

**GUIA PRÁTICO  
DE UTILIZAÇÃO  
DO CHEMSKETCH**

Alcides Loureiro Santos

# **GUIA PRÁTICO DE UTILIZAÇÃO DO CHEMSKETCH**

## **ORGANIZAÇÃO**

**Alcides Loureiro Santos**

Mestrando em Ensino de Ciências e Matemática

**Profa. Dra. Anelise Maria Regiani**

Orientadora

Rio Branco

2016

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da UFAC

---

S237g Santos, Alcides Loureiro, 1987 -  
Guia prático de utilização do Chemscketch / Alcides Loureiro Santos -  
2016.  
93 f.; Il.

Produto educacional do Mestrado Profissional em Ensino de Ciências e Matemática, da Universidade Federal do Acre, Rio Branco, 2016.

Orientadora: Profa. Dra. Anelise Maria Regiani.

Faz parte da monografia intitulada: A utilização do software chemsketch como ferramenta no ensino de química orgânica na educação básica do estado do Acre.

1. Ensino de química 2. Tecnologia de informação e comunicação 3. Química – ensino e aprendizagem I. Título.

CDD: 540

## SUMÁRIO

<b>APRESENTAÇÃO</b> .....	4
<b>1. O QUE É O CHEMSKETCH?</b> .....	5
<b>2. INSTALAÇÃO DO PROGRAMA</b> .....	7
<b>3. MODOS DE TRABALHO</b> .....	15
<b>4. BARRAS, TEMPLATES E TABELAS</b> .....	17
4.1 Visão geral da interface do ChemSketch.....	17
<b>5. CRIANDO, EDITANDO E SALVANDO DE ESTRUTURAS</b> .....	31
5.1 Desenhando estruturas .....	32
5.2 Exportar, salvar e editar estruturas .....	46
<b>6. EXPLORANDO AS ESTRUTURAS E SUAS PROPRIEDADES</b>	51
6.1 Gerando nomes para as estruturas .....	51
6.2 Determinando propriedades para a molécula .....	53
7.1 Opções tridimensionais no Modo Estrutura .....	58
7.2 3D Viewer .....	60
8.1 Template Window .....	71
8.2 Pesquisa de estruturas em bases internacionais.....	75
<b>9. DRAW</b> .....	79
9.1 Desenhando figuras .....	79
9.2 Criando textos e tabelas .....	80
9.3 Importando e exportando imagens no Modo Draw .....	82
9.4 Criando Esquemas de Reações Químicas .....	83
9.5 Montagem de esquemas a partir de templates .....	85
<b>10. PROPOSTAS DE ATIVIDADES NA EDUCAÇÃO BÁSICA</b> .....	87

## APRESENTAÇÃO

Este **GUIA PRÁTICO DE UTILIZAÇÃO DO CHEMSKETCH** faz parte da pesquisa do Mestrado Profissional em Ensino de Ciências e Matemática, da Universidade Federal do Acre, desenvolvida por Alcides Loureiro Santos e orientada pela Profa. Dra. Anelise Maria Regiani.

Intitulada “**A UTILIZAÇÃO DO SOFTWARE CHEMSKETCH COMO FERRAMENTA NO ENSINO DE QUÍMICA ORGÂNICA NA EDUCAÇÃO BÁSICA DO ESTADO DO ACRE**”, esta pesquisa se propõe a proporcionar contribuições ao processo de Ensino de Química Orgânica no Ensino Médio através da utilização do *software ChemSketch Freeware* da ACD/Labs, considerando suas potencialidades e limitações, no contexto da Educação Básica no Estado do Acre.

As funcionalidades a seguir apresentadas referem-se à versão 2015 do software, lançada em 16 de dezembro de 2014, através do site da empresa desenvolvedora *Advanced Chemistry Development Inc* ([www.acdlabs.com](http://www.acdlabs.com)). Neste Guia você verá uma série de informações para facilitar o entendimento das suas funcionalidades.

## 1. O QUE É O CHEMSKETCH?

O ACD/ChemSketch freeware (Figura 1) é um software de estruturação molecular da empresa *Advanced Chemistry Development Inc.* Ele possui muitas funcionalidades que podem ser aproveitadas em situações de ensino de química, do Nível Médio ao Superior.

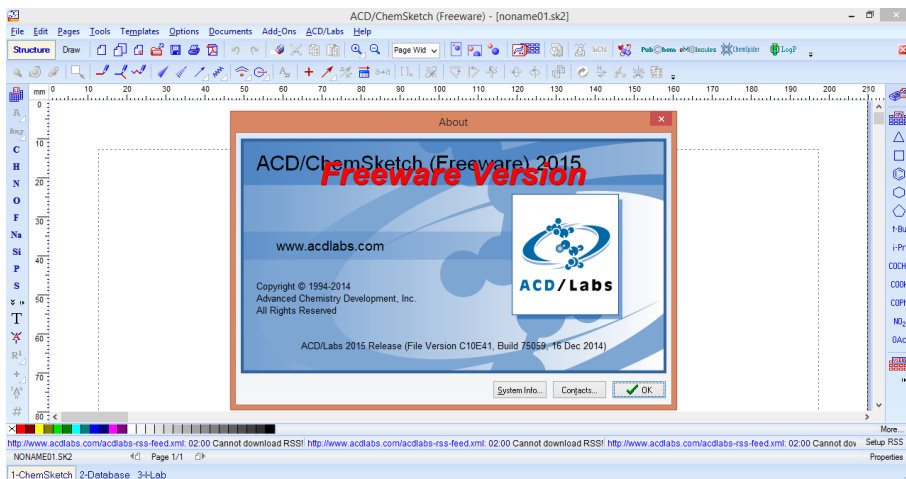


Figura 1. Interface do programa.

Ele permite desenhar estruturas químicas, incluindo as orgânicas, os compostos organometálicos e os polímeros. Dentre suas ferramentas, se destacam a possibilidade de:

- Montar estruturas planas e otimizá-las para uma visualização tridimensional;
- Manipular estruturas em 3D;
- Nomear, de acordo com as regras da União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC), estruturas de até cinquenta átomos e três ciclos;
- Acessar uma base de *templates* com várias estruturas prontas de diversas classes de compostos (alcaloides,

vitaminas, carboidratos, ácidos nucleicos, aromáticos, entre outros);

- Determinar dados estereoquímicos das estruturas desenhadas;
- Determinar diversas propriedades dos compostos desenhados, tais como: fórmula molecular, massa molar, densidade, tensão superficial, formas tautoméricas, índice de refração, volume molar, etc.;
- Salvar os projetos feitos em diversos formatos: jpeg, png, gif, pdf, entre outros, além do formato padrão do próprio programa;
- Montar mecanismos de reações orgânicas;
- Numerar carbonos em uma cadeia carbônica;
- Consultar em bases de dados on-line artigos, dados cromatográficos e espectroscópicos, aplicações medicinais, além de outras informações das estruturas desenhadas.

Considerando estas funcionalidades, além de muitas outras, percebemos que o *ChemSketch* se constitui como uma ótima ferramenta para diversos ramos da ciência, especialmente as que se relacionam proximamente da Química Orgânica.

A primeira versão *freeware* (gratuita) do *ChemSketch* foi lançada em abril de 1999 pela ACD/Labs. Ele é compatível com sistemas operacionais *Microsoft Windows*, trabalhando com barramento 32-bits. Além da versão gratuita, existe também a versão comercial que inclui mais funcionalidades e acesso a um banco de dados com mais de 30.000 compostos.

## 2. INSTALAÇÃO DO PROGRAMA

### 2.1 Download

Para realizar o *download* do arquivo de instalação do ACD/ChemSketch Freeware é necessário acessar o site da ACD/Labs ([www.acdlabs.com](http://www.acdlabs.com)). No endereço eletrônico <http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/>, serão disponibilizadas informações gerais sobre o software e um link para realização do download (Figura 2).

ACD/Labs

Login | Register | Newsletters | Freeware | Contact Us

Home Platforms and Products Solutions Services and Support Resources About ACD/Labs

Resources > Chemistry Software > ACD/ChemSketch Freeware

### ACD/ChemSketch for Academic and Personal Use

A Free Comprehensive Chemical Drawing Package

Chemistry Software

- ACD/ChemSketch Freeware
- ACD/NMR Processor Academic Edition
- ACD/Column Selector
- ACD/Labs LC Method Translator

ACD/ChemSketch Freeware is a drawing package that allows you to draw chemical structures including organics, organometallics, polymers, and Markush structures. It also includes features such as calculation of molecular properties (e.g., molecular weight, density, molar refractivity etc.), 2D and 3D structure cleaning and viewing, functionality for naming structures (fewer than 50 atoms and 3 rings), and prediction of logP. The freeware version of ChemSketch does not include all of the functionality of the commercial version—[see a brief overview of the differences](#). Visit [ACD/ChemSketch](#) to learn more about the commercial version.

#### As an Educational Tool

ACD/Labs software aids in teaching key chemistry concepts to high school, undergraduate, and graduate chemistry students. In addition, students benefit from exposure in the learning environment to the same tools they will encounter in the workforce.

- Our Academic Site Licensing Program is an affordable way for qualifying academic institutions to make the commercial versions of ACD/ChemSketch, ACD/ChemFolder, and ACD/I-Lab available to their students and faculty.
- Free access to site licenses of ACD/ChemSketch Freeware are available. [Contact us](#) to learn more.
- [ACD/I-Lab](#) offers pay-per-use access to many of our expert analytical, nomenclature, and physicochemical prediction tools.

We do not provide technical support for our freeware products.  
ACD/ChemSketch Freeware\* is for home and educational use ONLY.

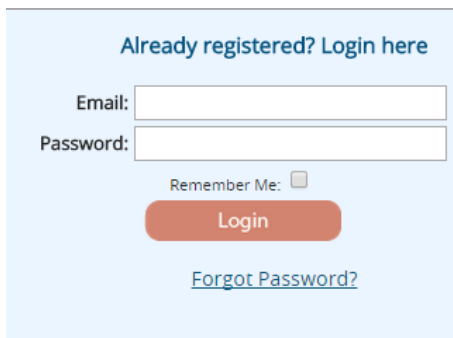
Download

Figura 2. Página da ACD/Labs na internet.

Será solicitado, para liberação do *download*, que você realize um login no site (Figura 3). Para novos usuários, é necessário criar uma conta no site, preenchendo algumas informações (Figura



4). Após o registro, será possível baixar a versão mais atual do *ChemSketch*.



Already registered? Login here

Email:

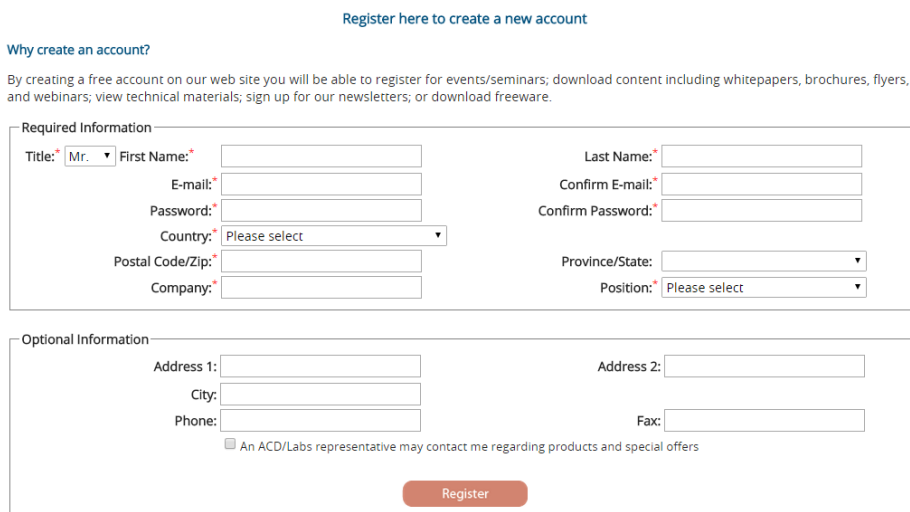
Password:

Remember Me:

Login

[Forgot Password?](#)

Figura 3. Login para realização do download.



[Register here to create a new account](#)

**Why create an account?**

By creating a free account on our web site you will be able to register for events/seminars; download content including whitepapers, brochures, flyers, and webinars; view technical materials; sign up for our newsletters; or download freeware.

**Required Information**

Title:   First Name:  Last Name:

E-mail:  Confirm E-mail:

Password:  Confirm Password:

Country:  Please select Province/State:

Postal Code/Zip:  Position:  Please select

Company:

**Optional Information**

Address 1:  Address 2:

City:

Phone:  Fax:

An ACD/Labs representative may contact me regarding products and special offers

Register

Figura 4. Registro de usuários.

Após essas etapas, será listada uma série de softwares da ACD/Labs e aplicativos on-line (Figura 5). Após clicar em “download”, o programa será baixado para seu dispositivo e surgirá uma tela com informações (em inglês) para instalação do programa (Figura 6).

## Chemistry Software

## Chemistry Software

ACD/ChemSketch  
FreewareACD/NMR Processor  
Academic Edition



ACD/Column Selector

ACD/Labs LC Method  
Translator



## Freeware

ACD/Labs provides the following chemistry software free for personal, home, and educational use. To see our full range of software on the ACD/Spectrus and ACD/Percepta platforms, please visit our [Platforms and Products](#).

We do not provide technical support for our freeware products.  
All freeware products are for home and educational use only.

Software* (available for personal, home, and educational use only)		
Name	Date	Download
<a href="#">ACD/ChemSketch Freeware</a> (Windows platform)  Includes: <a href="#">ACD/Log P Freeware</a> <a href="#">ACD/ChemBasic</a>	2015-01-29	
<a href="#">ACD/NMR Processor Academic Edition</a>	2010-03-18	

Web Applications* (available for personal, home, and educational use only)	
Name	Access
<a href="#">ACD/Column Selector</a>	
<a href="#">ACD/LC Method Translator</a>	

\* If you are interested in integrating any of our freeware to your offerings please contact [webmaster@acdlabs.com](mailto:webmaster@acdlabs.com)

Figura 5. Página web para download do *ChemSketch*.

## Thank You for Downloading ACD/ChemSketch Freeware

Your download should automatically begin. If it does not, please [click here](#).

Please ensure that your security settings permit downloading .exe files or contact your system administrator.

## Installation Instructions

1. Locate the downloaded file.
  - a. It is likely located in the C:\Users\YOUR NAME\Downloads folder on your hard drive.
2. Double-click on the file: chemsk2015.exe. The ACD/Labs Software Web Setup Wizard appears.
3. Click Next.
4. Choose the option to accept the license agreement and click Next.
5. Clear any optional components that you do not wish to install (the installation of all components is recommended to provide access to the full capabilities of the software), then click Next.
6. Click Install.
7. Click Finish.

ACD/Labs does not provide technical support for our freeware products. If you have any questions, please refer to the [FAQ page](#).

Figura 6. Informações pós download do *ChemSketch*.

## 2.2 Instalação

A instalação do *ChemSketch* é fácil e intuitiva. Após a conclusão do download, encontre o arquivo [chemsk2015.exe](#) (ele terá aproximadamente 37 MB) e execute-o. A seguir, veremos os passos da instalação (Figuras 7 a 14). As indicações das setas em vermelho representam os cliques.

### 1º Passo: Informações gerais

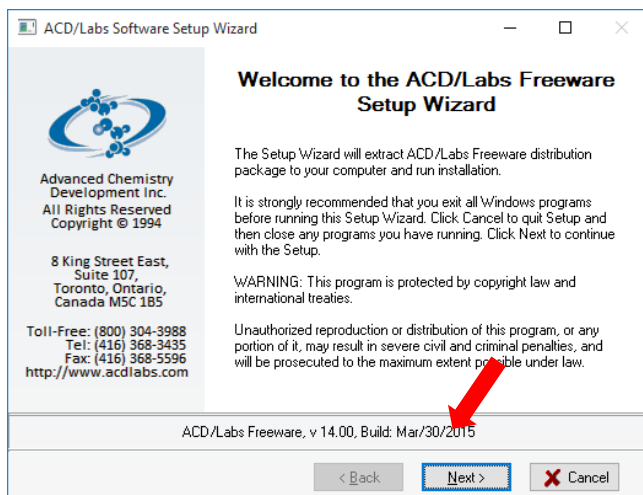


Figura 7. Informações gerais da instalação do programa.

## 2º Passo: Aceite o termo da licença de uso

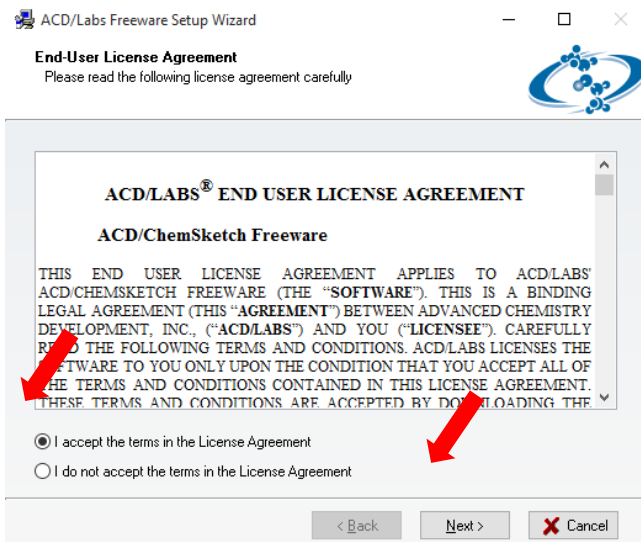


Figura 8. Informações sobre a licença de instalação.

## 3º Passo: Aplicações que serão instaladas

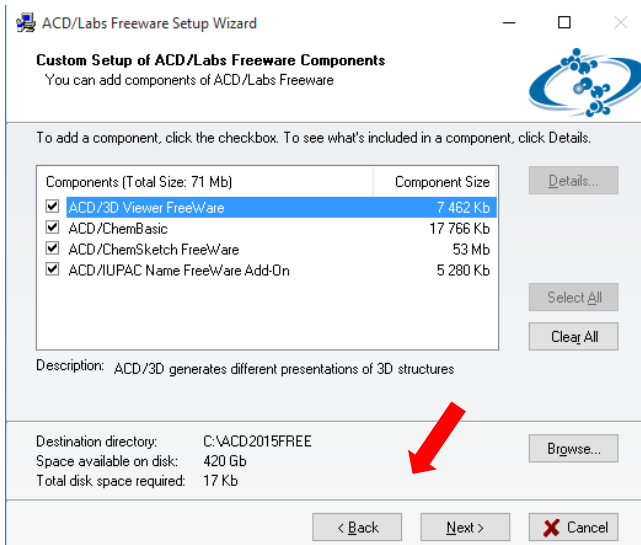


Figura 9. Informações sobre os aplicativos da ACD.

## 4º Passo: Selecione a pasta de instalação

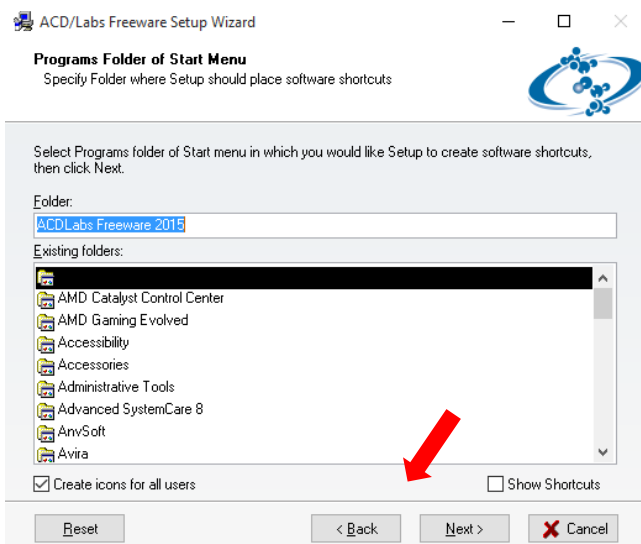


Figura 10. Informações sobre o local de instalação.

