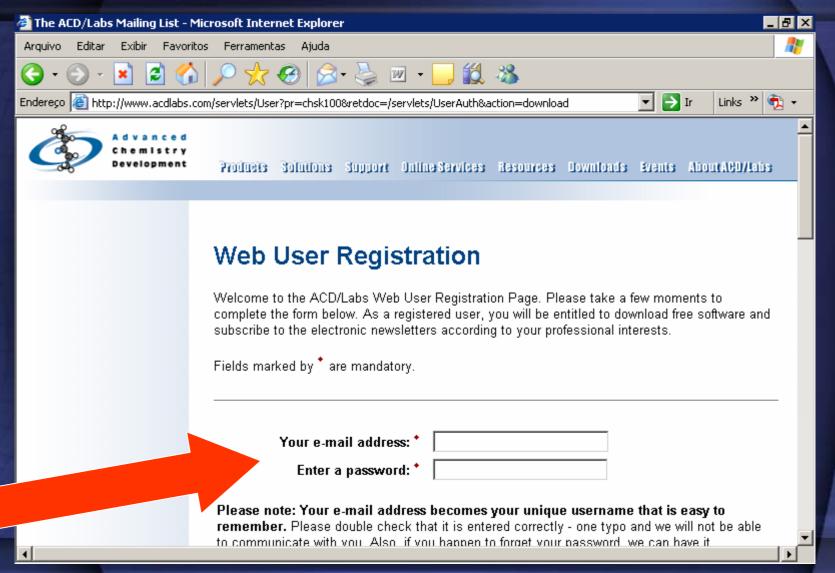
#### Clique no nome do software.



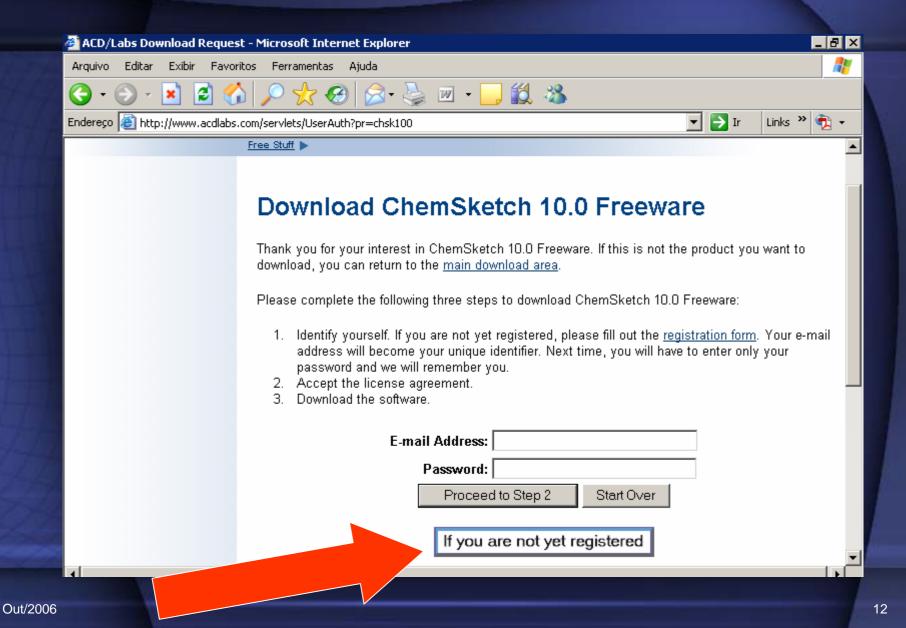
### Abrindo a próxima página, desça até o local do link.



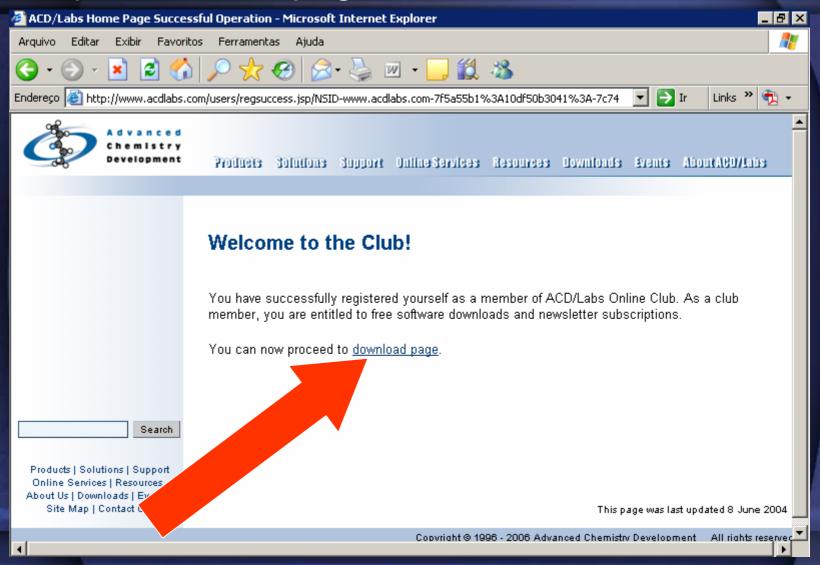
Fazendo o registro e submetendo o formulário.



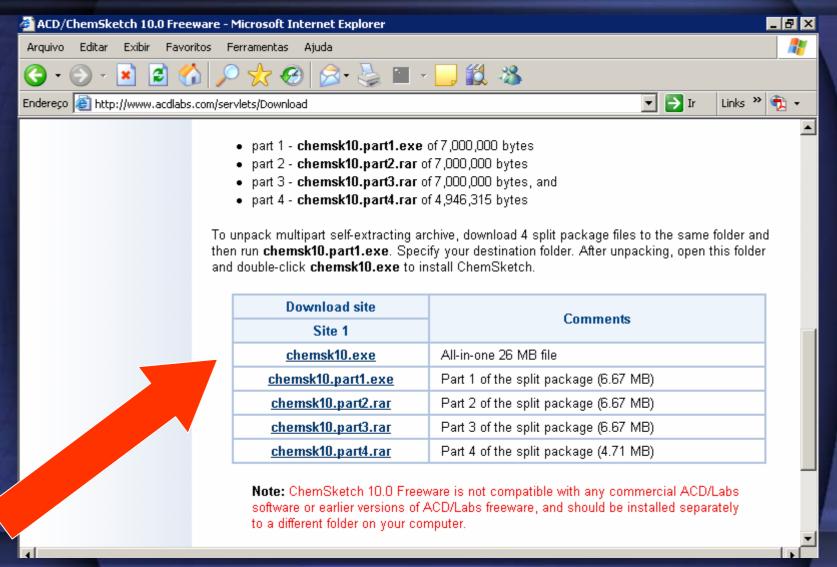
#### Criando um registro para baixar o software.