## 5º Informações de software adicional

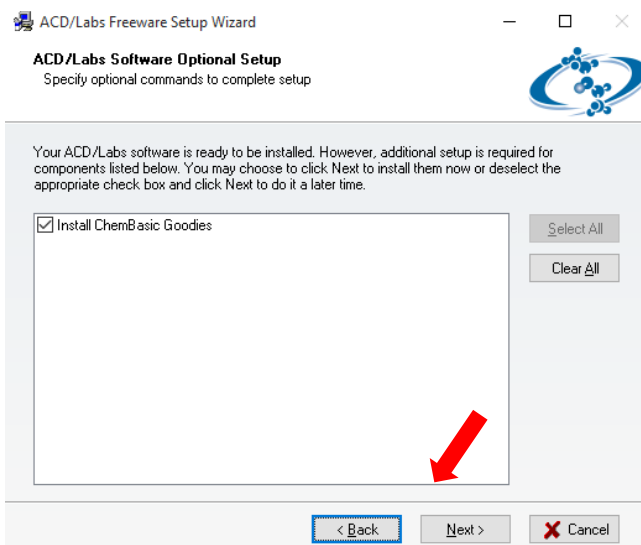


Figura 11. Instalação opcional do *ChemBasic*.

## 6º Passo: Resumo do que será instalado

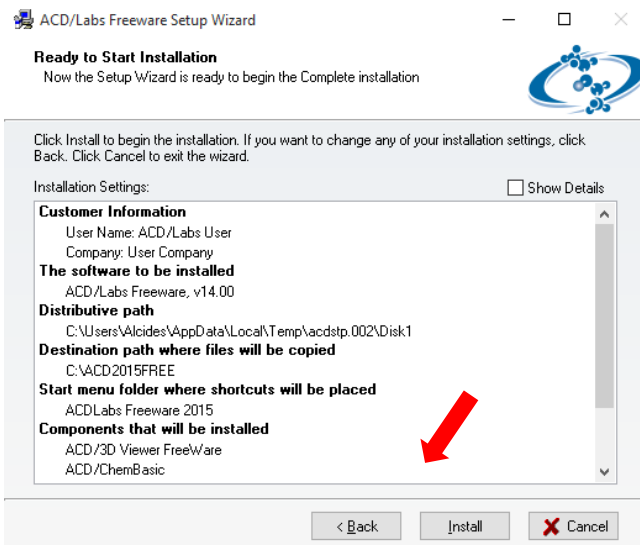


Figura 12. Configurações da instalação.

## 7º Passo: Progresso da instalação

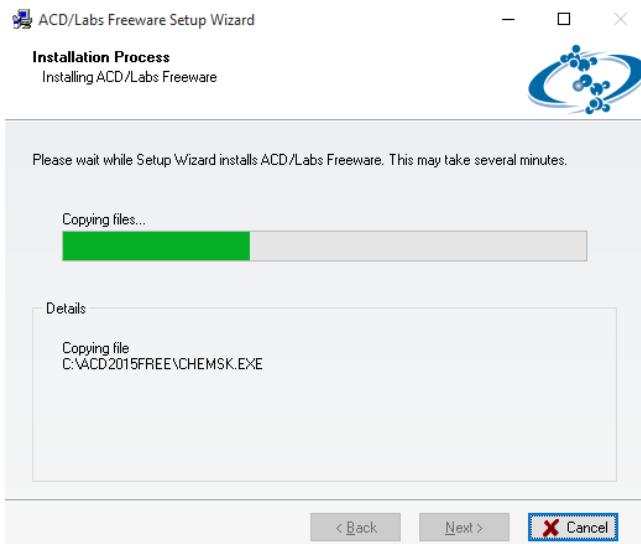


Figura 13. Instalação em andamento.

## 8º Passo: Conclusão da instalação

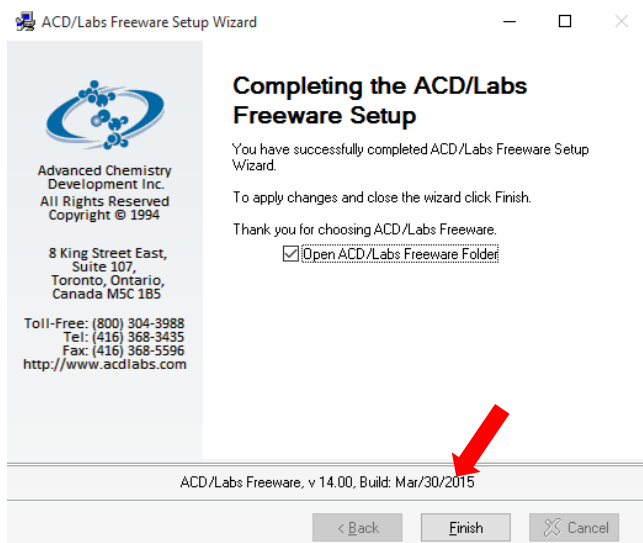


Figura 14. Término da instalação.

Para acessar o programa, basta clicar no ícone do programa (Figura 15).



Figura 15. Ícone do *ChemSketch*.

### 3. MODOS DE TRABALHO

Ao abrir o programa, algumas mensagens sobre outros produtos da ACD/Labs serão apresentadas (Figura 16), além de informações iniciais e dicas sobre o uso do software (Figura 17).

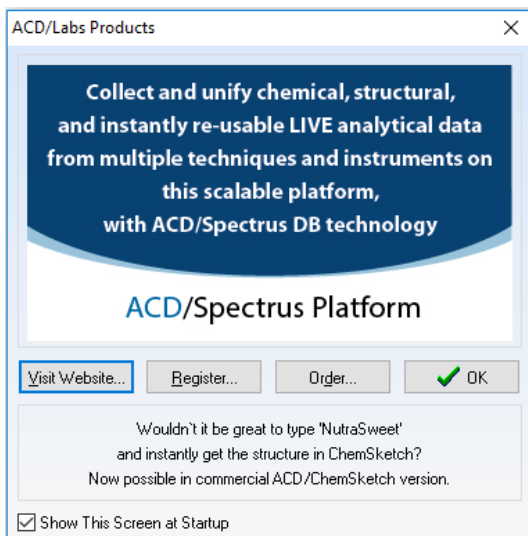


Figura 16. Informações sobre produtos da ACD/Labs.

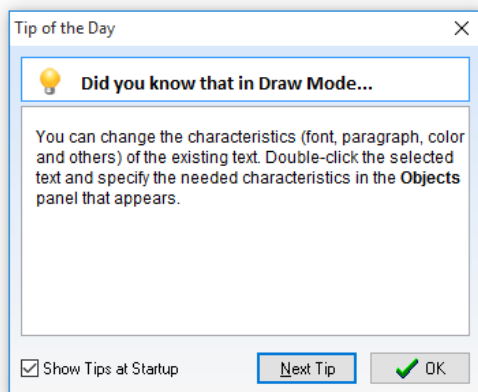


Figura 17. Dicas do *ChemSketch*.



Estas mensagens iniciais devem ser fechadas para que você possa explorar as funcionalidades do programa.

### 3.1. Modos de Trabalho do ChemSketch

O *ChemSketch* apresenta basicamente dois modos de trabalho: modo **structure** (estrutura) e o modo **draw** (desenho).

No modo estrutura (Figura 18) você pode desenhar estruturas orgânicas, esquemas de reação, determinar propriedades físicas e químicas, entre outras funções. Já no modo de desenho são apresentadas as ferramentas para a inserção de texto e desenho de vários objetos gráficos (Figura 19).

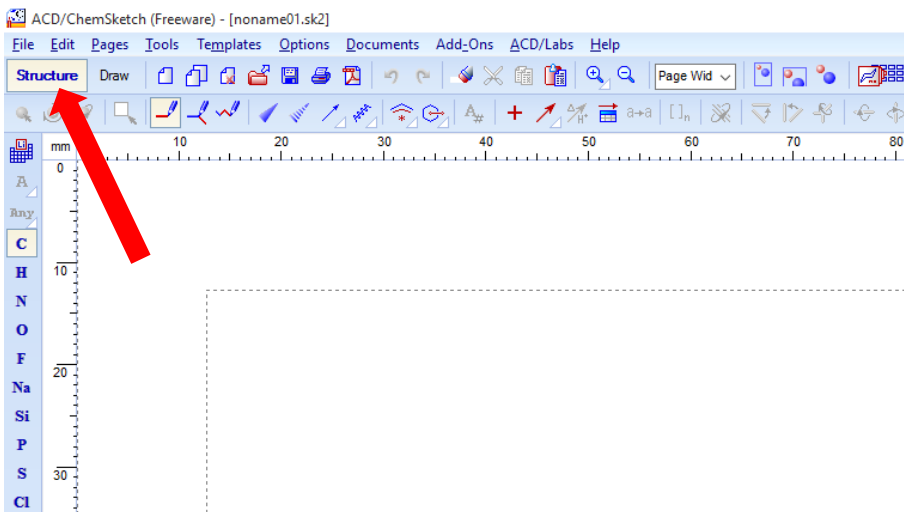


Figura 18. Modo **Structure** (Estrutura) do *ChemSketch*.

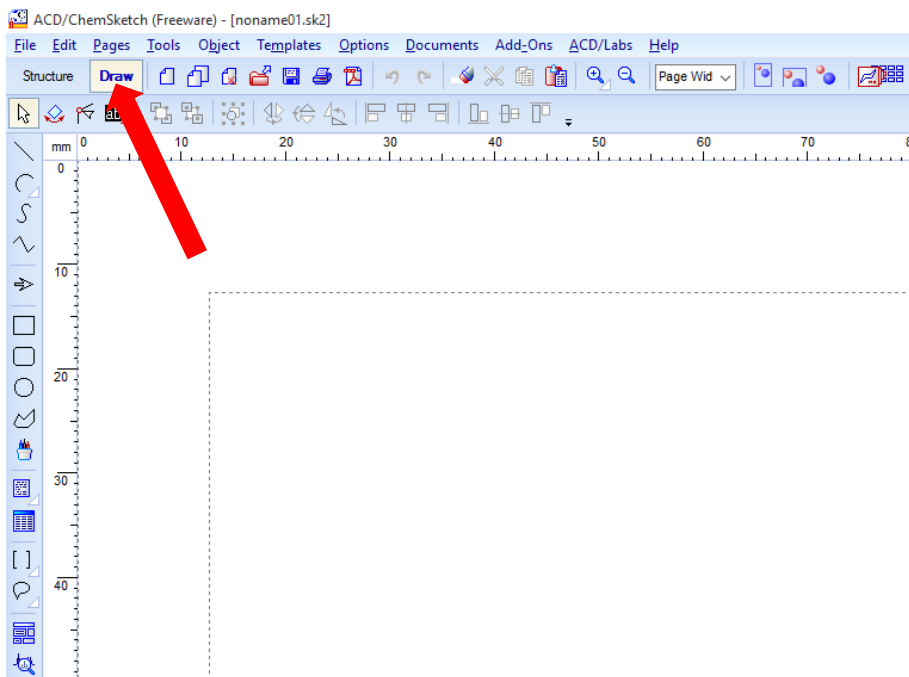


Figura 19. Modo **Draw** (Desenho) do *ChemSketch*.

## 4. BARRAS, TEMPLATES E TABELAS

### 4.1 Visão geral da interface do ChemSketch

Com o objetivo de facilitar a compreensão das principais funções do *ChemSketch*, a seguir serão apresentadas as principais barras de ferramentas do *software*, inicialmente na função Estrutura (Figura 20).

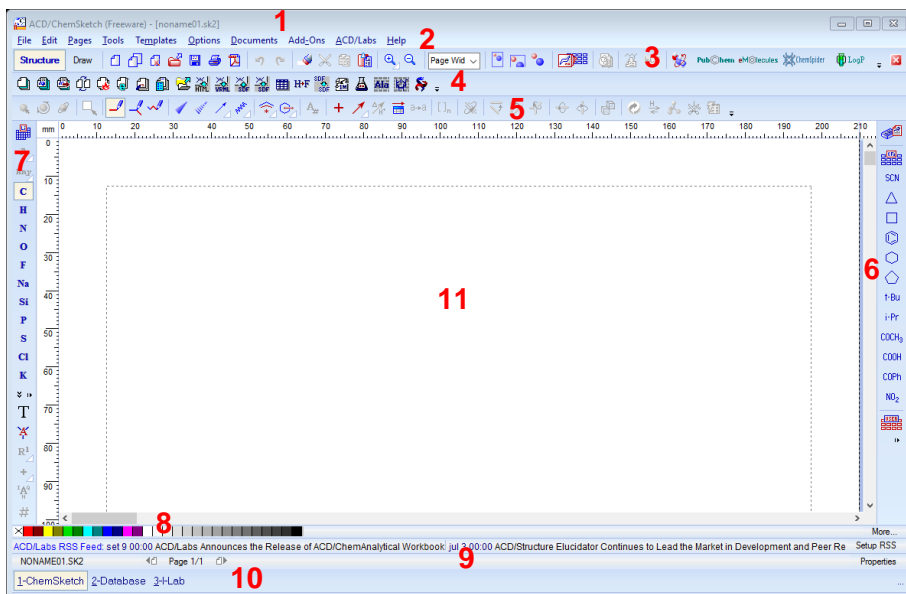


Figura 20. Barras do ChemSketch – Modo Structure

### Detalhamento das funções Modo Estrutura:

- 1. BARRA DE TÍTULO:** mostra o nome do programa e o nome do arquivo atualmente aberto.
- 2. BARRA DE MENU:** contém uma série de palavras. Cada palavra é um link para abrir uma lista “menu” de comandos relacionados para trabalhar na janela no modo estrutura e desenho.
- 3. BARRA GERAL:** inclui ferramentas que estão presentes tanto no modo estrutura, quanto no modo de desenhar e irá ajudá-lo com as tarefas pertinentes a ambos os modos, tais como: salvar, abrir arquivos, desfazer/refazer operações, copiar e colar, mais ou menos zoom, bem como a inserção de vários modelos.
- 4. BARRA DO 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.

**5. BARRA DE ESTRUTURA:** A barra contém ferramentas para desenhar e manipular estruturas químicas.

**6. BARRA DE RADICAIS:** contém a tabela de radicais e vários botões que representam radicais prontos para você utilizar no desenho de suas estruturas 2D.

**7. BARRA DE FERRAMENTAS DOS ÁTOMOS:** Exibida verticalmente à esquerda da tela, contém botões que representam átomos, como também ferramentas para propriedades variáveis de átomos (valência, radicais, etc.). Além de conter uma Tabela Periódica dos Elementos Químicos, possibilitando adicioná-las à área de edição e nas estruturas montadas.

**8. PALETA DE CORES:** Permite colorir átomos e ligações rapidamente.

**9. BARRA DE DESCRIÇÃO DO PROGRAMA:** Apresenta informações através de notícias relacionadas a ACD/Labs.

**10. BARRA DE STATUS:** contém informações que podem ser úteis para a sua localização no momento atual: o nome do arquivo, ficheiro que está trabalhando, o número de página no arquivo, número de fragmentos no espaço de trabalho, a fórmula molecular da estrutura selecionada, bem como uma das propriedades químicas disponíveis para a estrutura selecionada. Ela também contém um botão de acesso *I-Lab* automático que permite seu *login* ao programa. E mais à direita, você pode clicar, com o botão esquerdo do mouse em *properties* (propriedades) irão aparecer as propriedades do átomo e/ou da estrutura desenhada; você pode marcar qual você prefere que apareça nessa barra.

**11. A área de trabalho (*workspace*):** é o espaço em branco, no meio, onde as estruturas são desenhadas.

## Detalhamento das funções Modo Desenho:

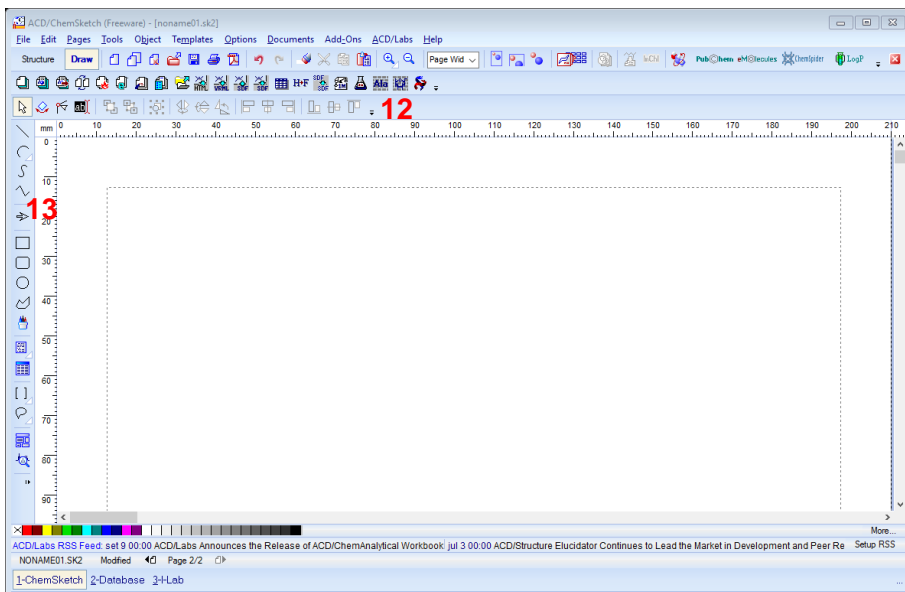


Figura 21. Barras do *ChemSketch* – Modo *Draw*.

**12. BARRA DE EDIÇÃO DE DESENHO:** A barra de Edição permite manipular e alterar os desenhos no que diz respeito à posição, tamanho, ordem, etc.

**13. BARRA DE FERRAMENTAS DE DESENHO:** Localizada a esquerda da tela, possui diversas ferramentas para desenho, desde ciclos quadrados, setas além de inúmeras outras possibilidades.

## 4.2 Detalhamento de algumas barras do *ChemSketch Freeware*

### 4.2.1 Barra Geral

A figura 22 mostra em detalhes a barra geral do *ChemSketch Freeware* 2015. Vejamos, suas funcionalidades.



Figura 22. Barra Geral.

1. Selecciona o Modo *Structure*.
2. Selecciona o Modo *Draw*.
3. Cria um novo documento.
4. Insere uma página nova no documento.
5. Deleta uma página do documento.
6. Abre um documento já existente.
7. Salva documento atual.
8. Imprime o documento atual.
9. Exporta para arquivo .pdf.
10. Desfaz edição.
11. Refaz edição.
12. Apaga objeto a ser selecionado (ou delete).
13. Recorta objeto selecionado, permitindo removê-lo para outra área ou programa.
14. Copia objeto selecionado.
15. Cola objeto selecionado.
16. Mais zoom.
17. Menos zoom.
18. Várias opções de zoom.

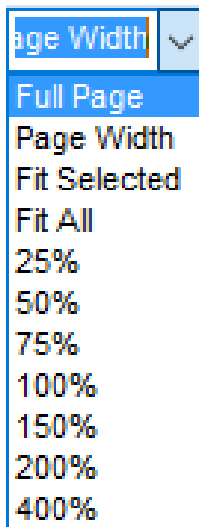


Figura 23. Barra de Zoom.

19. Zoom na página inteira.

20. Zoom na largura da página.

21. Zoom no objeto selecionado.

22. Abre o *Template Window* (Figura 24). Nesta janela existe uma série de estruturas moleculares e desenhos gráficos que podem ser copiados para área de trabalho do programa. No total são 40 templates que podem ser acessados, muitos deles possuem várias páginas com objetos selecionáveis e editáveis.

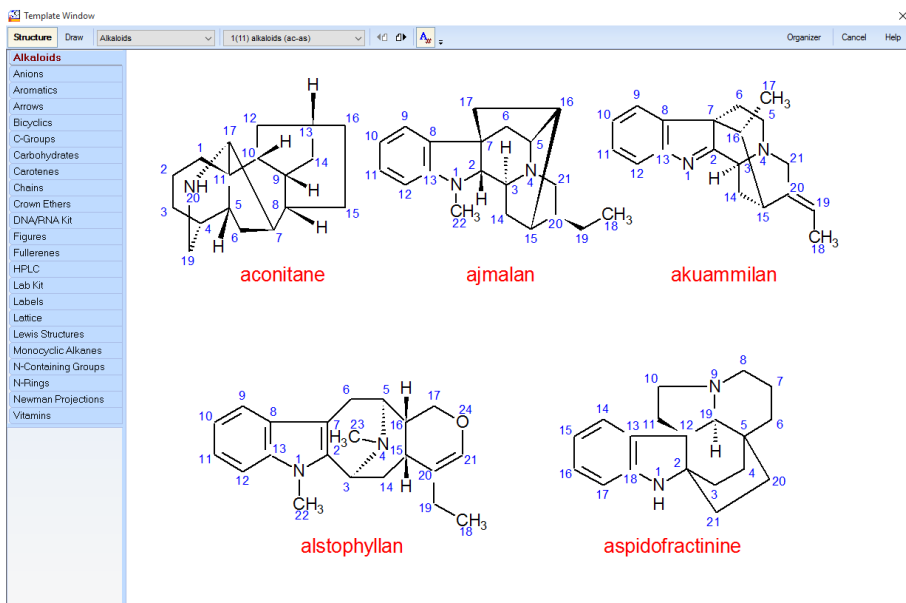


Figura 24. *Template Window*.

23. Realiza uma pesquisa sobre a estrutura desenhada (disponível apenas na versão comercial).

24. Gera nome para a estrutura selecionada na área de trabalho.

25. *International Chemical Identifiers* (Identificador Químico Internacional) é um sistema de identificação para substâncias químicas. Ele foi desenvolvido pela *International Union of Pure and Applied Chemistry* – IUPAC (União Internacional de Química Pura e Aplicada) com o objetivo de padronizar a maneira de descrever informações de moléculas e facilitar seu estudo.

26. Muda para visualização em 3D.

27. Procura propriedades químicas da molécula selecionada no *PubChem* (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>).

28. Procura propriedades químicas da molécula selecionada no *eMolecules* (<https://www.emolecules.com/>).

29. Procura propriedades químicas da molécula selecionada no *ChemSpider* (<http://www.chemspider.com/>).



30. Calcula o  $\text{Log}P$  (logaritmo do coeficiente de partição: razão entre as concentrações de duas fases líquidas).

31. Fecha o documento atual.

#### 4.2.2 Barra de Estrutura

A figura 25 mostra a barra de estrutura do *ChemSketch Freeware* 2015. Ela só está disponível no Modo *Structure*.



Figura 25. Barra de Estrutura.

1. Permite selecionar ou mover objetos.
2. Permite a rotação de 360° (em 2D – duas dimensões).
3. Rotação em um ambiente 3D (três dimensões).
4. Seleciona área específica.
5. Desenho de estrutura orgânica simples.
6. Desenho de estrutura “ligue os pontos”.
7. Desenho de estrutura “ziguezague”.
8. Ligação estereoquímica para fora do plano.
9. Ligação estereoquímica para dentro do plano.
10. Ligações coordenadas.
11. Ligações estereoquímicas indefinidas.
12. Gera curva de deslocalização.
13. Marcações Sombreadas (ligações Markush). Os grupos –R de Markush são representações simbólicas que indicam uma coleção de produtos químicos semelhantes.
14. Mostra/oculta números nos átomos.

15. Sinal de mais (+).
16. Setas utilizadas em equações químicas.
17. Insere informações sobre condições da reação química.
18. Calcula informações sobre reações escritas na forma de equações químicas na área de trabalho.
19. Mapa de átomos para reações químicas.
20. Chaves usadas geralmente em polímeros.
21. Permite mudar a posição dos átomos ligados ao átomo principal.
22. Alinha a molécula horizontalmente.
23. Alinha a molécula verticalmente.
24. Alinha a molécula a partir de uma ligação.
25. Altera a representação da molécula para baixo e para cima.
26. Altera a representação da molécula para esquerda e para direita.
27. *Template* instantâneo (duplica estruturas selecionadas).
28. Limpa a estrutura proporcionalmente, ou seja, sugere um desenho estrutural mais harmonioso, corrigindo desproporcionalidades.
29. Verifica formas tautoméricas.
30. Abre a função 3D *Viewer* (para visualização tridimensional das estruturas).
31. Calcula dados de espectroscopia de massa de fragmentos da estrutura.
32. Calcula propriedades físicas aproximadas das moléculas desenhadas.

#### 4.2.3 Barra de Átomos

A barra de átomos (Figura 26), também disponível somente no Modo Structure. Ela oferece acesso a outros dados, como a Tabela Periódica dos Elementos Químicos.

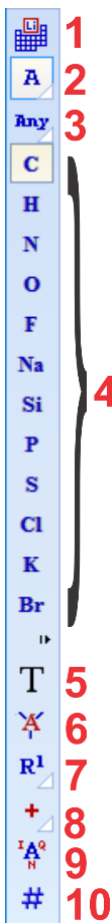


Figura 26.  
Barra de  
átomos.

1. Acessa a Tabela Periódica dos Elementos Químicos (Figura 27), incluindo várias informações como: massa atômica, estados de oxidação, configuração eletrônica e ressonância magnética nuclear.

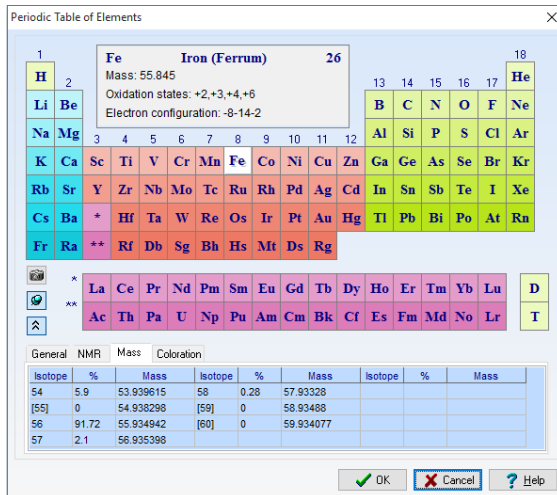


Figura 27. Tabela Periódica dos Elementos.

2. Ferramentas de átomos: Insere qualquer átomo, heteroátomo e grupos de átomos.
3. Ferramentas de ligação.
4. São símbolos dos elementos químicos mais frequentemente usados.
5. Permite alterações e inclusões de novos textos em qualquer lugar da área de trabalho.
6. Edita os átomos da estrutura (*Edit Label*), permitindo sua substituição na molécula (Figura 28).

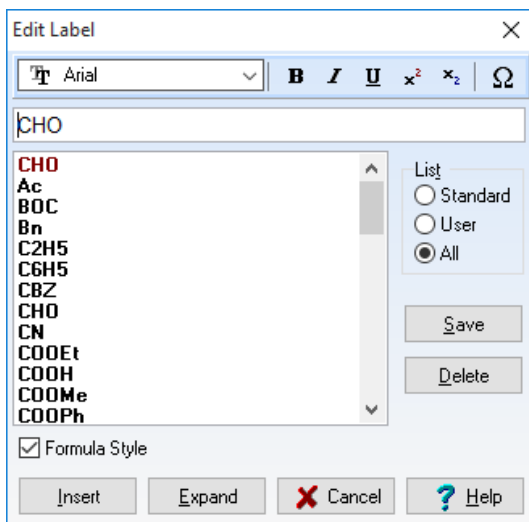


Figura 28. *Edit Label*.

7. Permite substituir um átomo ou criar um átomo com o rótulo de radical, além de outras funcionalidades.
8. Atribui cargas elétricas e indica a existência de grupos radicais químicos.
9. Altera propriedades atômicas de átomos selecionados (Figura 29).

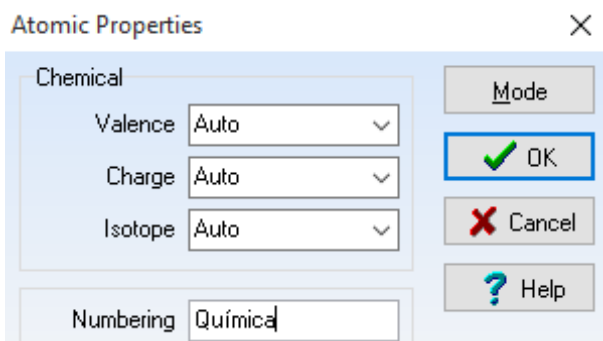


Figura 29. *Edit Label*.

10. Cria numerações manuais.

#### 4.2.4 Barra de Edição de Desenho

A barra de edição de desenho (Figura 30), está disponível somente no Modo *Draw*. Ela oferece recursos para edição dos gráficos da área de trabalho do programa.



Figura 30. Barra de Edição de Desenho.

1. Permite ao usuário selecionar, mover e dimensionar um objeto.
2. Possibilita seleção e movimentação dos objetos, tem como outra função a rotação em 2D.
3. Editor de nós (nodes: vértices) de um objeto.
4. Habilita a opção de edição de alguma caixa de texto presente na área de trabalho.
5. Faz com que o objeto selecionado fique na frente dos demais objetos.
6. Faz com que o objeto selecionado fique atrás dos demais objetos.
7. Agrupa dois ou mais objetos selecionados fazendo-os ser um só objeto.
8. Gira o objeto horizontalmente.
9. Gira o objeto verticalmente.
10. Gira o objeto em ângulos fixos de 90°.
11. Alinha o objeto à esquerda da área de trabalho.
12. Alinha o objeto ao centro horizontal da área de trabalho.
13. Alinha o objeto à direita da área de trabalho.
14. Alinha o objeto em baixo da área de trabalho.
15. Alinha o objeto ao centro vertical da área de trabalho.
16. Alinha o objeto em cima da área de trabalho.

#### 4.2.5 Barra de Ferramentas de Desenho

A barra de ferramentas de desenho (Figura 31), também está disponível somente no Modo *Draw*. Nela estão os recursos principais para a criação dos gráficos, entre outras funções.

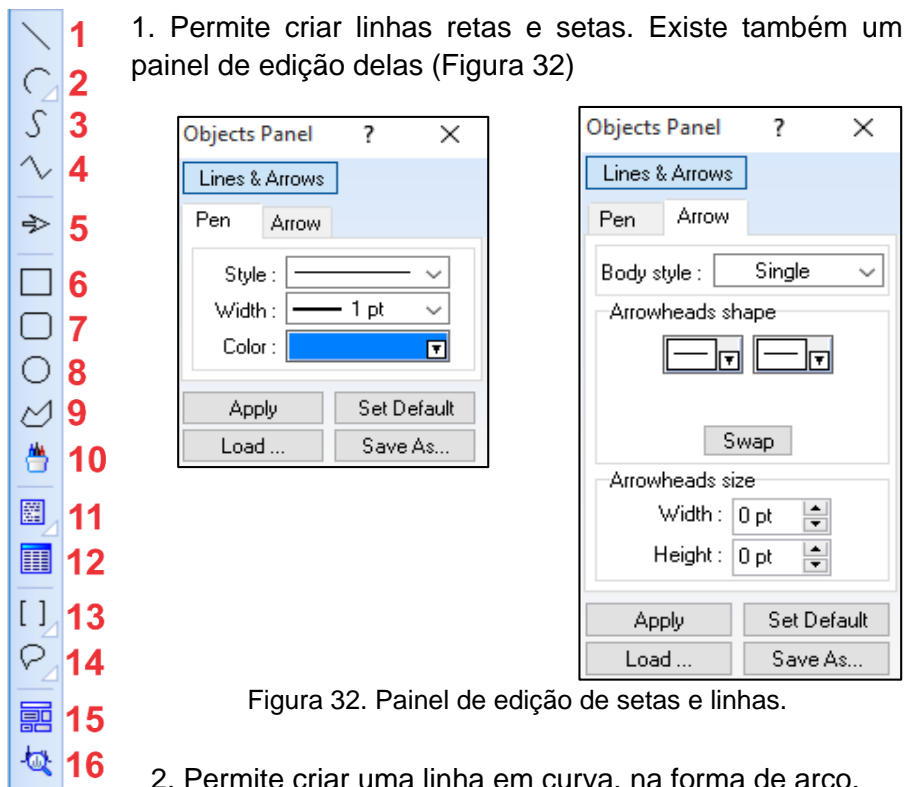


Figura 31.  
Barra de  
Edição de  
Desenho.

Figura 32. Painel de edição de setas e linhas.

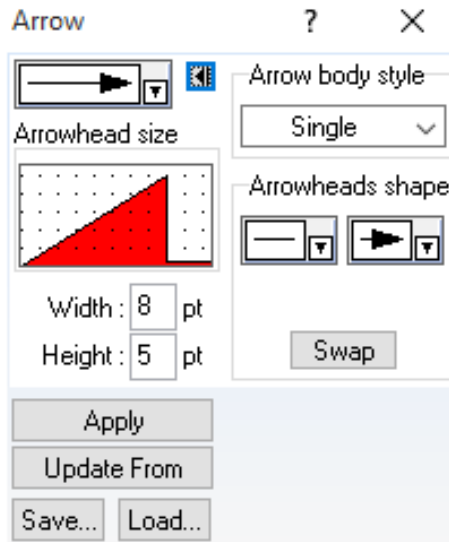


Figura 33. Edição de setas

6. Permite desenhar formar retangulares.
7. Permite o desenho de retângulo com os cantos arredondados.
8. Permite desenharmos uma elipse na área de trabalho.
9. Permite desenharmos uma elipse na área de trabalho.
10. Permite a inserção de imagens de diferentes formatos.
11. Permite a adição de texto na área de trabalho (essa opção ativa configurações específicas para texto na barra de edição).
12. Permite a adição de tabelas na área de trabalho.
13. Permite escolhermos os seguintes símbolos de chaves, parênteses e colchetes.
14. Estes botões são utilizados para alguma descrição estilo “balões de texto”.
15. Reporta um *template*.
16. Permite aplicar zoom em espectros.

## 5. CRIANDO, EDITANDO E SALVANDO DE ESTRUTURAS

O *ChemSketch* permite desde criação de estruturas simples hidrocarbonetos, até compostos complexos com centenas de átomos. Por padrão, o programa inicia no Modo Estrutura, com a forma de desenho estrutural *draw* normal e com o elemento carbono selecionado. Ao clicar na área de trabalho é criada a estrutura da molécula do metano ( $\text{CH}_4$ ), conforme Figura 34.

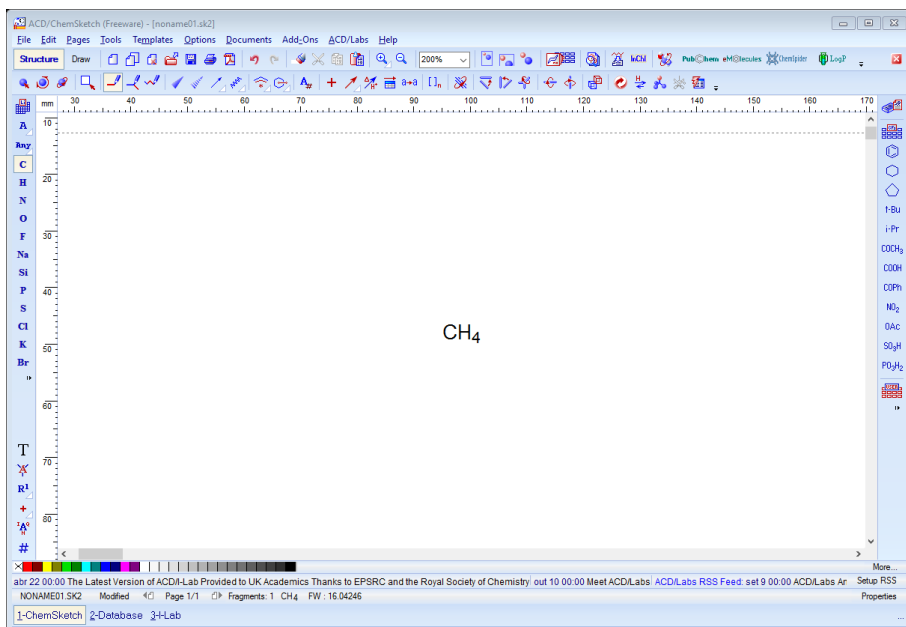


Figura 34. Molécula de metano.

A seguir apresentaremos algumas noções básicas do modo Estrutura, onde pretendemos expor uma visão geral de como montar estruturas, considerando suas ligações (simples, duplas e triplas, ramificações, grupos funcionais e conformidades estereoquímicas.



## 5.1 Desenhando estruturas

A Figura 35 destaca as mais importantes ferramentas do *ChemSketch* para desenhar estruturas planas básicas.

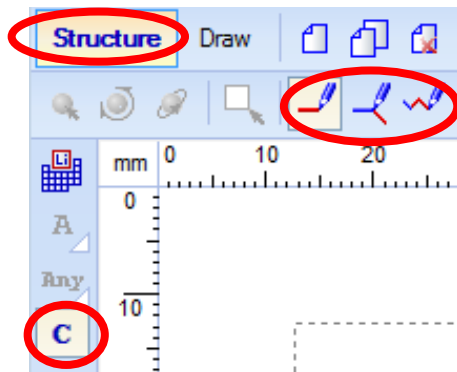


Figura 35. Principais ferramentas de desenho estrutural.

Com as opções em vermelho destacadas selecionadas, podemos desenhar estruturas a partir de cliques na área de trabalho a partir do metano. Três novos cliques em cima do  $\text{CH}_4$  adicionarão grupos metila ( $-\text{CH}_3$ ), montando a cadeia do metil-propano, conforme figura 36.

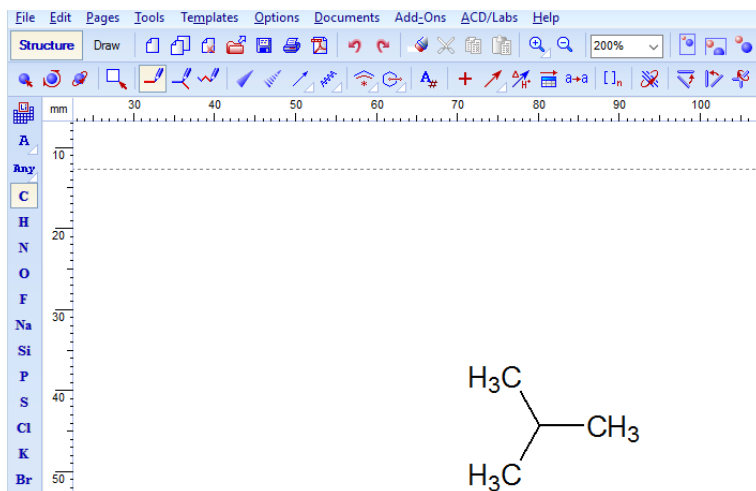


Figura 36. Cadeia do metil-propano

Cada clique sobre os átomos da estrutura, inserem novos grupos  $-\text{CH}_3$ , sempre com um tamanho de ligação padrão e obedecendo as valências de cada elemento. Ao clicar-se no carbono mais à direita, forma-se a molécula do metil-butano (Figura 37).

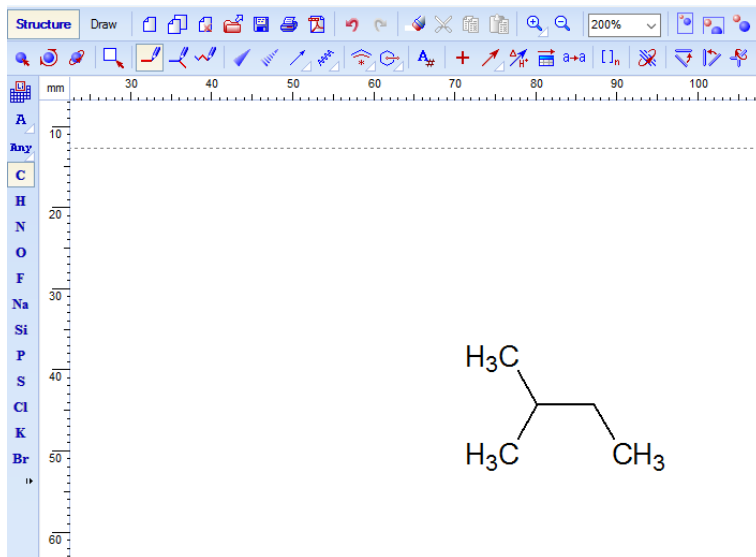


Figura 37. Cadeia do metil-butano.

É possível mudar a visualização das estruturas desenhadas automaticamente a partir da seleção de modos de desenho disponibilizados pelo *ChemSketch*. Para acessar esses modos basta seguir nas opções mostradas na Figura 38. O modo padrão do *software* é o *Normal*, onde as extremidades da cadeia são apresentadas. No total são 14 modos, a figura 39 mostra a molécula do metil-butano sendo mostrada no modo *ACS Style*.