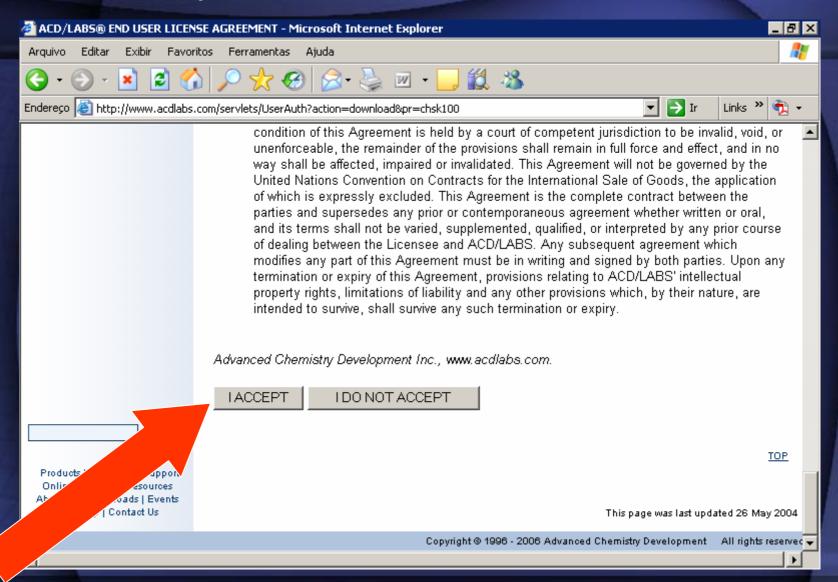
# Depois de efetuar o registro, clique no link para voltar à página.



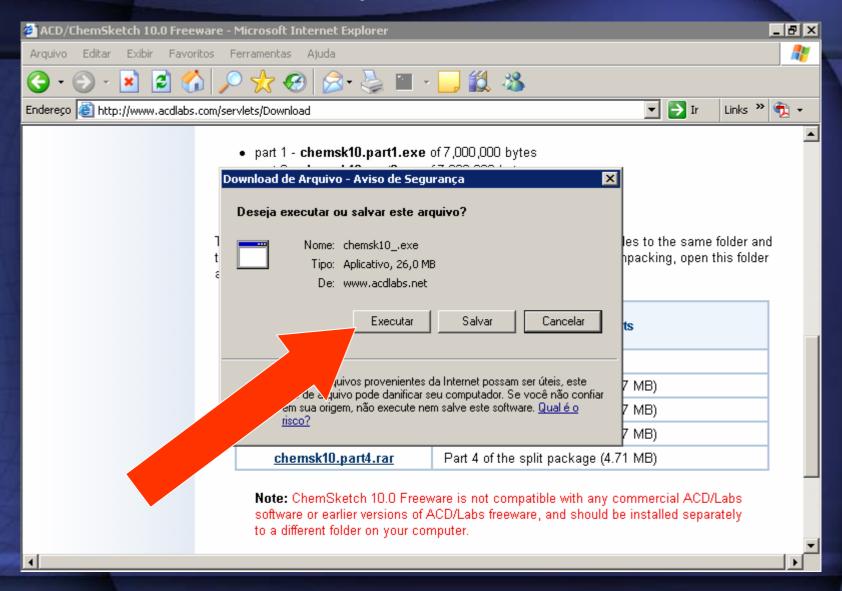
### Faça o download em um só arquivo ou em vários.



#### Aceite para efetuar o download.



#### Salvando o arquivo.



### Executando a instalação.

Execute o instalador **chemsk10.exe** no diretório em que foi gravado.







Copyright @ 1994-2005 Advanced Chemistry Development Inc. All Rights Reserved

> 110 Yonge Street, 14th floor, Toronto, Ontario, Canada M5C 1T4

Toll-Free: (800) 304-3988 Tel: (416) 368-3435 Fax: (416) 368-5596 http://www.acdlabs.com

#### Welcome to the ACD/Labs Software Web Setup Wizard

The Setup Wizard will extract ACD/Labs Software distribution package to your computer and run installation.

It is strongly recommended that you exit all Windows programs before running this Setup Wizard. Click Cancel to quit Setup and then close any programs you have running. Click Next to continue with the Setup.

WARNING: This program is protected by copyright law and international treaties.

Unauthorized reproduction or distribution of this program, or any portion of it, may result in severe civil and criminal penalties, and will be prosecuted to the maximum extent possible under law.

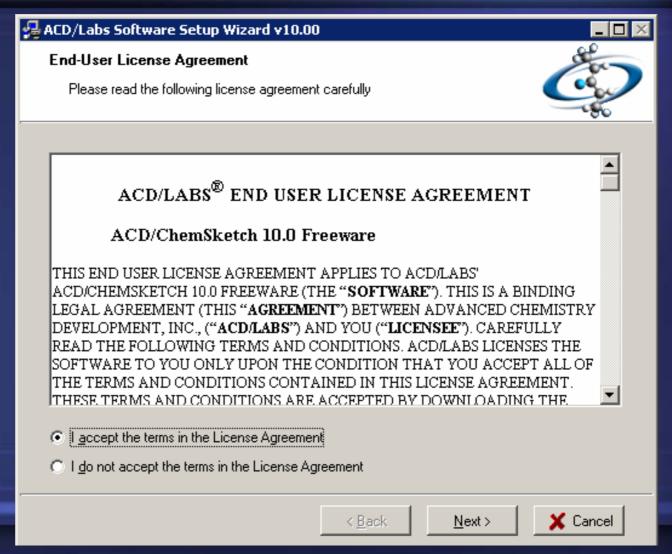
ACD/Labs Software, FREE, v10.00, Build: Aug/31/2006