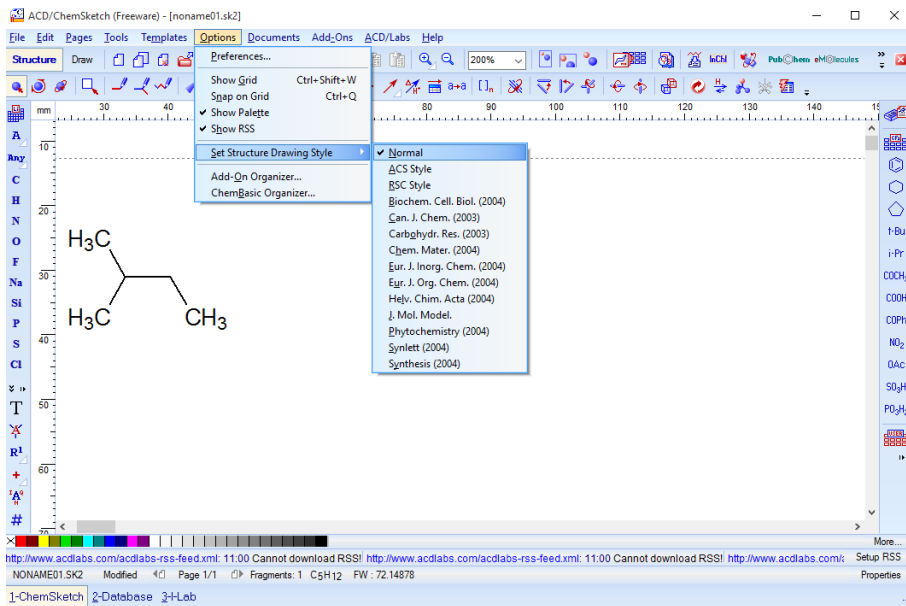


Figura 37. Estilos de desenho estrutural.

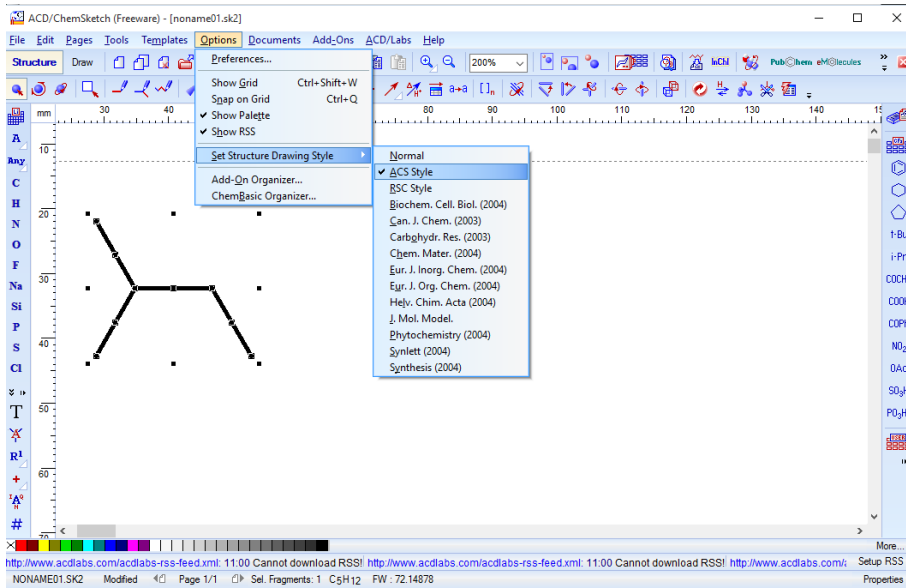





Figura 38. Modo de desenho estrutural ACS Style para a molécula do metilbutano.

Neste guia, será priorizado o estilo de desenho estrutural *Normal*, respeitando as configurações padrões do programa.

Além da opção *Draw Normal*  (desenho normal), podemos desenhar estruturas através do *Draw Continuous*  (desenho contínuo) e do *Draw Chains*  (desenho de cadeias).

O desenho contínuo liga pontos formando uma cadeia (Figura 39). Geralmente, usando esta função a molécula apresenta ângulos e tamanhos de ligação desproporcionais. Contudo, é possível realinhar a molécula através da função *clean structure* (ou limpar estrutura) (Figura 40).

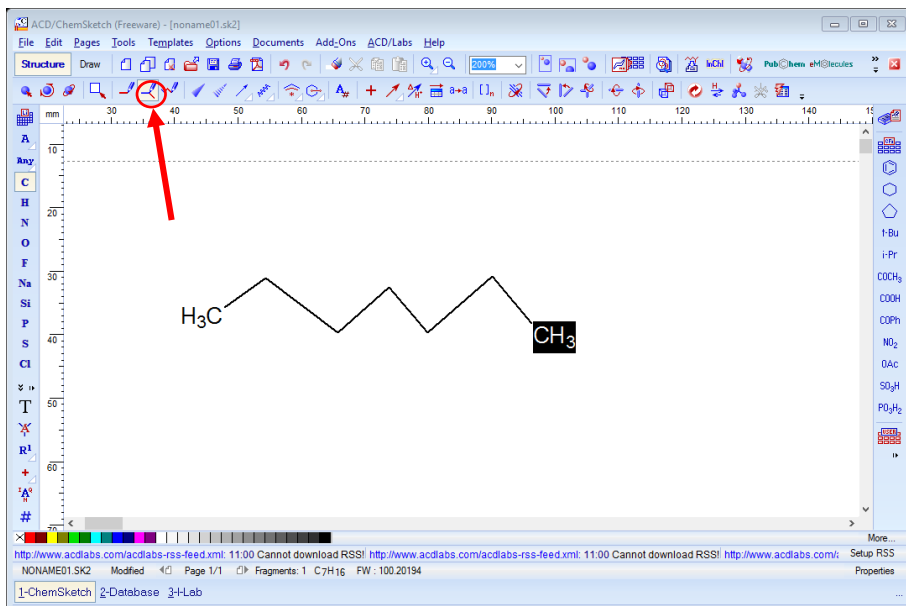


Figura 39. Molécula do heptano desenhada no modo de desenho contínuo.

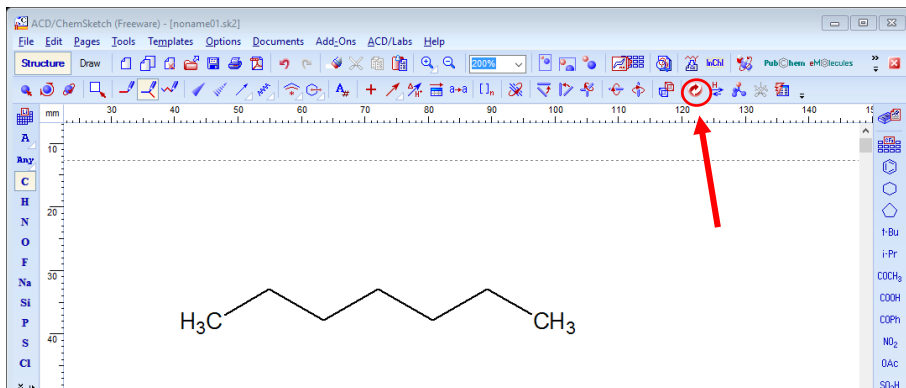


Figura 40. Molécula de heptano após clique na função limpar estrutura.

Já o desenho de cadeias (*Draw Chains*) monta estruturas ao se clicar e arrastar para se obter um número de átomos desejado na área de trabalho (Figura 41). A vantagem deste modo de desenho estrutural é que as cadeias geralmente ficam alinhadas de maneira proporcional, dificilmente sendo necessário usar a função *clean structure*.

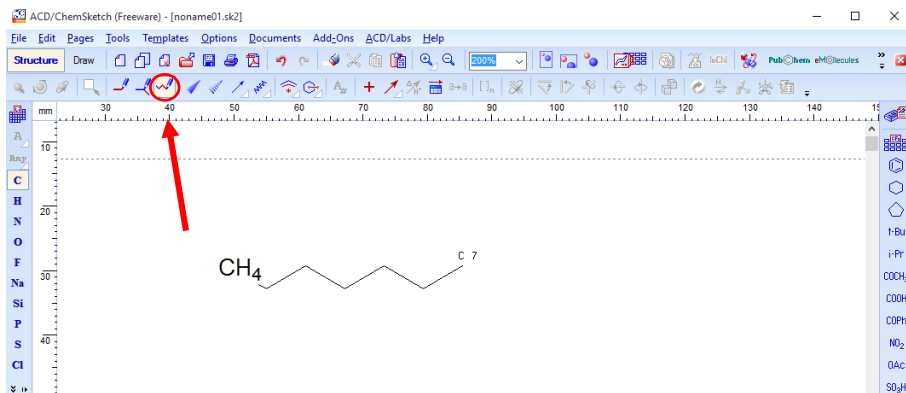


Figura 41. Molécula de heptano sendo montada na função *Draw Chains*.

Partindo da molécula do heptano, por exemplo, podemos abordar funcionalidades importantes para o desenho de cadeias

orgânicas. Para inserir uma ligação dupla, basta clicar sobre uma ligação simples (Figura 42).

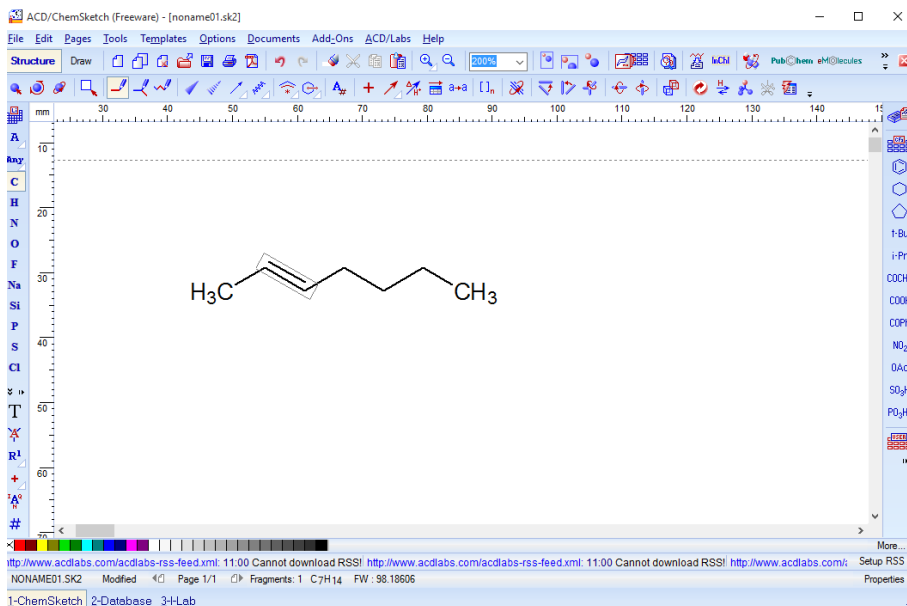


Figura 42. Inserção de uma dupla ligação na cadeia do heptano para formar o hept-2-eno.

Se a ligação dupla ficar posicionada na parte de cima da cadeia, através da opção *Change Position* (mudança de posição), podemos orientá-la para baixo ou no centro (Figura 43).

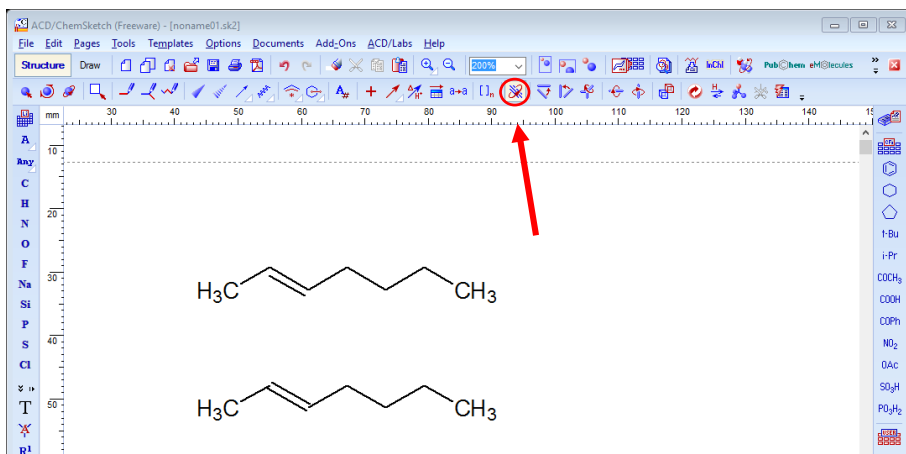


Figura 43. Mudança de orientação das ligações duplas.

Para inserir uma ligação tripla, basta clicar sobre a ligação dupla (Figura 44). Um novo clique sobre a ligação tripla, torna a ligação simples novamente.

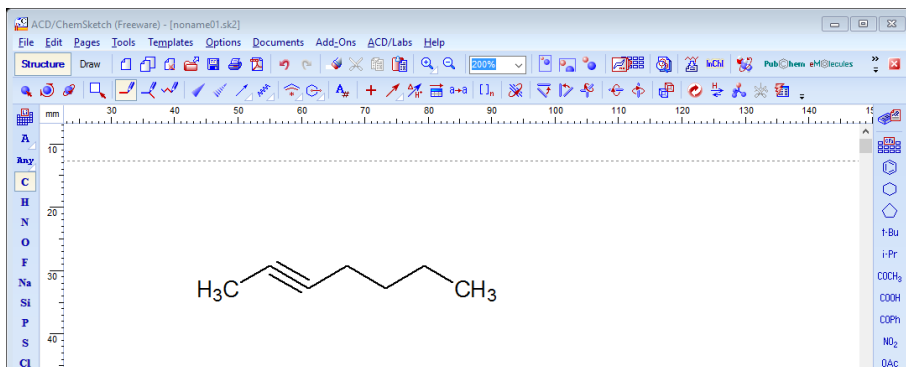


Figura 44. Inserção de uma tripla ligação na cadeia do hep-2-eno para formar o hept-2-ino.

Para incluirmos ramificações basta clicarmos sobre os carbonos da molécula (ou seja, nos vértices), ou então clicar em uma área da área de trabalho e arrastar para algum vértice da cadeia (Figura 45 e 46).

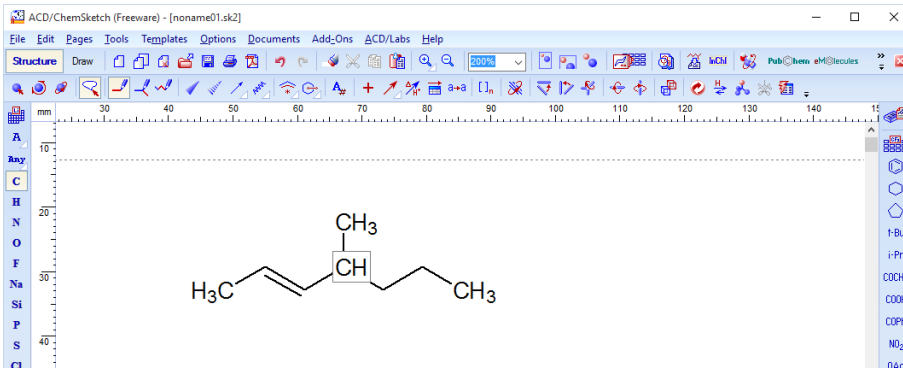


Figura 45. Inserção de uma ramificação (-CH<sub>3</sub>) clicando sobre um carbono da cadeia.

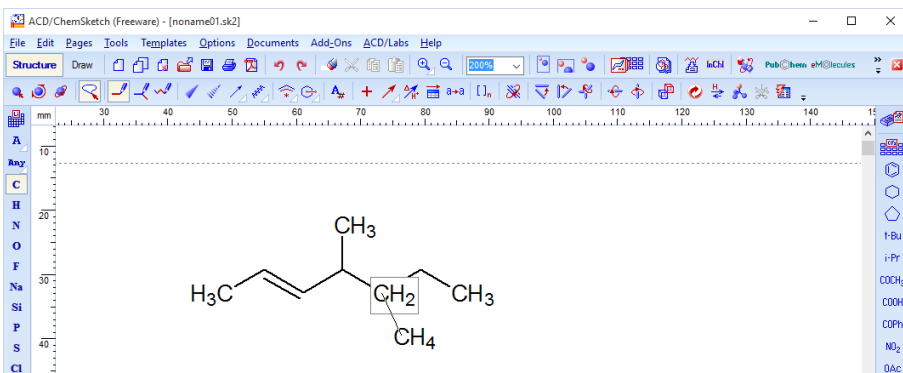


Figura 46. Inserção de uma ramificação clicando e arrastando o ligante para a cadeia.

Caso você deseje apagar parte da molécula, pode-se usar o botão delete do programa (Figura 47).



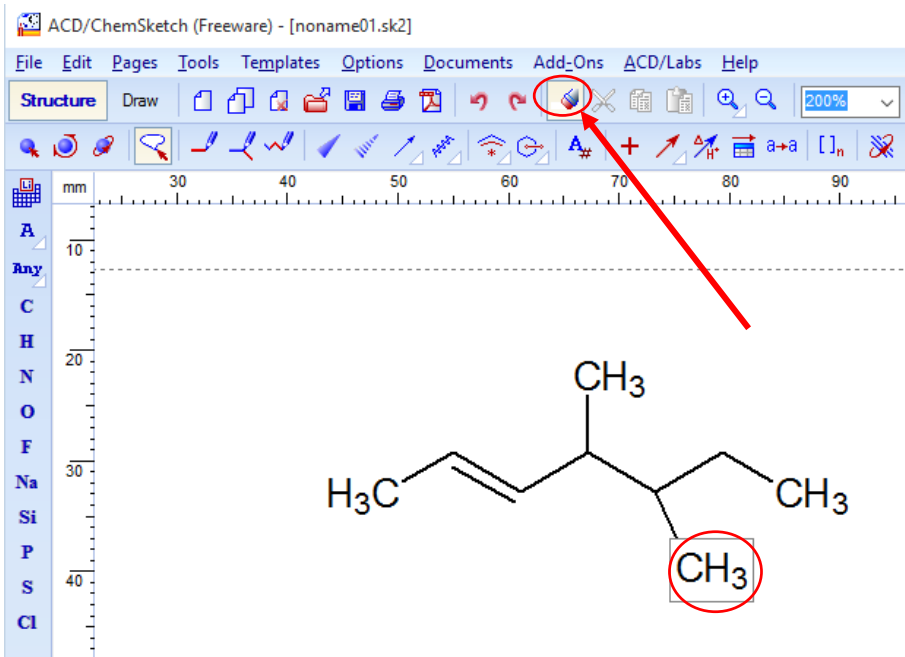


Figura 47. Apagando parte da molécula.

Da mesma maneira que inserimos ramificações alquílicas, podemos inserir radicais com outros elementos presentes na barra de átomos.

Primeiramente, selecionamos o elemento que desejamos inserir na cadeia, por exemplo nitrogênio (N), após isso clicamos em um vértice da molécula e arrastamos para posicionar o radical (Figura 48). Observe que o programa calcula as valências do elemento (no N são três) e completa das ligações com hidrogênios (H).

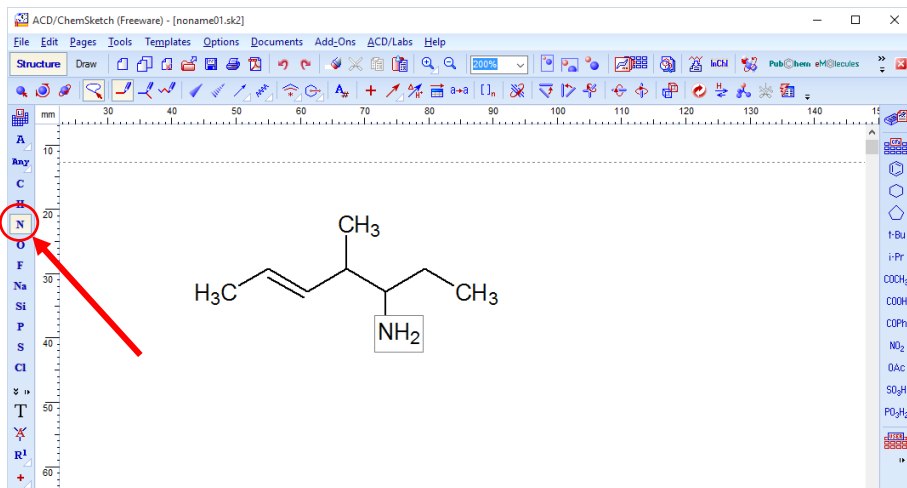


Figura 48. Adição de um radical  $\text{-NH}_2$ , ao clicar sobre um carbono e arrasta para a posição desejada.