< Back

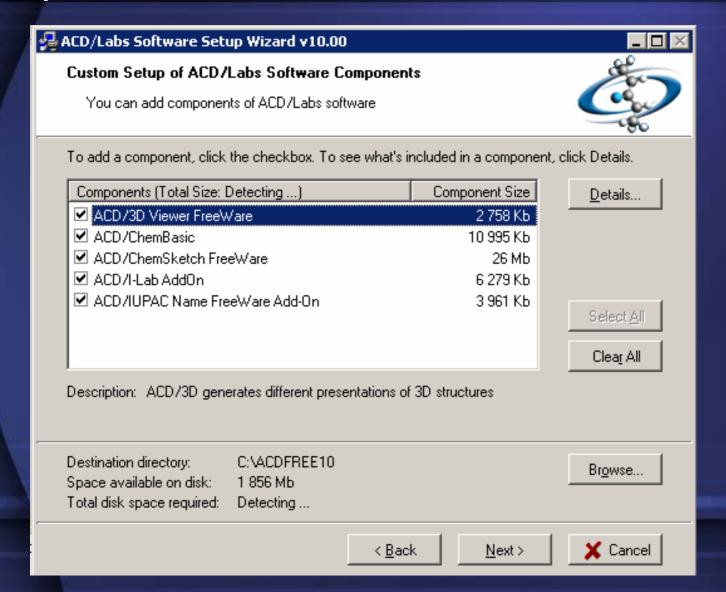
Next>



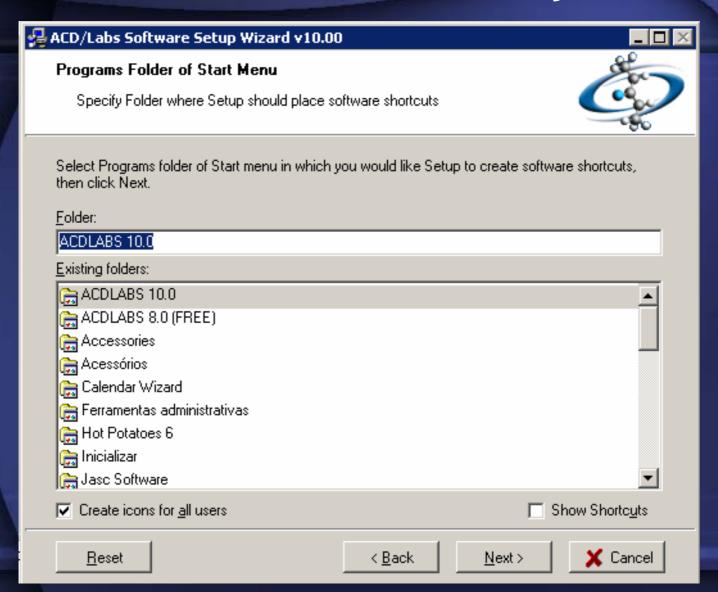
# Aceite para que a instalação seja realizada.



### Veja se todos estão escolhidos e clique para continuar.

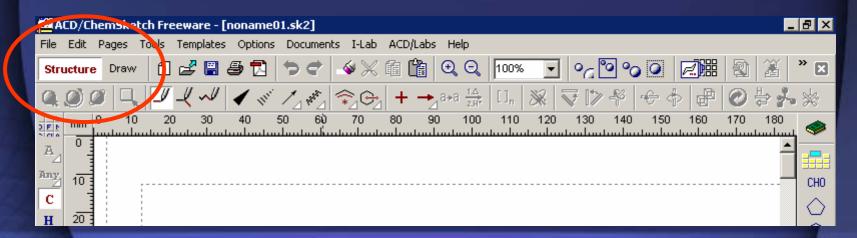


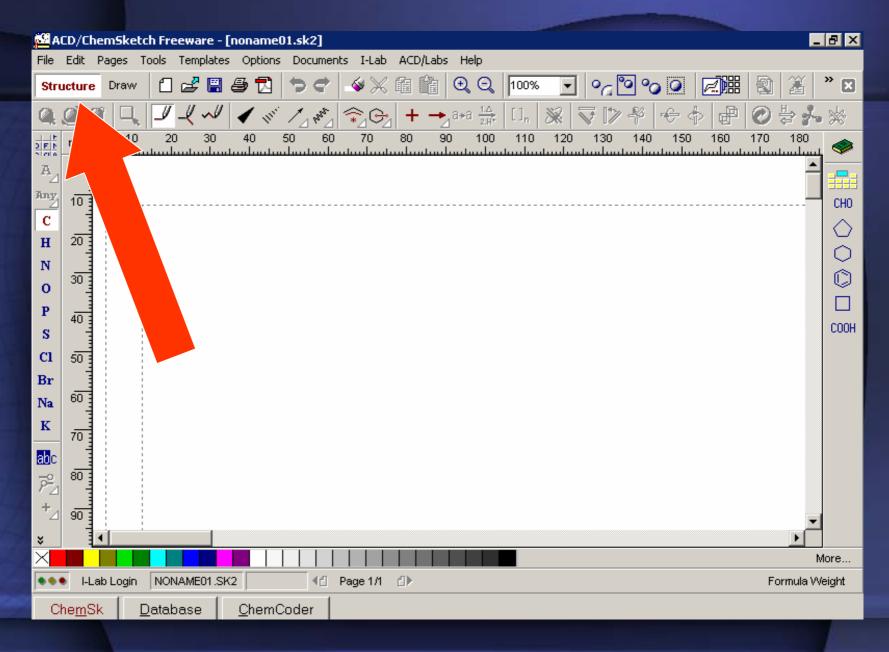
### Definindo o local da instalação.