Para adicionar uma ligação dupla entre o carbono e o nitrogênio da estrutura que estamos usando como exemplo, basta clicarmos sobre a ligação simples existentes entre os átomos destes elementos (Figura 49).

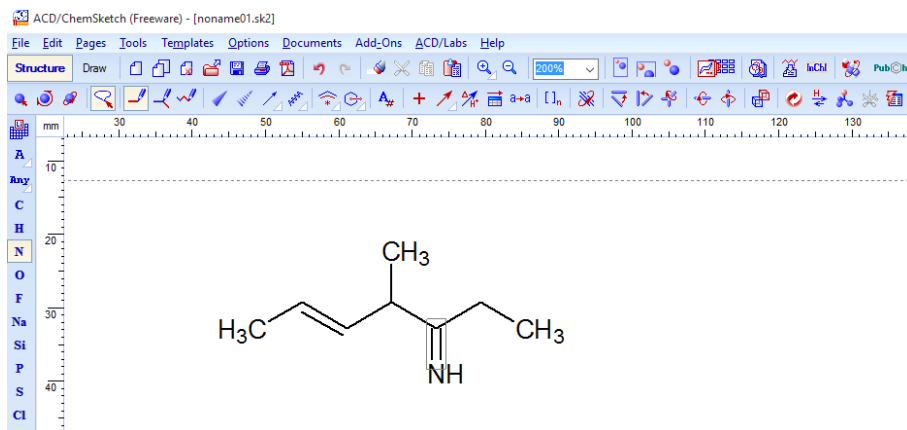


Figura 49. Adição de uma insaturação (ligação dupla).

É possível substituir átomos em uma cadeia por outros de elementos diferentes. Na figura 50, foi selecionado o oxigênio (O), na barra de átomos, em seguida foi clicado sobre o grupo metila mais à direita. Observe que o programa adicionou um hidrogênio ao oxigênio, formando um grupo hidroxila (-OH).

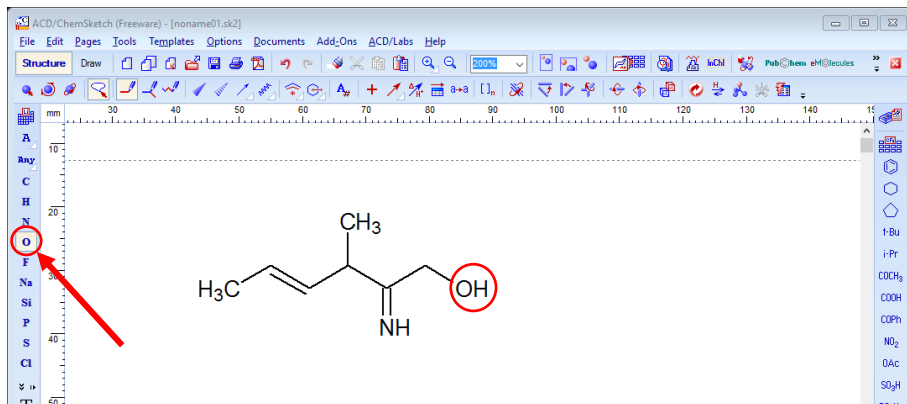


Figura 50. Substituição de um grupo metila por uma hidroxila.

Caso o elemento desejado não esteja na barra de átomos, é necessário que seja acessado a Tabela Periódica dos Elementos Químicos. Vejamos, na Figura 51, a seleção do elemento Boro para sua inserção na cadeia. Com o Boro selecionado na barra de átomos, podemos adicioná-lo à estrutura orgânica desenhada (Figura 52). Desta forma, é possível utilizar qualquer elemento presente na Tabela Periódica para o desenho da estrutura desejada.

Periodic Table of Elements

1	B Boron 5																18	
H	Mass: 10.811 Valence: 3 Electron configuration: 2-3																He	
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg							
		* La Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu D																
		** Ac Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md No Lr T																

General NMR Mass Coloration

Characters : monoclinic yellow or brown amorphous powder  
 Discoverer : 1808, Sir H.Davy, England and L.J.Lussac and L.J.Thernard, France  
 Name Origin : from 'buraq' (Arabic) - borax Density, g/cm3 : 2.34  
 Atomic Radius, A : 0.84 Ionization Potential, kJ/mol : 801 Melting Point, K : 2573  
 Electronegativity : 2.04 Electron Affinity, kJ/mol : 26.7 Boiling Point, K : 3931

OK Cancel Help

Figura 51. Seleção do elemento Boro na Tabela Periódica.

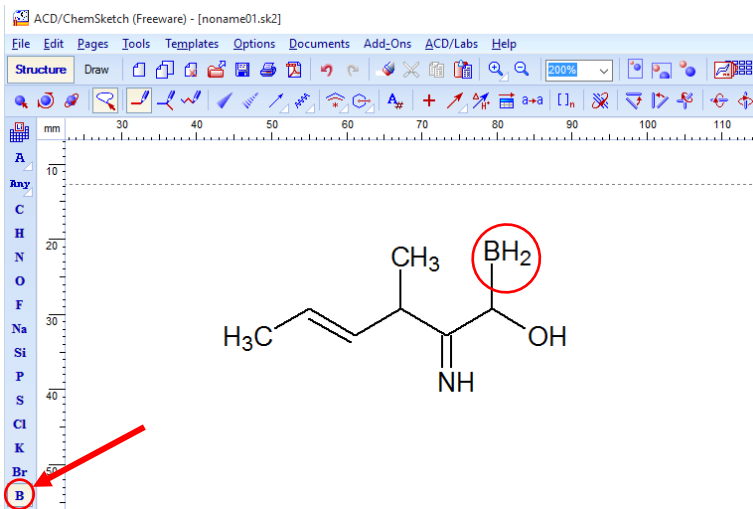


Figura 51. Inserção do elemento Boro na cadeia.

O *ChemSketch* permite a seleção de partes da estrutura com a função Lasso (Figura 52). Ela pode ser usada para, por exemplo, selecionar partes da cadeia que desejamos apagar com a função delete.

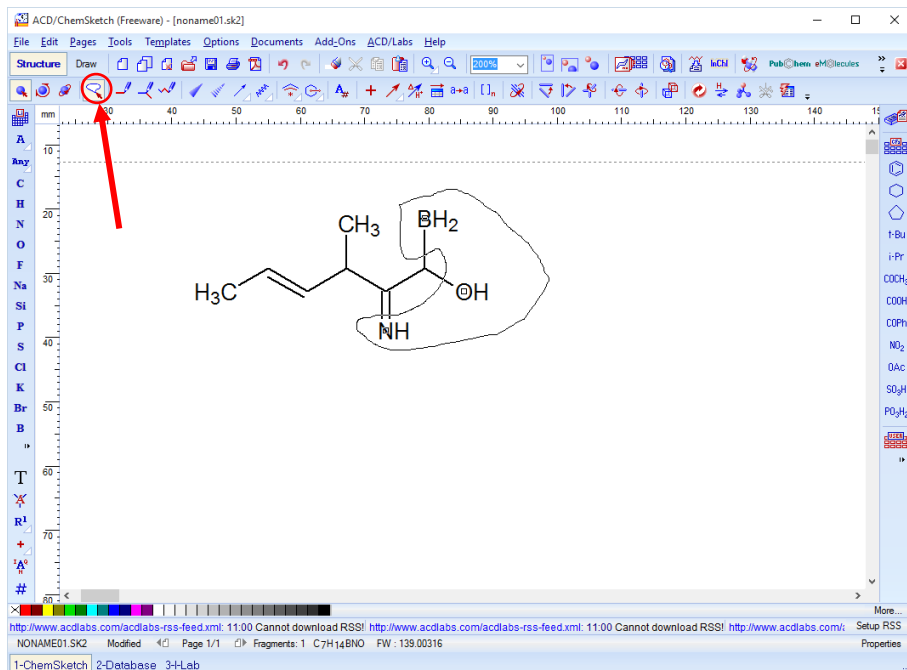


Figura 52. Seleção de parte da estrutura orgânica com a função *Lasso*.

Ao se deletar a seleção mostrada na figura anterior, a estrutura voltar a ser de um hidrocarboneto (compostos que têm exclusivamente carbono e hidrogênio). Contudo, podemos inserir grupos de radicais predefinidos na barra de radicais ou na Tabela de Radicais (Figura 53). Na Figura 54, selecionamos um anel benzênico para adicioná-lo na cadeia carbônica desenhada.

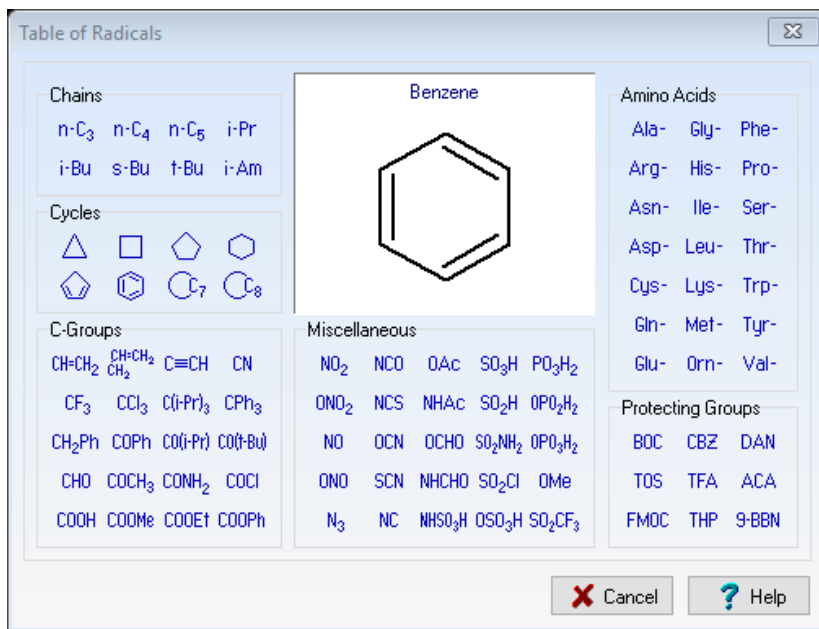


Figura 53. Tabela de Radicais.

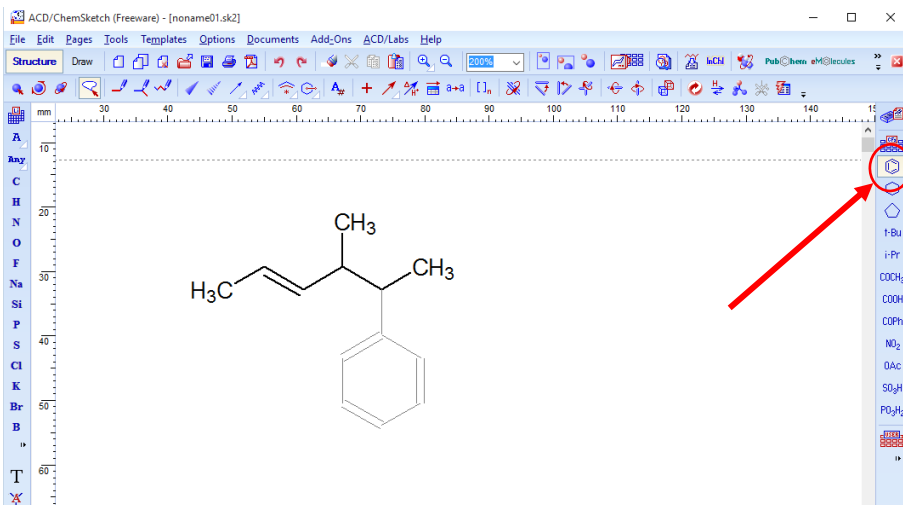


Figura 54. Adição de um anel aromático na estrutura.

## 5.2 Exportar, salvar e editar estruturas

Mesmo que seja prático desenhar estruturas simples, pode ser que seja conveniente salvar o trabalho que fizemos para continuação posterior. Para salvar o projeto, acessamos a barra de menus, opção *File* e *Save* (Figura 55), ou digitamos o comando  $\text{Ctrl}+\text{S}$ . Após isso, uma janela (Figura 56) se abrirá para que possamos escolher o local de salvamento do arquivo, formato desejado e o nome do arquivo.

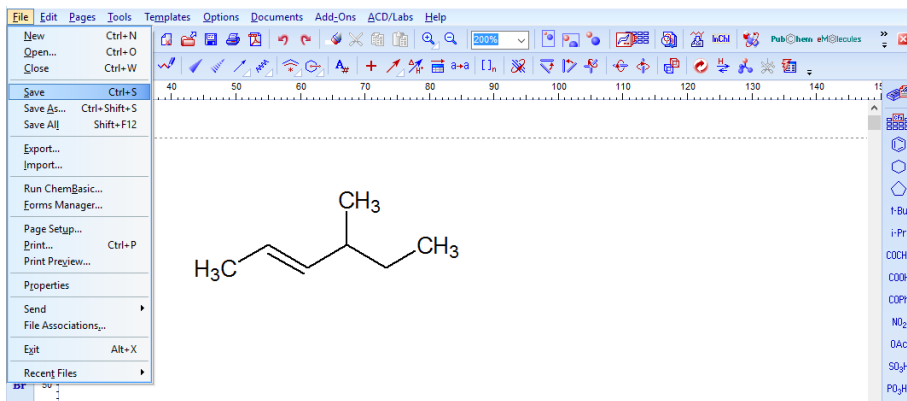


Figura 55. Salvando o projeto no *ChemSketch*.

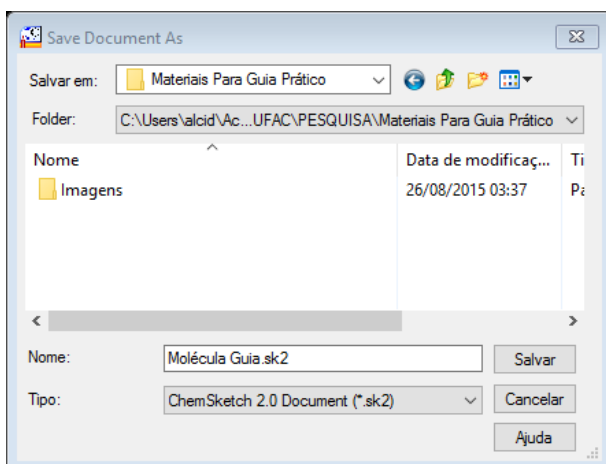


Figura 56. Opções de salvamento.

Existem vários formatos para se salvar o projeto realizado no programa. O padrão é o *ChemSketch 2.0 Document*, com a extensão .sk2. Neste formato, é possível realizar edições posteriores no arquivo através do *ChemSketch*. Outras extensões de formatos disponíveis para salvamento são: .mol; .skc; .rxn; .chm; .cdx; .cml; .pdf; .wmf; .emf; .bmp; .pcx; .tif; .gif; .png e .jpg.

Alguns destes formatos, como o .bmp, o .png; e o .jpg, salvam as estruturas como imagens, não permitindo elas serem abertas pelo *ChemSketch* para edição.

As estruturas desenhadas podem ser copiadas diretamente da área de trabalho do *ChemSketch* para um editor de texto (como o Microsoft Office, por exemplo). Para isso, deve-se selecionar a estrutura desejada e copiá-la através da opção *Edit>Copy* na barra de menu, ou através do comando Ctrl+C (Figura 57).

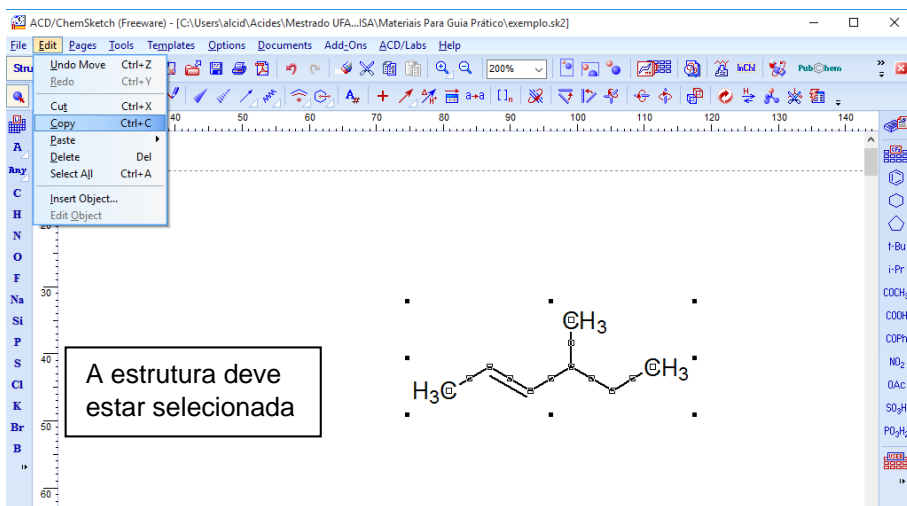


Figura 57. Copiando uma estrutura.

Posteriormente, a estrutura pode ser colada no editor de texto através da opção “Colar” ou usando o comando Ctrl+V (Figura 58).



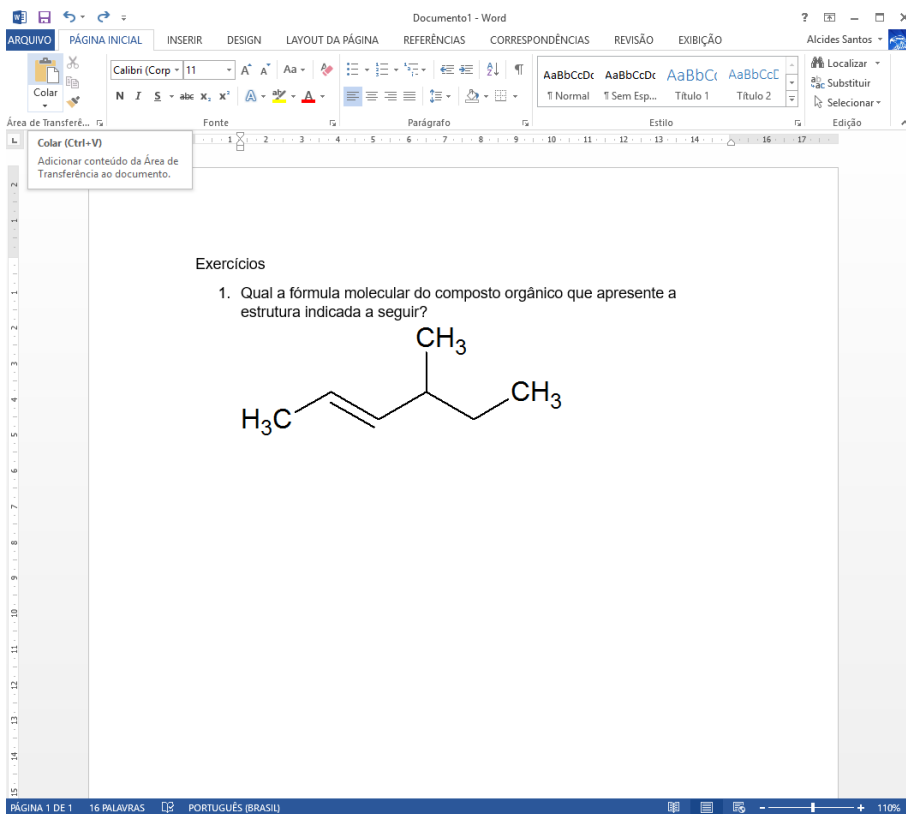


Figura 58. Colando uma estrutura.

É importante destacar que, se a estrutura for colada como imagem, não será mais possível realizar sua edição através do *ChemSketch*. Contudo, se colada no padrão de objeto *ACD/ChemSketch*, mesmo sem que o programa esteja aberto, um clique dupla o abrirá automaticamente para a edição da estrutura, se necessário. No editor de texto, a estrutura ficará destacada através de linhas diagonais (Figura 59).

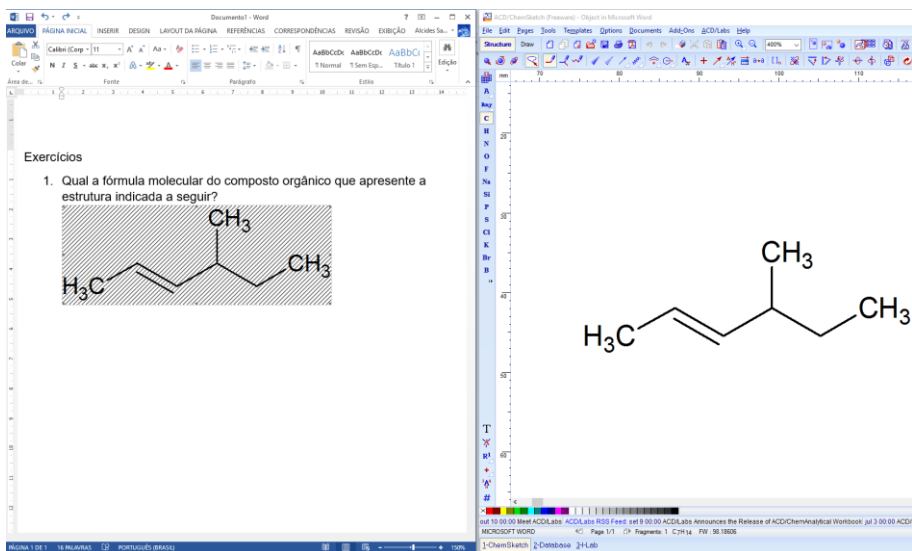


Figura 59. Edição de uma estrutura no *ChemSketch* para o *Microsoft Word* 2013.

Todas as alterações realizadas no *ChemSketch* serão, após fechamento e salvamento da área de trabalho, consideradas no editor de texto. Neste caso, uma janela surgirá (Figura 60) indagando sobre a atualização da estrutura no arquivo de origem.

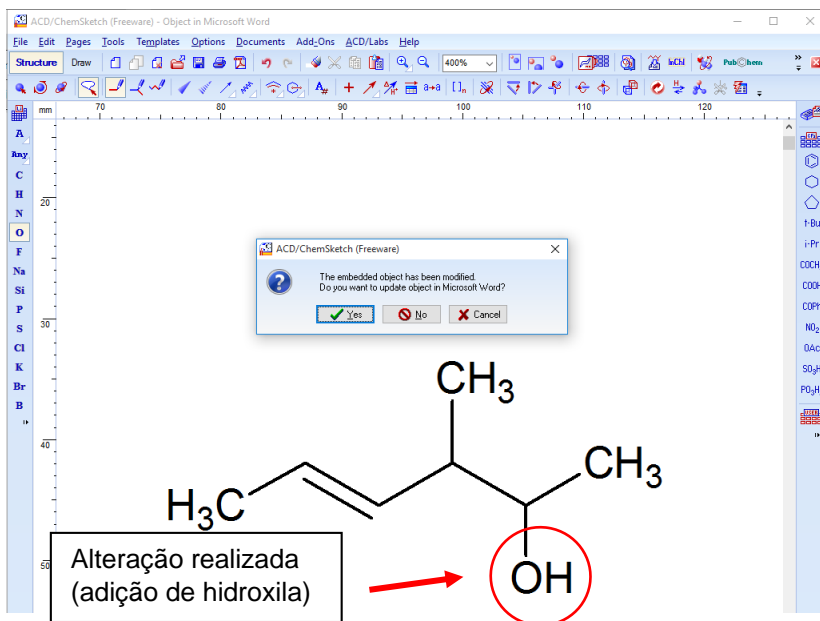


Figura 60. Atualização de uma estrutura para o Microsoft Word 2013.

## 6. EXPLORANDO AS ESTRUTURAS E SUAS PROPRIEDADES

O *ChemSketch Freeware* permite a determinação de várias informações e propriedades das estruturas desenhadas. Vejamos algumas dessas funções.

### 6.1 Gerando nomes para as estruturas

É possível obter nome (em inglês) de estruturas orgânicas com até 50 átomos no total. Vejamos um exemplo na Figura 61.

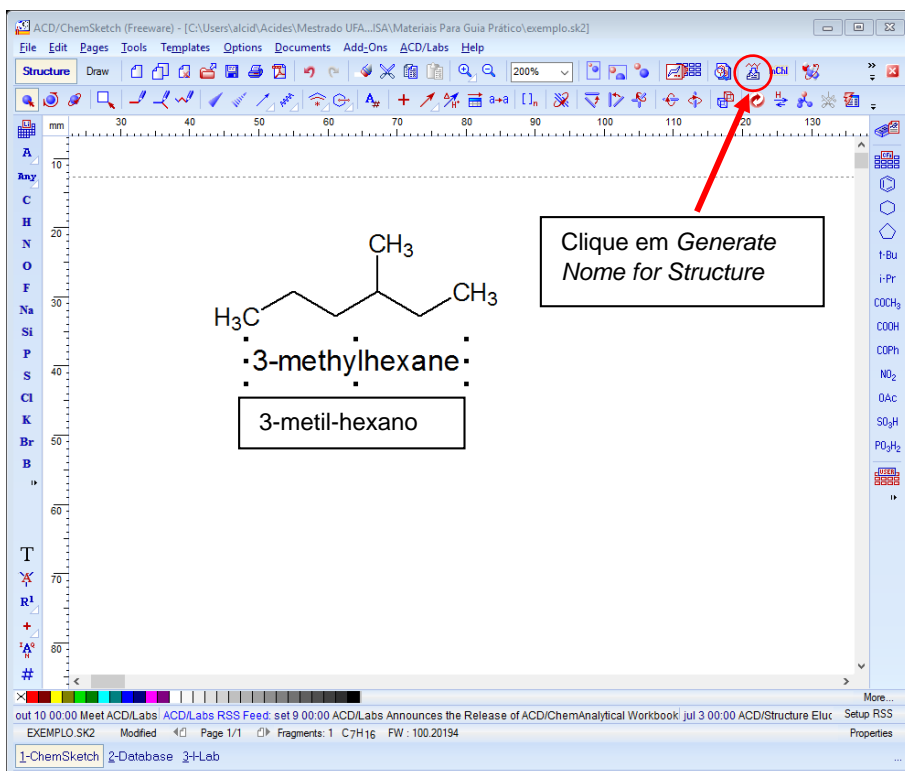


Figura 61. Gerando nome para uma estrutura.

No caso de haver duas estruturas desenhadas, se a soma de seus átomos não superarem 50 ou apresentem mais de 3 ciclos, o

programa fornece o nome para as estruturas (Figura 62). Também é possível selecionar qual das estruturas deve ter o nome fornecido, utilizando a opção *move/select*.

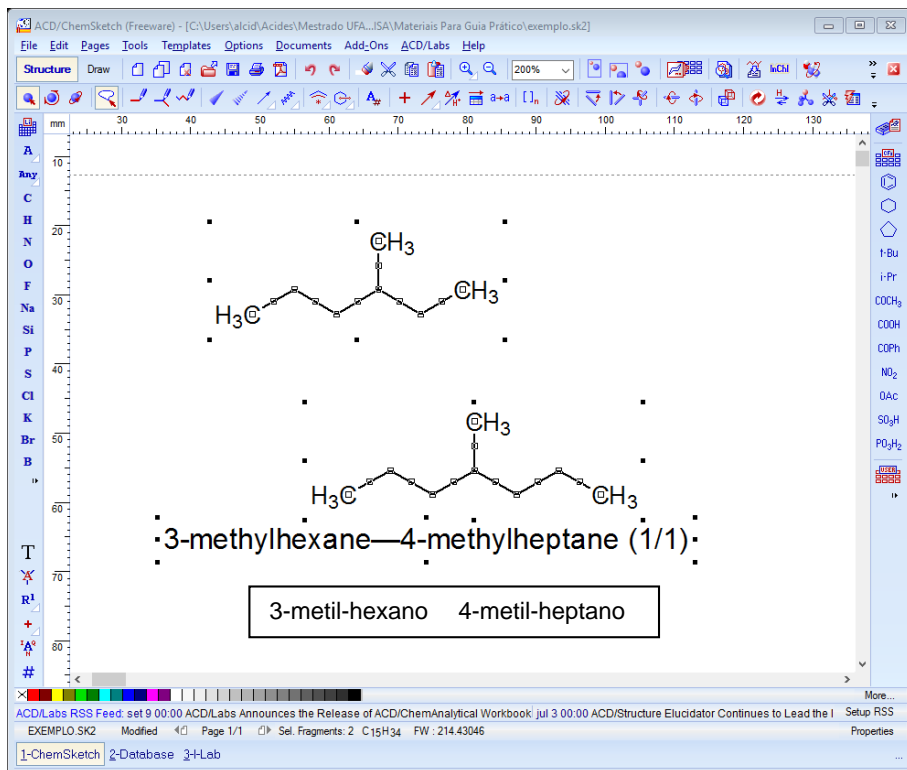
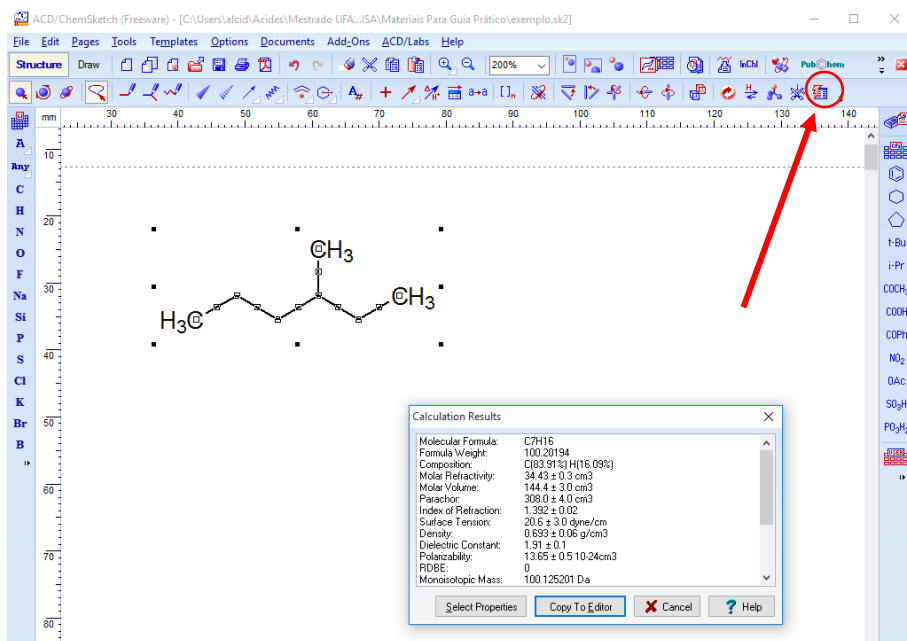


Figura 62. Gerando nome para duas estruturas.

O nome da estrutura também pode ser fornecido através do comando **Ctrl+Shift+I**. Ultrapassando 50 átomos ou três ciclos, uma mensagem é mostrada ao se solicitar a geração do nome para a estrutura, indicando que somente através da versão comercial isso é possível.

## 6.2 Determinando propriedades para a molécula

Para se obter algumas propriedades físicas da estrutura desenhada, selecione-a e clique no comando “*Calculate Selected Properties*” para ter todas as propriedades disponíveis (Figura 63).



The screenshot shows the ChemSketch interface with a skeletal structure of 2,3-dimethylbutane. A red arrow points to the 'Calculate Selected Properties' icon in the toolbar. The 'Calculation Results' dialog box is open, displaying the following data:

Calculation Results	
Molecular Formula:	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>
Formula Weight:	100.20194
Composition:	C(83.91%) H(16.09%)
Molar Refractivity:	34.43 ± 0.3 cm <sup>3</sup>
Molar Volume:	144.4 ± 3.0 cm <sup>3</sup>
Parachor:	308.0 ± 4.0 cm <sup>3</sup>
Index of Refraction:	1.392 ± 0.02
Surface Tension:	20.6 ± 3.0 dyne/cm
Density:	0.693 ± 0.06 g/cm <sup>3</sup>
Dielectric Constant:	1.91 ± 0.1
Polarizability:	13.65 ± 0.5 10 <sup>-24</sup> cm <sup>3</sup>
RDBE:	0
Monoisotopic Mass:	100.125201 Da

Figura 63. Obtenção de propriedades de uma estrutura.

Ao se clicar em *Copy To Editor*, todas as propriedades selecionadas serão informadas na área de trabalho do *ChemSketch* (Figura 64).

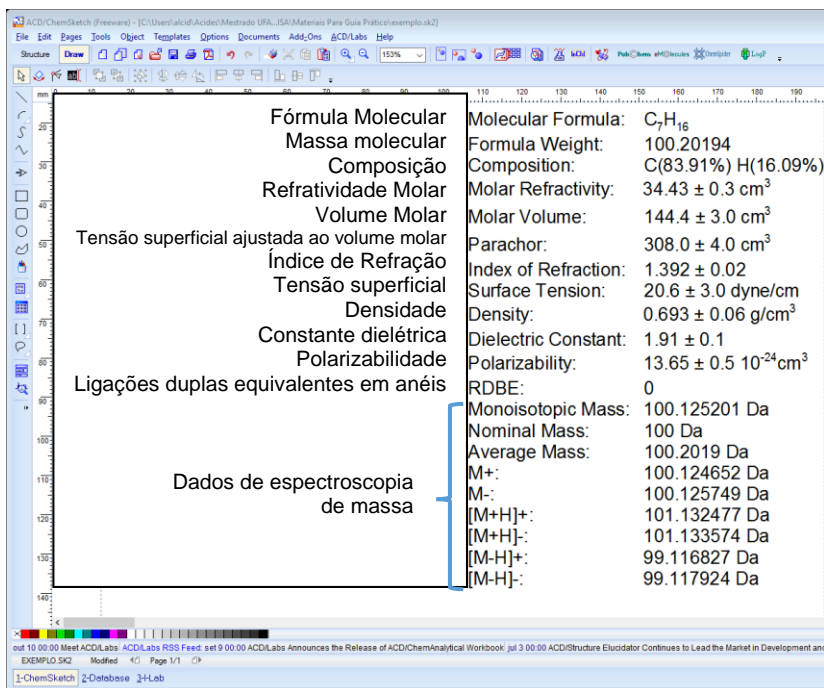


Figura 63. Detalhamento das propriedades calculadas pelo *ChemSketch* para uma estrutura.

Algumas das propriedades calculadas pelo *ChemSketch* são aproximadas e contêm uma margem de erro para mais ou menos. Para se obter essas propriedades individualmente, basta selecionar a estrutura e, na barra de menu, clicar na sequência: *tools>calculate>* e a propriedade desejada.

Outra função importante é a visualização de carbonos quirais ou assimétricos. Inicialmente, recomendamos selecionar os dados estereoquímicos a serem descritos. Para isso, acesse *tools>generate>stereo descriptors options* e marque todas as três opções disponíveis na janela que será aberta (Figura 64) e clique em OK.

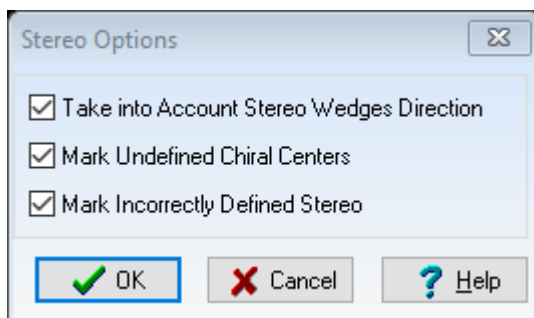


Figura 64. *Stereo Options*.

Desta forma, para se verificar a presença de centros quirais acesse *tools>generate>stereo descriptors*. A presença de carbonos quirais serão indicadas com um asterisco em azul (\*), de acordo com a Figura 64.

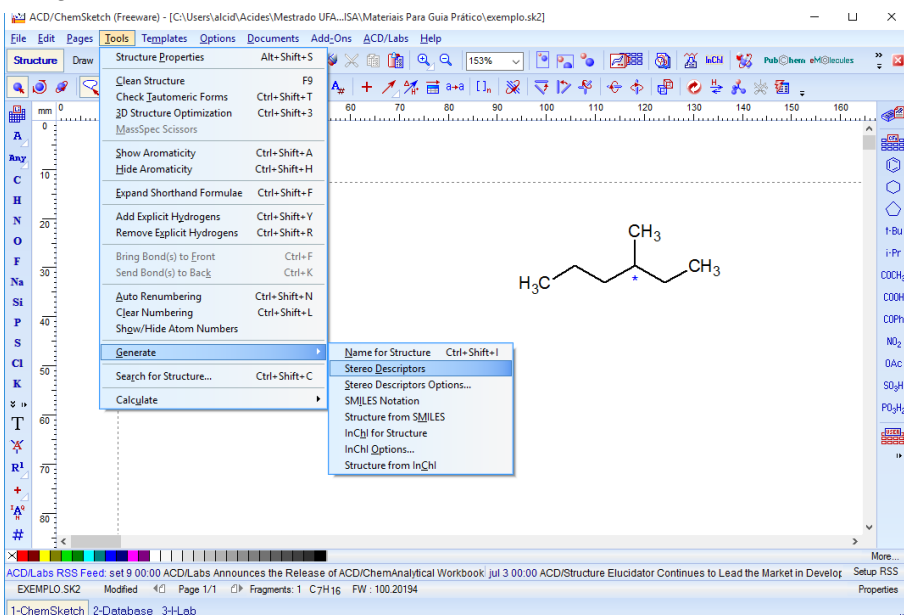


Figura 64. Gerando *Stereo Descriptors*.



Se as ligações estereoquímicas estiverem sendo indicadas na estrutura, o *ChemSketch* é capaz de indicar se os centros assimétricos são do tipo R ou S. Para inserir essas ligações é necessário selecioná-las e clicar sobre a ligação desejada na estrutura (Figura 65).

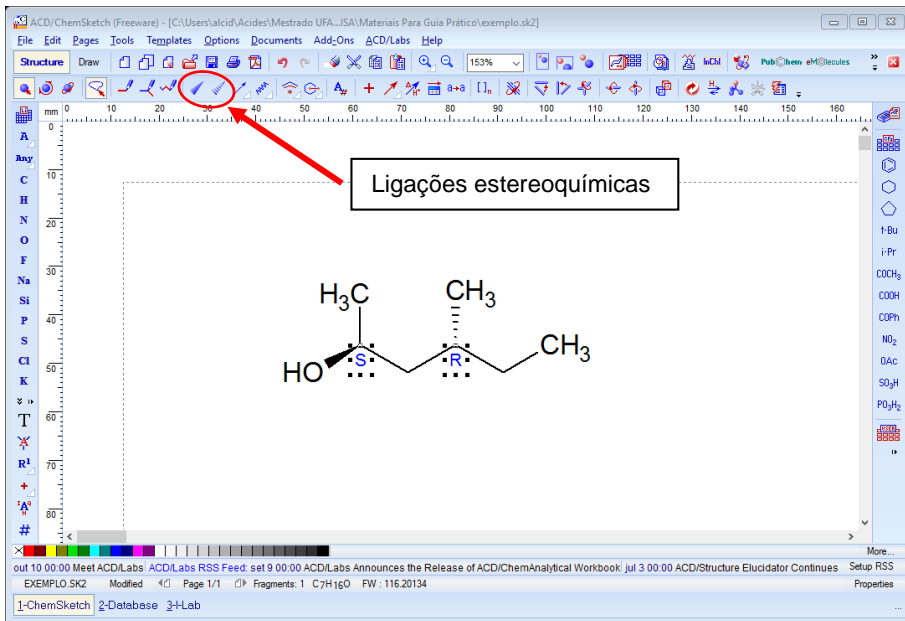


Figura 65. Gerando *Stereo Descriptors* com ligações estereoquímicas.

Ressalta-se que, os nomes gerados para estruturas com ligações estereoquímicas terão identificação da nomenclatura R ou S quando possível. Caso contrário, apenas o nome geral será mostrado. Além disso, compostos que apresentam isomeria do tipo E/Z também recebem seu nome considerando essa característica. A Figura 66 mostra algumas possibilidades ao se gerar o nome de uma estrutura desenhada no *ChemSketch*.