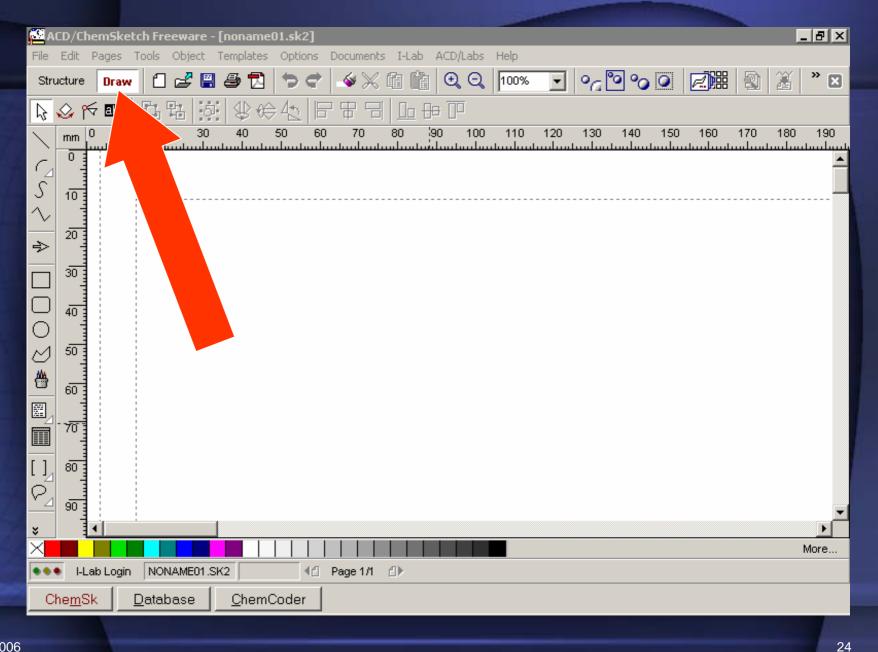


# Utilizando o software Chem&ketch

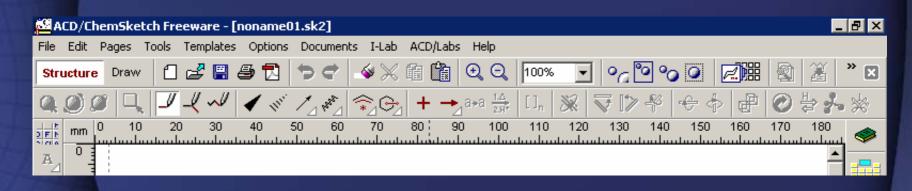
Quando você executar o ChemSketch® verá alguns comandos inativos. Eles poderão ser habilitados assim que você acionar o modo de trabalho (lado esquerdo superior): estrutura e desenho. Clique em cada um e veja as barras de ferramentas alterarem.

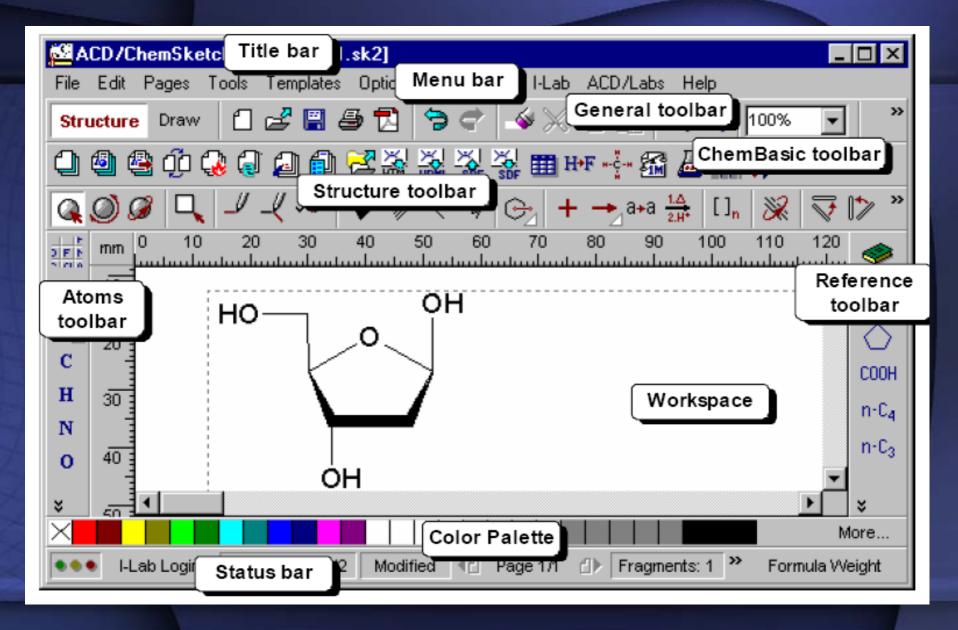






O Modo "estrutura" permite que o usuário desenhe as estruturas e reações além dos diversos sinais taquigráficos próprios da linguagem química. Abaixo, analisamos as barras que compõem o modo estrutura.

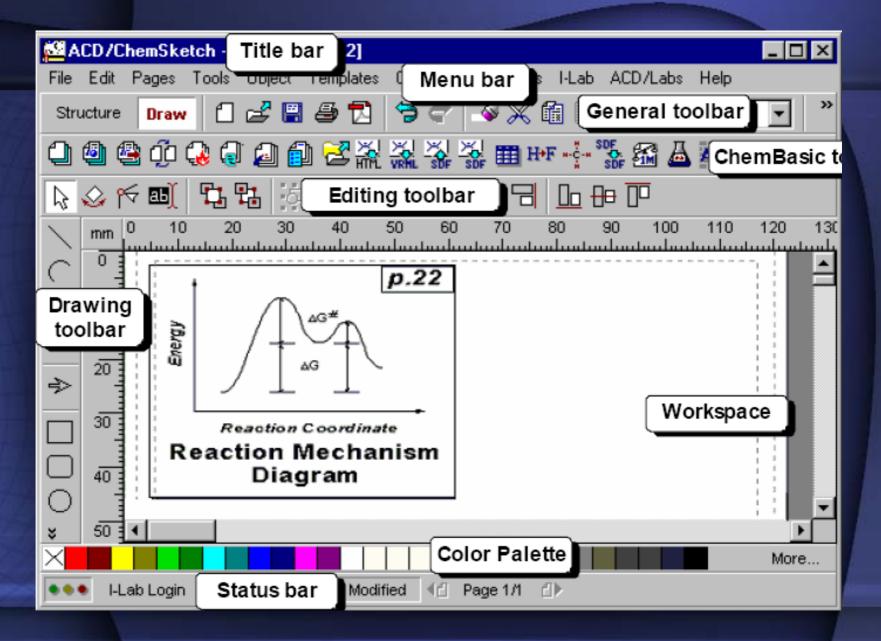




- Barra de Título: Mostra o nome do programa e o nome arquivo atualmente aberto.
- Menu: Contém uma série de palavras. Cada palavra une a uma lista de comandos relacionados para trabalhar na janela do Chemsketch no modo Estrutura.
- Barra Geral: Localizada abaixo da barra de menu, inclui ferramentas que estão presente em ambos modos de trabalho e o ajudará com tarefas pertinente para ambos os modos como: abrindo e fechando arquivos, operações de recortar e colar, aumentando e diminuindo zoom, dente outros diversos comandos.

- Barra de ChemBasic: Localizada abaixo do Barra Geral é uma barra opcional e contém diversas outras aplicações muito úteis para o trabalho no modo estrutura. Porém, essa barra de ferramenta só irá aparecer caso o módulo ChemBasic foi instalado.
- Barra estrutura: A barra contém ferramentas para desenhar e manipular estruturas químicas.
- Barra de átomos: Exibida verticalmente à esquerda da tela, contém botões que representam átomos, como também ferramentas para propriedades variáveis de átomos (valência, radicais, etc.).

- Barra de Radicais: Colocada à direita da janela, contém a relação de radicais já utilizados além do botão para acessar a tabela de radicais.
- Área de Trabalho: Grande área branca localizada no meio da tela, local onde as estruturas são desenhadas.
- Paleta de Cores: Permitem colorir átomos e ligações rapidamente.
- Barra de Status: Esta barra contém informações que podem ser úteis para o momento atual: nome do arquivo SK2 que você está trabalhando, número de página no arquivo de SK2, número de fragmentos na área de trabalho e fórmula molecular das estrutura selecionadas.



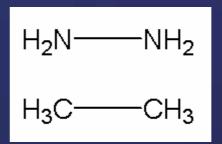
- Barra de Desenhos: Localizada a esquerda da tela, possui diversas ferramentas para desenho, desde ciclos, quadrados, setas além de inúmeras outras possibilidades.
- Barra de Edição: A barra de Edição permite manipular e alterar os desenhos no que diz respeito à posição, tamanho, ordem, etc.

#### Construindo uma estrutura

Draw Normal Draw Normal



selecione o átomo na barra de átomos e construa o desenho de uma estrutura simples. Para produzir uma ligação dupla, clique mais uma vez em cima da ligação e a tripla, duas vezes.



Faça a fórmula do eteno  $(C_2H_4)$  e do etino  $(C_2H_2)$ , crie um documento no Word, cole duas vezes cada figura (uma em cada linha) e salve o documento com o nome minicurso 1 (não feche o documento).

Clique na primeira figura e observe que ela será aberta no ChemSketch®, podendo ser alterada. Acrescente um átomo de carbono, selecione File → Close and Return to Microsoft Word.



Aparecerá uma mensagem solicitando que você confirme a alteração.

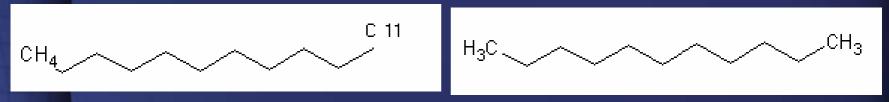


Clique Yes e salve o documento novamente. Repita o processo na segunda figura e salve-o.

#### Draw Continuous (Zigue-Zague)

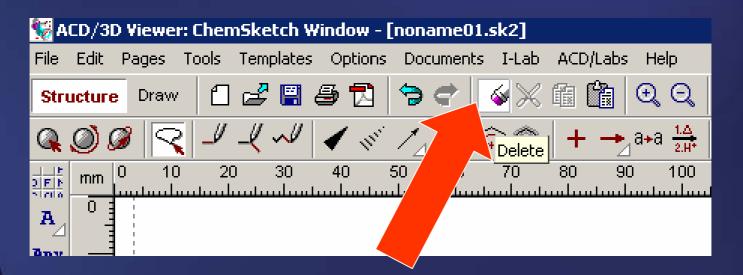


permite o desenho de uma estrutura orgânica contínua de modo que os átomos assumem uma posição em relação ao outro em forma de vértices. Observe que a quantidade de carbonos está sendo



Faça a fórmula do octano (C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>) colando a figura três vezes no documento do Word que está aberto, não esquecendo de salvar novamente.

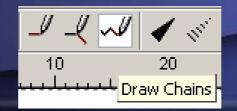
Clique na primeira figura e apague dois átomos de carbono, utilizando a ferramenta delete (figura abaixo). Basta selecionar a ferramenta e clicar nos carbonos que deseja apagar.



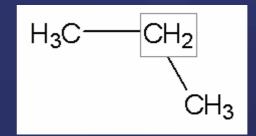
File → Close and Return to Microsoft Word. Selecione Yes, Salvando o documento novamente.

Clique na segunda figura e faça uma ligação dupla no primeiro carbono da esquerda. Basta clicar duas vezes sobre a ligação (observe se o carbono está selecionado). Salve o documento novamente.

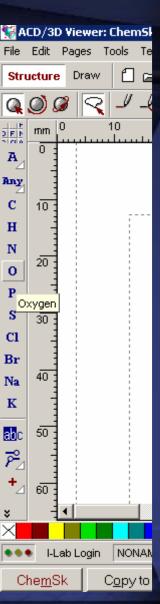
#### Draw Chains



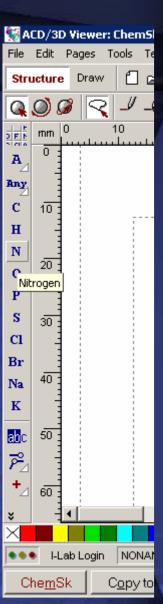
permite o desenho de uma estrutura orgânica contínua de modo que se determinam os pontos e a molécula vai se completando automaticamente



Faça a fórmula do C<sub>4</sub>H<sub>10</sub> colando a figura três vezes no mesmo documento do Word e salve-o.



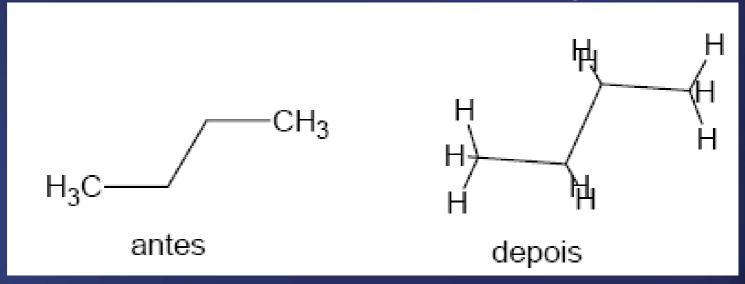
Utilizando a ferramenta **Draw Normal**, edite a segunda figura colada no Word<sup>®</sup>, acrescente um átomo de oxigênio (selecionando na barra lateral esquerda, clicando sobre ele) no segundo carbono. Confirme a alteração e volte para o Microsoft Word<sup>®</sup>.