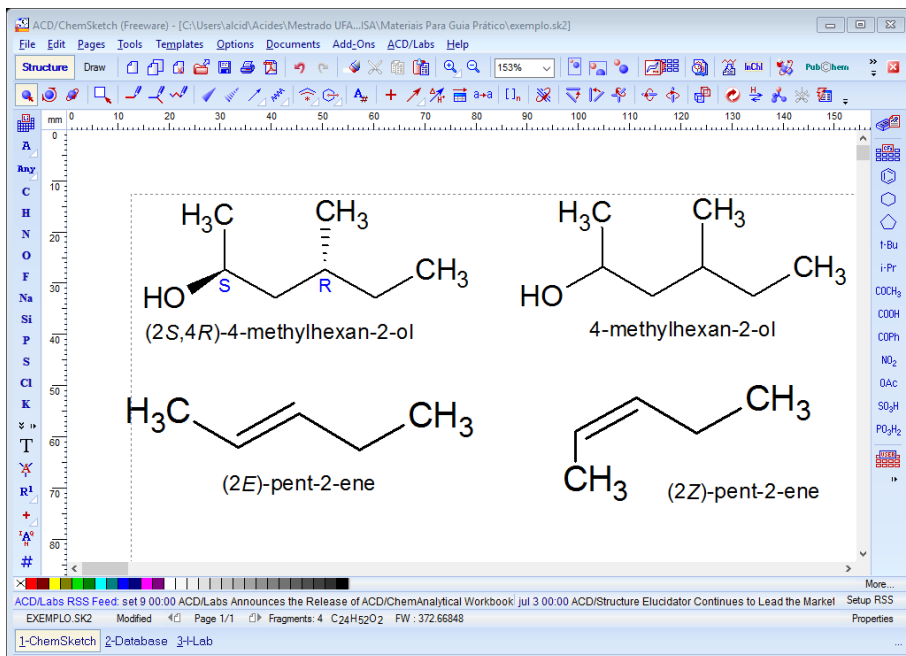


Figura 66. Nomes e estruturas geradas pelo *ChemSketch*.

## 7. VISUALIZAÇÃO E MANIPULAÇÃO EM 3D

O *ChemSketch*, além de desenhar estruturas químicas no plano, ele permite a visualização de moléculas em três dimensões de diferentes maneiras.

### 7.1 Opções tridimensionais no Modo Estrutura

Para manipular uma estrutura desenhada na área de trabalho do *ChemSketch*, é necessário selecionar toda a cadeia estrutural ou apenas parte dela. Posteriormente, podemos utilizar a função *3D Rotation* para girar tridimensionalmente a estrutura (Figura 67).

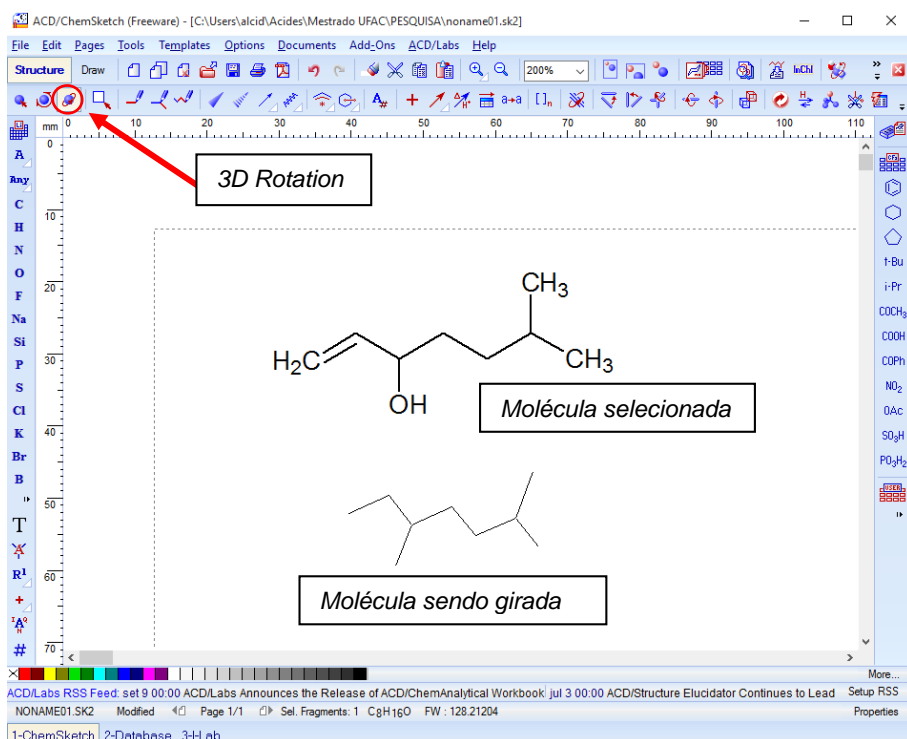


Figura 67. Apresentação da função *3D Rotation*.

Outra função interessante do programa é a *3D Optimization*. Ela possibilita a adequação da fórmula estrutural plana para uma conformação 3D. A visualização 3D mostra todos os átomos de hidrogênio. Vejamos o exemplo na Figura 68.

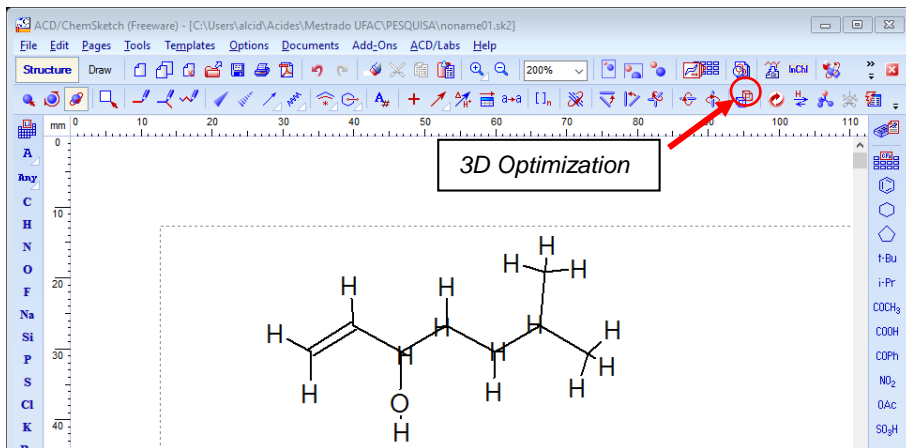


Figura 68. Apresentação da função *3D Optimization*.

Utilizando novamente a função *3D rotation*, é possível ter uma noção da distribuição dos átomos que forma a cadeia.

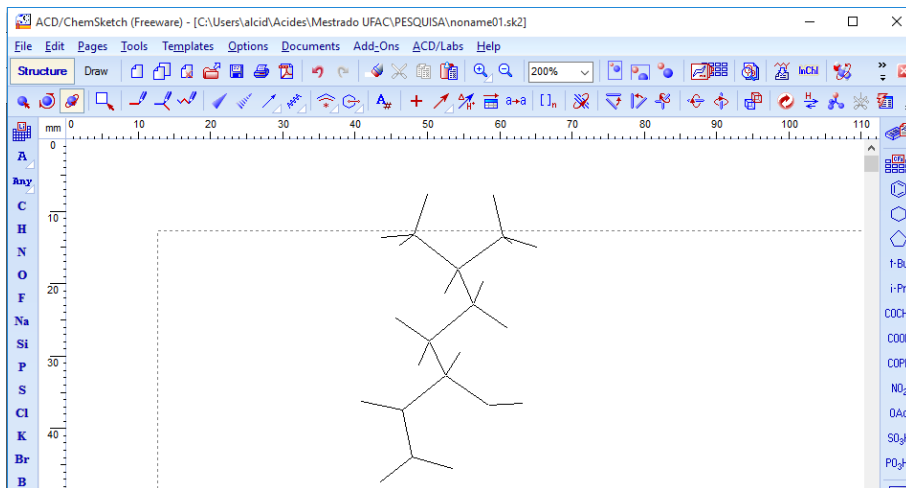


Figura 69. Visualização de uma molécula com a função *3D Rotation*.

## 7.2 3D Viewer

O *3D Viewer* é um *software* disponibilizado no pacote de instalação do *ChemSketch Freeware 2015* que permite a visualização de moléculas em 3D. Para acessar esse módulo é necessário clicar em *ACD/Labs* na barra de menu e depois em *1 3D Viewer (Freeware)*.

Contudo, por esse processo a estrutura já desenhada na área de trabalho do *ChemSketch* não é copiada automaticamente. Para isso, podemos clicar diretamente no ícone do *3D Viewer*, conforme apresentado na Figura 70.

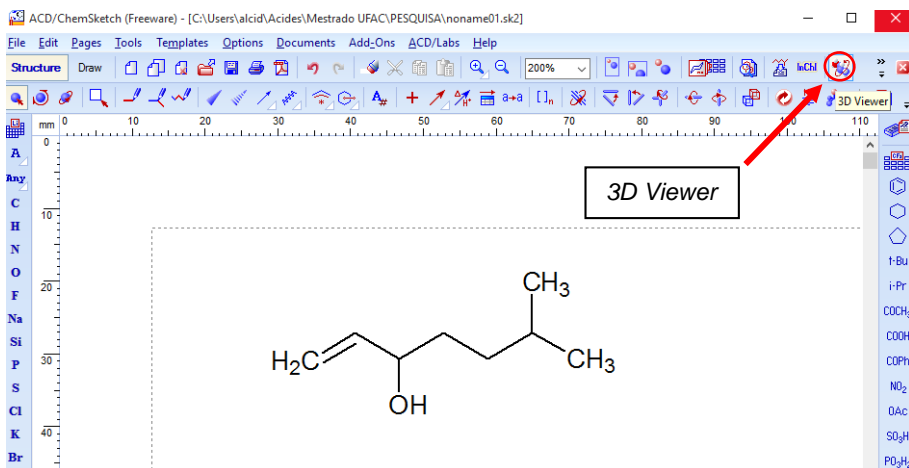


Figura 70. Acessando o *3D Viewer*.

O programa *3D Viewer* apresenta um aspecto bem diferente do *ChemSketch*. O fundo da área de trabalho é preta e existe uma barra específica para a manipulação 3D, conforme é mostrado na Figura 71.

Por padrão, os átomos de carbono são representados pela cor ciano, os de hidrogênio branco, oxigênio vermelho e nitrogênio azul. É possível personalizar as cores dos átomos e também do fundo da área de trabalho do *3d Viewer*, acessando no menu *Options* e depois *Colors...*

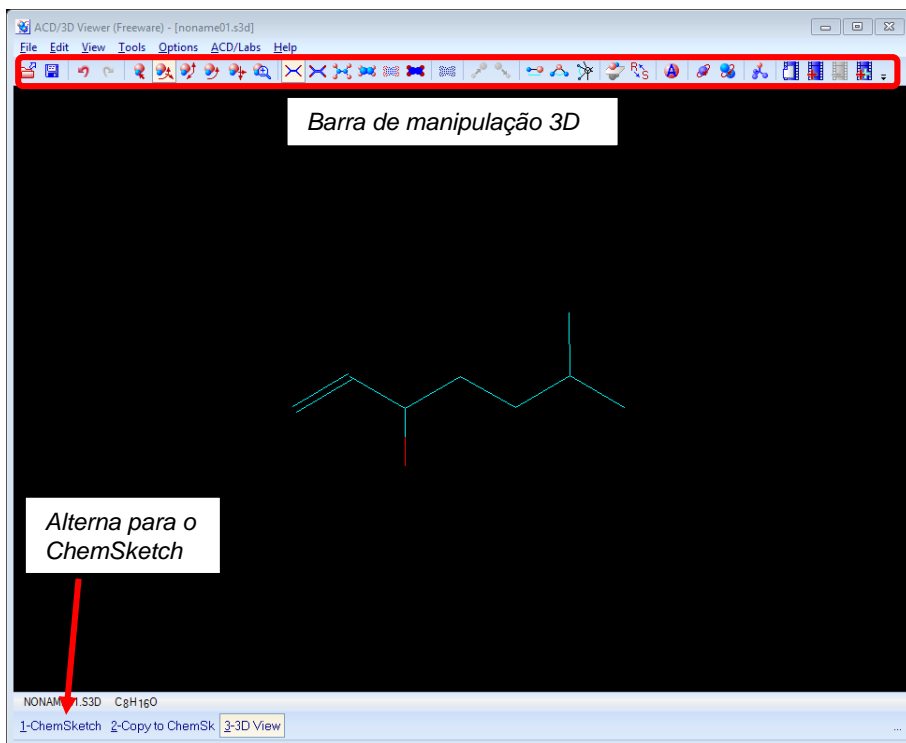


Figura 71. Visão geral do 3D Viewer.

## 7.2.1 Barra de manipulação do 3D Viewer

Na Figura 72, estão destacadas cada ferramenta disponível na barra do 3D Viewer. A seguir, buscamos explicar a função de cada um dos botões dessa barra. Para



Figura 72. Barra de manipulação do 3D Viewer.

1. *Open File*: permite abrímos um arquivo 3D criado no *ChemSketch*.
2. *Save File*: Este botão permite salvarmos o documento ativo no formato de visualização em 3D do *ChemSketch* (extensão .s3d). Para salvar com extensões diferentes (.mol, .mop, .zmt, .dat, .mpc e .cml) utilize o menu “File” e “Save as ...”.
3. *Undo*: Desfaz uma modificação realizada.
4. *Redo*: Refaz uma modificação realizada.
5. *Select Atoms*: Seleciona átomos específicos na molécula.
6. *3D Rotate*: Permite a rotação da molécula sobre qualquer eixo. Clique sobre o botão e faça a rotação arrastando o mouse em qualquer direção.
7. *Fixed Angle Rotation*: Permite girar a molécula através de cliques e com ângulo de rotação fixo.
8. *Rotate*: Permite a rotação da molécula sobre um único eixo central.
9. *Move*: Permite a movimentação da molécula para qualquer local a área de trabalho com um simples arrastar do mouse, sem que a molécula efetue qualquer tipo de rotação.
10. *Resize*: Permite aumentar ou diminuir o tamanho da molécula com um arrastar de mouse. Para aumentar o tamanho arraste o mouse para fora da molécula e para diminuir arraste o mouse para dentro da molécula.
11. *Wireframe*: Este tipo de representação 3D mostra a molécula na forma de “linhas”.

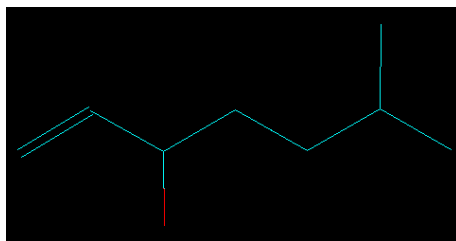


Figura 73. Molécula no modo *Wireframe*.

12. *Sticks*: Este tipo de representação 3D que mostra a molécula na forma de “bastões”.

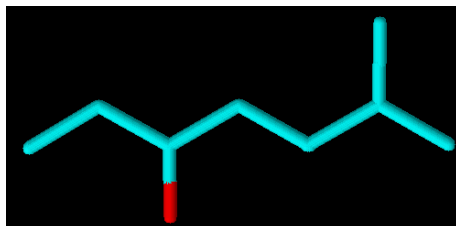


Figura 74. Molécula no modo *Sticks*.

13. *Balls and Sticks*: Este tipo de representação 3D que mostra a molécula na forma “bastões e bolas”.

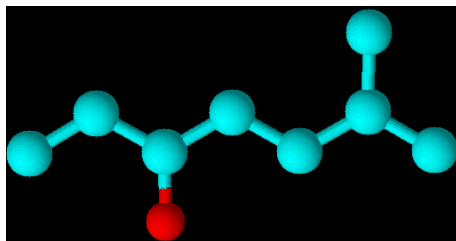


Figura 75. Molécula no modo *Balls and Sticks*.

14. *Spacefill*: Este tipo de representação 3D que mostra os espaços vazios da molécula “preenchidos”.

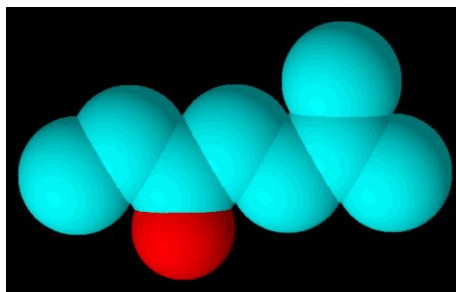


Figura 76. Molécula no modo *Spacefill*.



15. *Dots only*: Esse tipo de representação 3D mostra somente “pontos externos” da representação anterior.

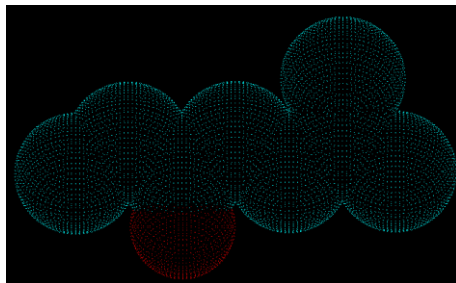


Figura 77. Molécula no modo *Dots only*.

16. *Disks*: Este tipo de representação em 3D mostra os átomos na forma de discos, muito semelhante à forma *Spacefill*, porém sem o efeito 3D.

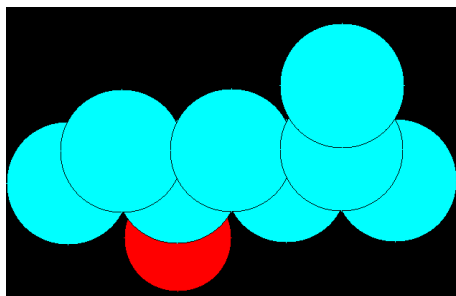


Figura 78. Molécula no modo *Disks*.

17. *With Dots*: Este botão mostra os “pontos externos” do modelo preenchido sobrepostos à uma das seguintes representações em 3D já apresentadas.

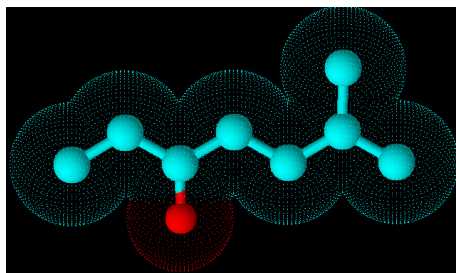


Figura 79. Molécula no modo *Balls and Sticks* com *With Dots*.

18. *Increase Atomic Radii*: Aumenta o tamanho dos átomos da molécula a uma taxa fixa de 5% no modelo paus e bolas.
19. *Decrease Atomic Radii*: Diminui o tamanho dos átomos da molécula a uma taxa fixa de 5% no modelo paus e bolas.
20. *Bond Length*: Permite determinarmos a distância entre dois átomos em Å (*angstrom*). Para determinar a distância entre dois átomos, clique primeiramente no botão “*Distance*” e após isso selecione dois átomos, clicando sobre eles. Os átomos selecionados para a avaliação ficam, por padrão, de coloração verde. Será aberta automaticamente a caixa de diálogo “*Internuclear Distance*”.

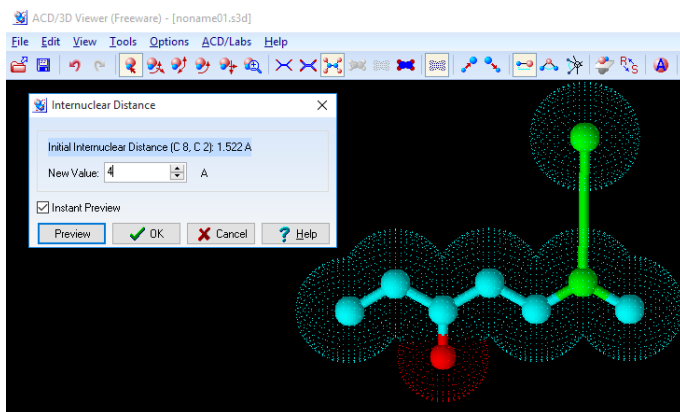


Figura 80. Alterando o tamanho de uma ligação.

21. *Angle*: Permite determinarmos o ângulo entre três átomos, em graus. Para determinar o ângulo de uma ligação, clique primeiramente no botão *Angle* e após isso selecione os três átomos, clicando sobre eles. Os átomos selecionados para a avaliação ficam, por padrão, de coloração verde. Será aberta automaticamente a caixa de diálogo *Bond Angle*.