Edite a terceira figura, selecione o nitrogênio e acrescente-o no primeiro carbono da esquerda. Confirme a alteração, retorne ao editor de texto e não esquecendo de salvar o documento.

#### 3D Optimization

permite a adequação da formula estrutura para uma conformação 3D.



Out/2006

# Visualização

em

3\_1)

#### Moléculas em 3D

Além da estrutura plana, o ChemSketch possui um módulo de geração e visualização de moléculas em 3D.

Para criar uma visualização 3D a partir de uma estrutura plana criada na área de trabalho, siga os passos:

1-Desenhe a estrutura plana da molécula a qual deseja-se obter a visualização 3D.

2-Otimize as ligações na conformação 3D.

3-Agora você deve selecionar a molécula e clicar no menu **ACD/Labs** e após na opção **3D Viewer**.

ACD/Labs Help

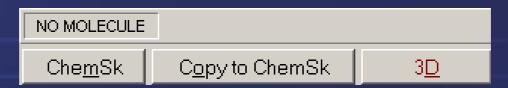
1 3D Viewer

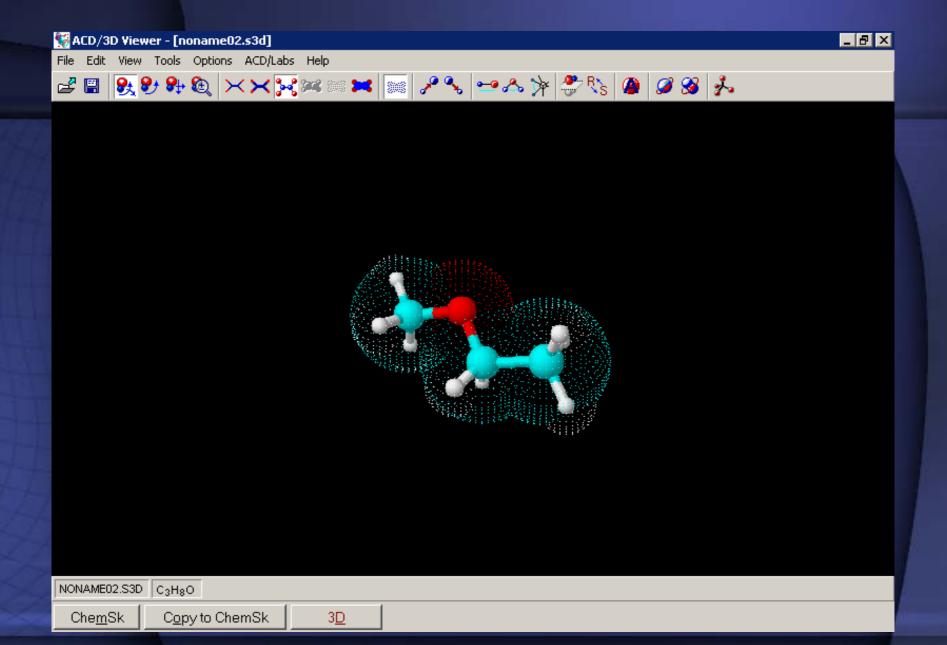
✓ 2 ChemSketch Freeware (Loaded)

Next Loaded Shift+Esc

Close All

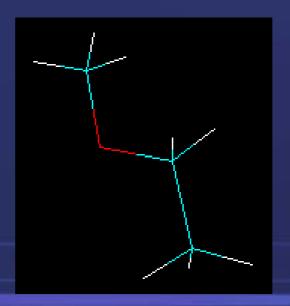
Para alternar entre o modo 3D e a tela principal do ChemSketch, utilize os botões localizados na parte inferior da tela.





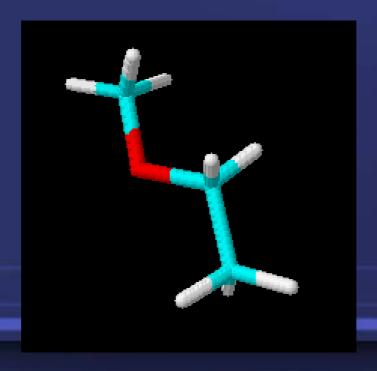


 Wireframe: Tipo de representação 3D que mostra a molécula na forma de "linhas".



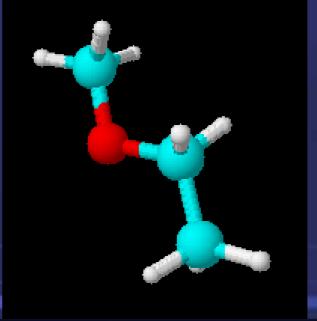


 Sticks: Tipo de representação 3D que mostra a molécula na forma de "varas".





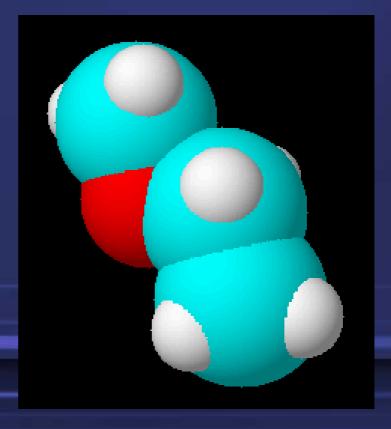
 Balls & Sticks: Tipo de representação 3D que mostra a molécula na forma "bolas e varas".



Out/2006

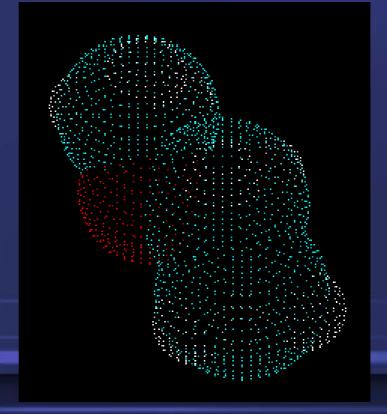


 Spacefill: Tipo de representação 3D que mostra a os espaços vazios da molécula "preenchidos" (semelhante ao modelo Stuart).





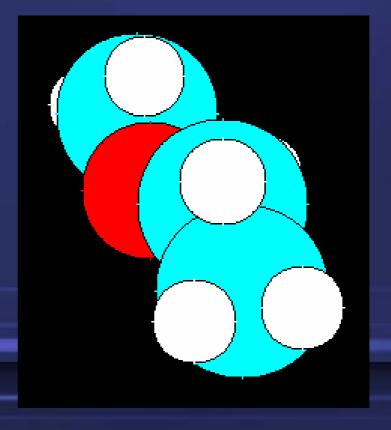
 Dots only: Tipo de representação 3D que mostra "somente pontos" representando os átomos e ligações da molécula.



Out/2006

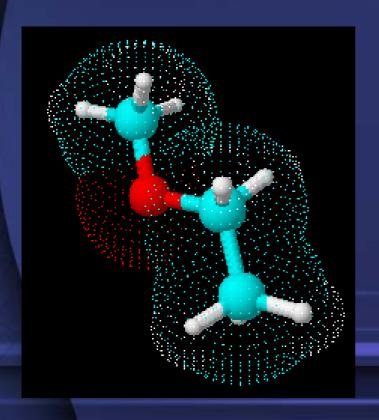


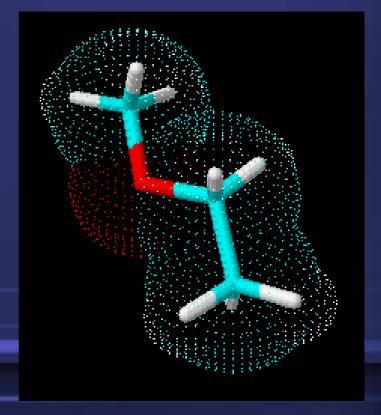
 Disks: Tipo de representação 3D que mostra os átomos na forma de discos, muito semelhante a forma Spacefill, porém sem o efeito 3D.



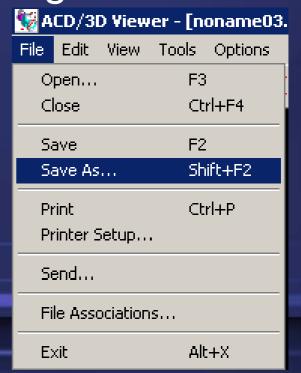


 With Dots: Marcado mostra OS "pontos" da representação 3D em qualquer forma de visualização.





Construa no ChemSketch® o etanol (C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH), copie e cole no Word. Volte ao ChemSketch®, clique em **Copy to 3D**, visualize em Stick. Salve o arquivo com o nome etanol1, utilizando o menu Save as, conforme a figura:



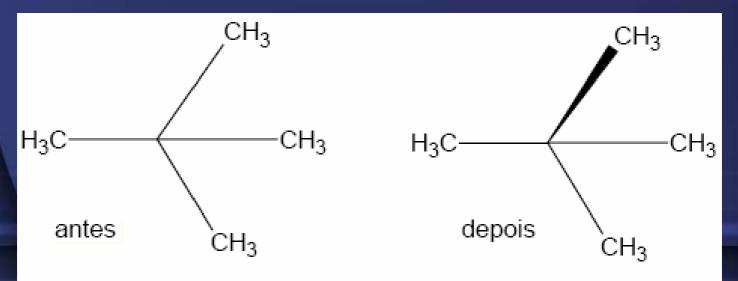
Sem fechar a visualização, mude para Balls and Stick, salvando o arquivo com o nome etanol2, utilizando o mesmo procedimento.



**Up Stereo Bonds** 



permite que seja aplicada a ligação entre átomos uma representação que significa que o átomo que possui a ponta mais grossa está para fora do plano da área de trabalho.

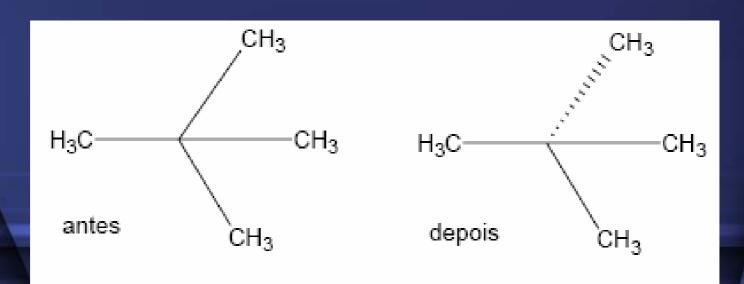


Out/2006

Dow Stereo Bonds



permite que seja aplicada a ligação entre átomos uma representação que o átomo que possui a ponta mais grossa estaria para dentro do plano da área de trabalho.



120 130

Change Position

Chance Position

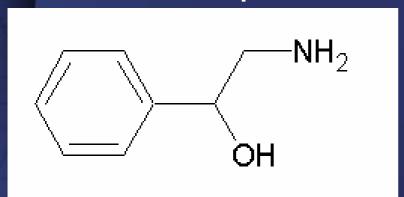
permite mudar a posição dos átomos ligados ao átomo principal. Basta selecionar a ferramenta e clique em cima para alterar.

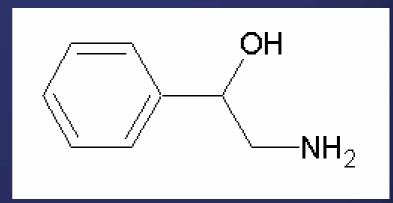
Construa as estruturas no ChemSketch® e cole no Microsoft Word®, salvando em seguida.



Flip on bond:

permite que giramos a molécula a partir de um referencial ou ligação. Para isso basta selecionar a ferramenta e clicar no composto.



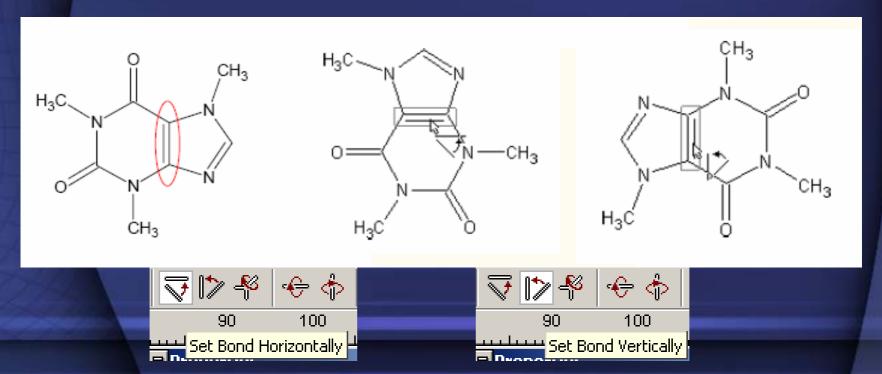


Efedrina





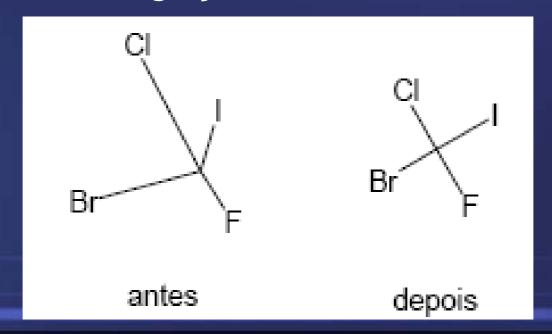
- Set Bond Horizontally permite alinhar a molécula na horizontal.
- Set Bond Vertically permite alinhar a molécula na vertical.





Clean Structure:

permite que a estrutura desenhada possua uma melhor proporcionalidade entre as ligações.

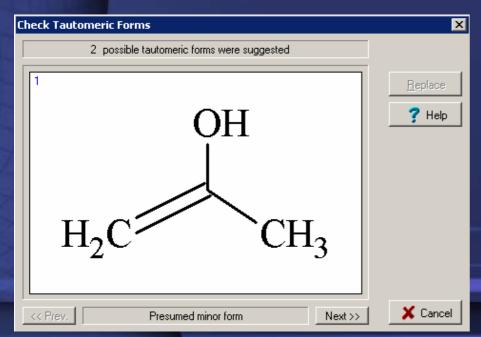


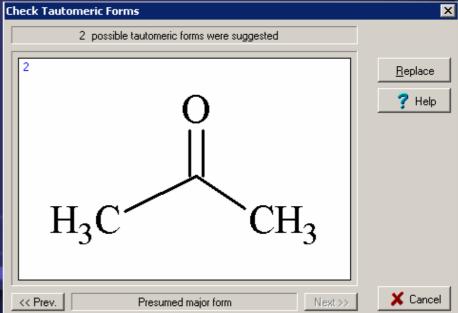
Out/2006

#### Check for Tautomeric Forms

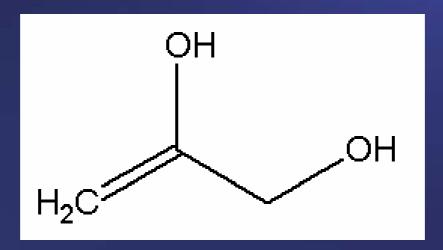


permite visualizar as formas tautoméricas (provenientes da isomeria de tautomeria) do composto





Construa a estrutura no ChemSketch® e cole quatro estruturas iguais no Microsoft Word®.

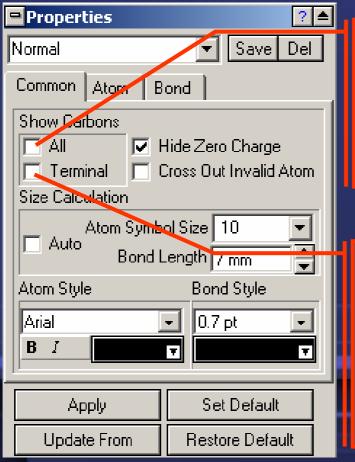


Clique na primeira e converta em um tautômero. Clicar em replace para que altere a estrutura e salve no Word. Faça também com as outras três estruturas

Out/2006

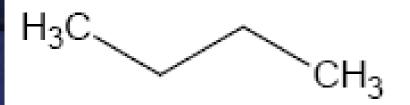
# Alterando formatação dos Átomos e Moléculas

Para alterarmos qualquer formato (cor, tamanho, etc), utilizamos a opção menu Tools -> Structure Properties.



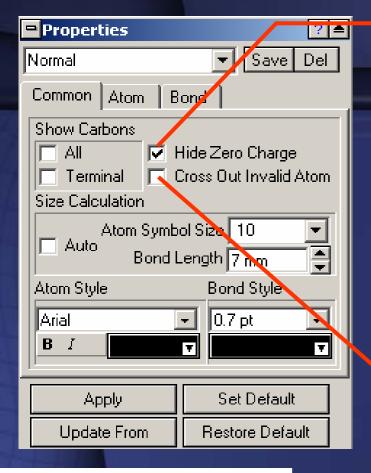
quando marcada, faz com que sejam mostrados os carbonos na molécula.

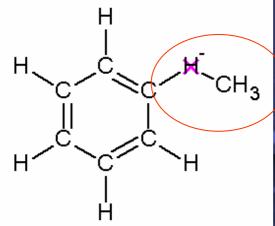
quando marcada, faz com que somente os átomos dos vértices da molécula são mostrados.



Opção terminal Marcada

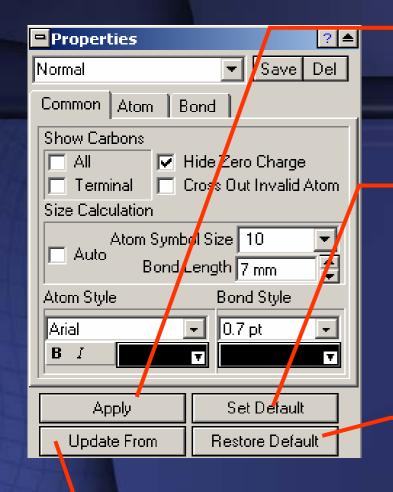
Opção All marcada





Quando marcada esconde o Nox "0" das entidades químicas. Caso a opção esteja desmarcada, o Nox "0" passa a ser colocado automaticamente.

Esta opção dá autonomia para que o ChemSketch "risque" as estruturas inviáveis desenhadas.



Aplica as alterações feitas na seleção de alguma entidade química.

Grava as alterações feitas de modo que as modificações feitas sejam aplicadas nas próximas entidades químicas a serem desenhadas

Permite restaurar as configurações padrão do ChemSketch.

Permite copiar formatação de uma entidade química e aplica-la em outra.

#### Referências bibliográficas

- GIORDAN, M.; GÓIS, J. Telemática educacional e ensino de química: considerações em torno do desenvolvimento de um construtor de objetos moleculares. Revista Latinoamericana de Tecnologia Educativa, Badajoz, v. 3, n. 2, p. 41-59, 2005.
- WHITTEN, K.W.; DAVIS, R.E., PECK, M.L.
   General Chemistry, 7th ed.; Brooks/Cole,
   2004.