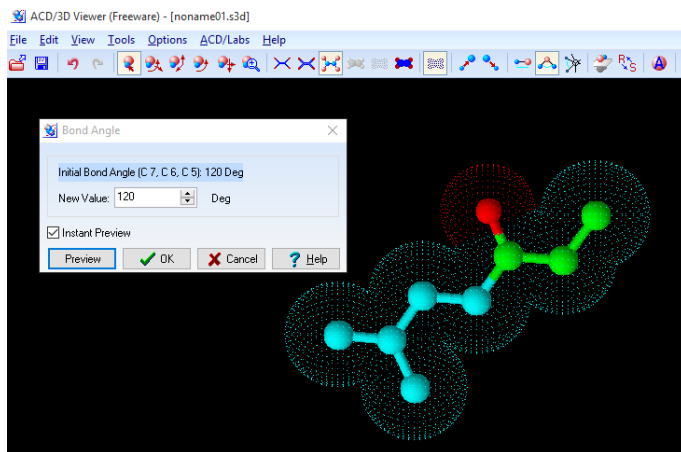


Figura 80. Alterando o ângulo entre ligações.

22. *Torsion Angle*: Permite determinarmos o ângulo de torção entre átomos, em graus. Para determinar o ângulo torsional, clique primeiramente no botão *Torsion Angle* e após isso selecione os átomos, clicando sobre eles. Os átomos selecionados para a avaliação ficam, por padrão, de coloração verde. Será aberta automaticamente a caixa de diálogo "*Torsion Angle*."

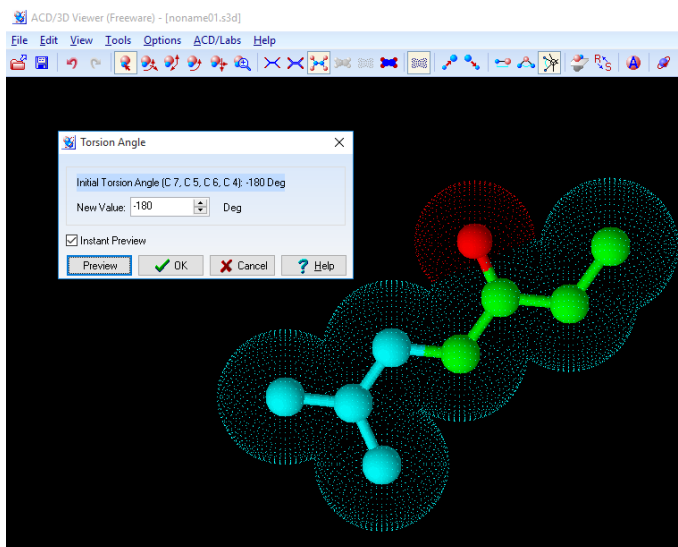


Figura 80. Alterando o ângulo de torção entre ligações.

23. *Mirror*: Este botão permite a conversão de um composto em sua imagem refletida em um espelho.
24. *Invert Center*: Este botão permite a conversão de um isômero R em isômero S. Para inverter um centro, clique sobre o botão *Invert Center*, dê um clique sobre o átomo de carbono quiral para marca-lo (ele ficará verde) e dê um segundo clique para inverter o centro quiral.
25. *Set Colors*: Este botão permite definirmos as cores tanto dos átomos e ligações, como também do átomo selecionado e do plano de fundo.

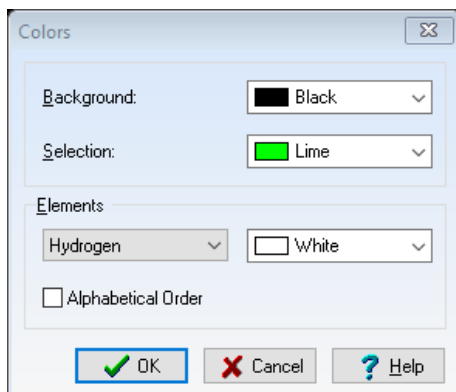


Figura 81. Alterando cores.

26. *Auto Rotate*: Este botão permite que a molécula adquira autorrotação em todas as direções.
27. *Auto Rotate and Change Style*: Além da autorrotação, este botão permite que o programa troque automaticamente o modo de visualização da molécula entre as disponíveis.
28. *3D Optimization*: Este botão permite otimizar a estrutura da molécula no formato 3D, incluindo os átomos de hidrogênio da molécula.

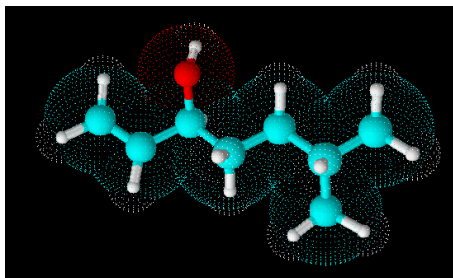


Figura 82. Molécula otimizada.

29. *New Frame Set*: Cria um projeto de captura de quadros para a imagem da molécula. Após a conclusão do projeto, é possível salvá-lo como uma imagem GIF animada (arquivo de imagem movimentada).

30. *Add Frame*: Adiciona um quadro da imagem da molécula.
31. *Delete Frame*: Exclui um quadro da imagem da molécula.
32. *Auto Add Frames*: Abre uma caixa de diálogo com a opção de adicionar quadros automaticamente.

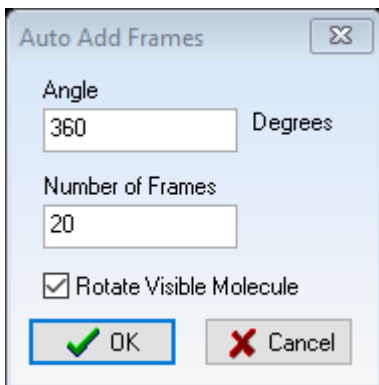


Figura 83. Opções no *Auto Add Frames*.

Para salvar o projeto animado, basta clicar em *File>Save>Animated GIF images*. Salvando o projeto desta forma, o desenho da molécula com movimento pode ser adicionado em uma página na internet, em uma apresentação em slides, em redes sociais, por exemplo.

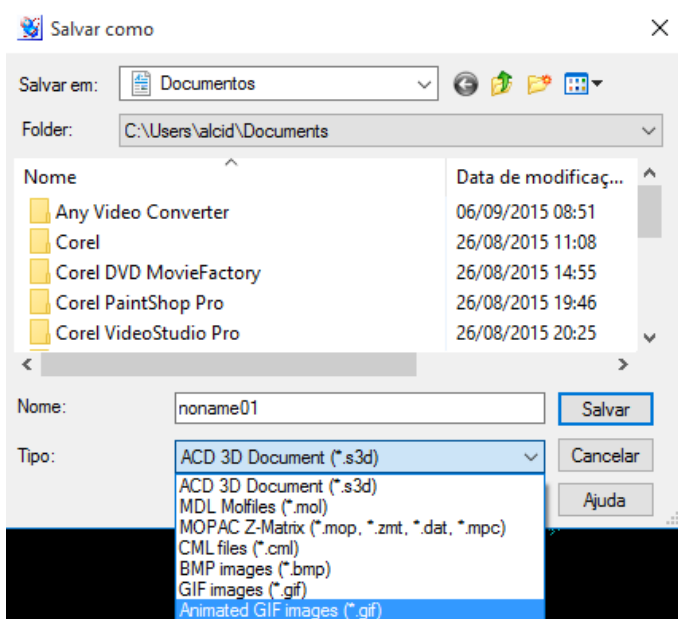


Figura 84. Salvando uma molécula 3D animada em GIF.

Apenas salvando no formato *GIF images*, é possível utilizar a imagem estática da molécula em 3D, por exemplo, em um editor de texto. Opções adicionais de personalização do 3D Viewer podem ser acessadas na barra de menu do programa.

## 8. BASE DE DADOS CHEMSKETCH

Uma série de dados na forma de estruturas, imagens e símbolos podem ser acessadas e utilizadas facilmente no *ChemSketch*. Além da tabela periódica, da tabela de radicas e dos *templates*, o software permite uma investigação sobre as estruturas desenhadas em bases de dados internacionais de substâncias.

### 8.1 Template Window

O *template window* é uma base de dados *off-line* (não precisa de internet para acessá-la). A seguir veremos algumas das principais informações contidas nessa função do *ChemSketch*.

Para acessar o *template window* basta clicar sobre o ícone



, pressionar f5 ou através da barra de menu: *Templates>Template Window*. Uma janela é aberta com uma série de opções para serem consultadas e inseridas na área de trabalho do programa.

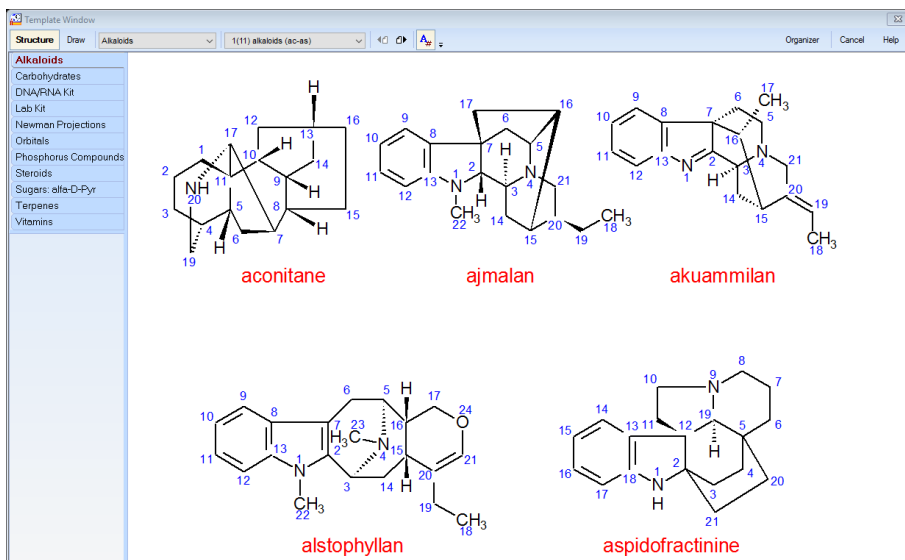


Figura 85. *Template Window*.



Na parte superior esquerda da janela é possível selecionar em qual modo de trabalho a estrutura deve ser inserida: *Structure* ou *Draw*. A navegação nos dados disponíveis pode ser realizada na barra lateral esquerda ou através de um menu com todas as classes de dados disponíveis (Figura 86).

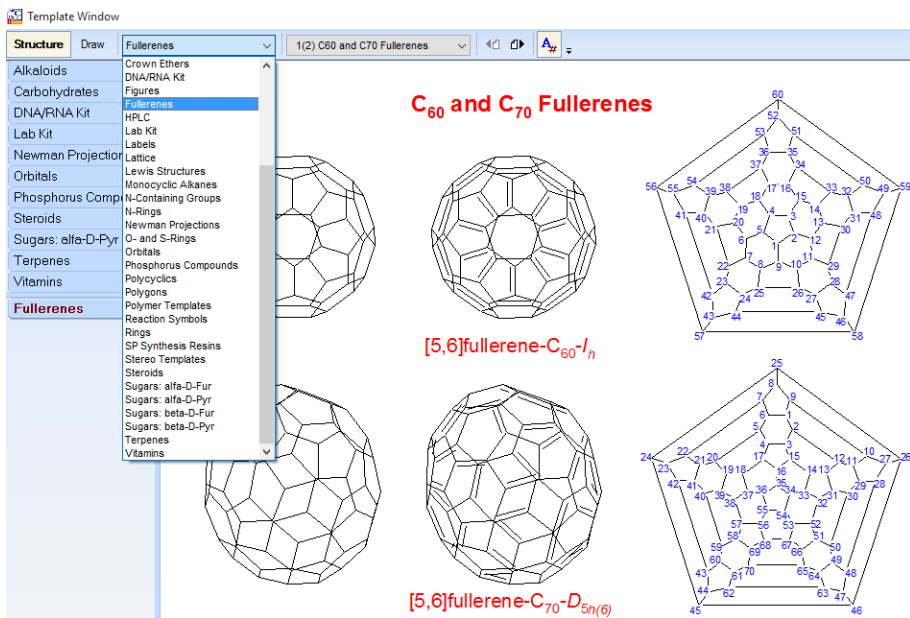



Figura 86. Opções no *Template Window*.

A presença dos ícones  indicam a presença de mais de uma página de modelos da classe selecionada, no caso da Figura 87, os fulerenos.

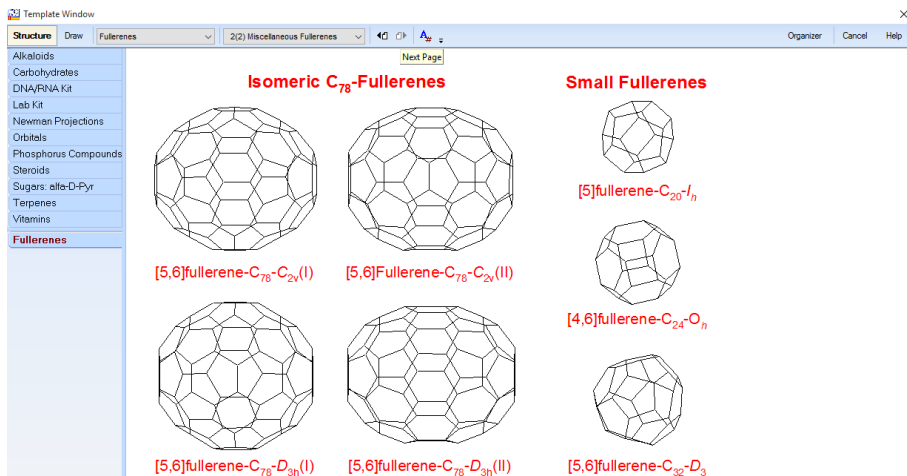


Figura 87. Tipos de fulerenos.

Clicado em *Organizer*, uma janela é apresentada na qual podemos selecionar quais classes de *templates* devem ser mostradas na barra lateral do *template window* (Figura 88).

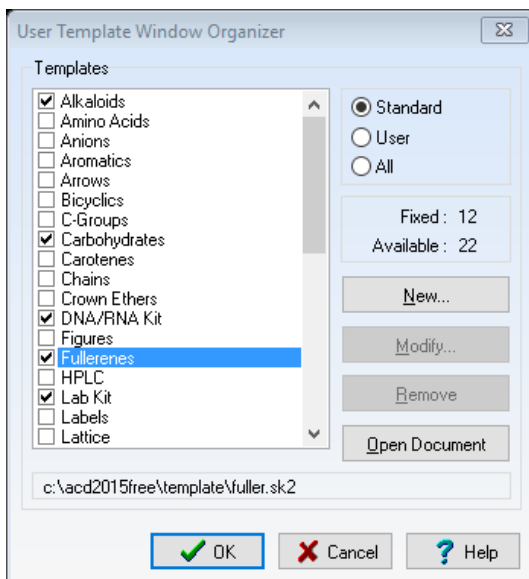


Figura 88. Organizador dos *templates*.

As principais classes de estruturas disponíveis no *Template Window* são: alcaloides, aminoácidos, aromáticos, carboidratos, carotenos, cadeias de hidrocarbonetos, bases de DNA e RNA, polímeros, esteroides, açúcares, terpenos e vitaminas. Ao se selecionar alguma destas estruturas, o template será copiado para ser colado no modo *Structure*.

Além das estruturas orgânicas, um grande conjunto de símbolos e figuras também compõem a base de dados do *Template Window*. Dentre eles, destacam-se setas, figuras, kit de laboratório (Figura 89), etiquetas, estruturas de Lewis, orbitais, polígonos e símbolos reacionais. Ao se selecionar um destes símbolos ou figuras, o objeto será copiado para ser colado no modo *Draw*.

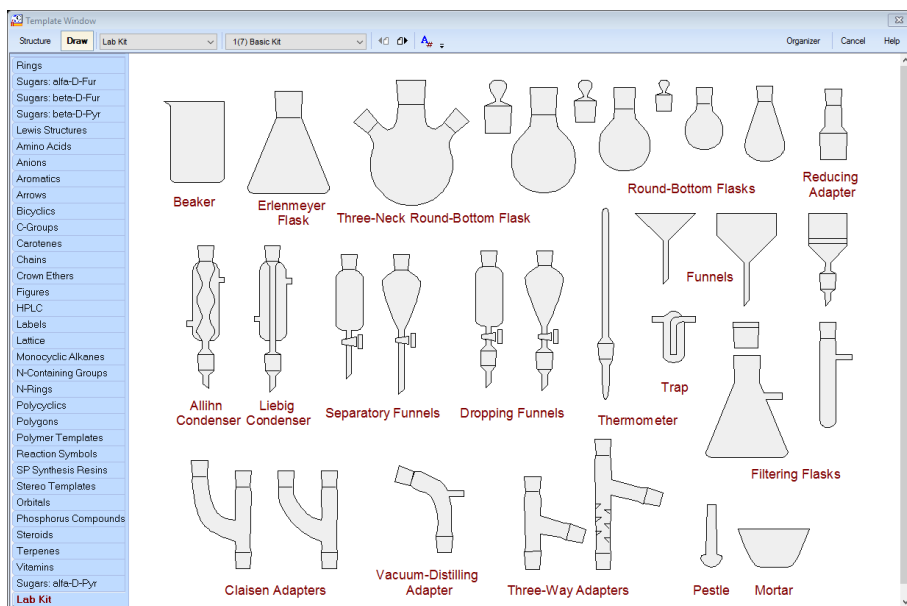


Figura 89. Página 1 de 7 do Kit de laboratório dos *templates*.

Não é possível adicionar mais de um objeto por vez, contudo não há limitação de objetos na área de trabalho do *ChemSketch*, podendo apresentar estruturas moleculares e figuras ao mesmo tempo (Figura 90).

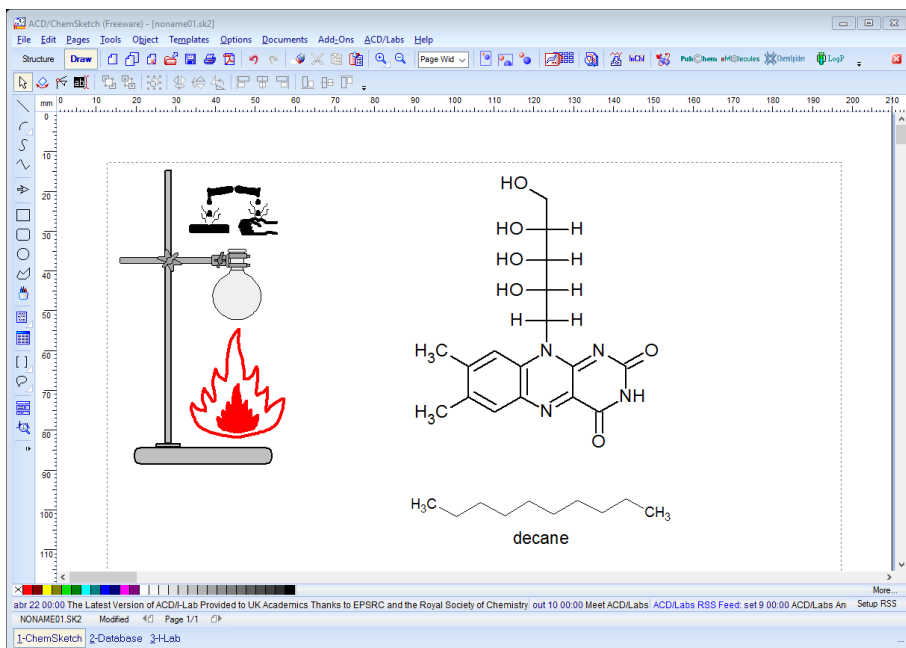





Figura 90. Vários objetos em uma mesma área de trabalho do *ChemSketch*.

## 8.2 Pesquisa de estruturas em bases internacionais

O *ChemSketch* possui acesso via web à três bases de dados de estruturas químicas: *PubChem* () , *eMolecules* () e *ChemSpider* () . Estas ferramentas são importantes para o reconhecimento de estruturas desenhadas na área de trabalho do programa.

Antes de realizarmos uma pesquisa sobre determinada estrutura desenhada no *ChemSketch*, é possível configurar alguns parâmetros de busca. Para isso, acessamos a barra de menu: *Add-Nos>Search Options*, onde será aberta uma janela conforme Figura 91.

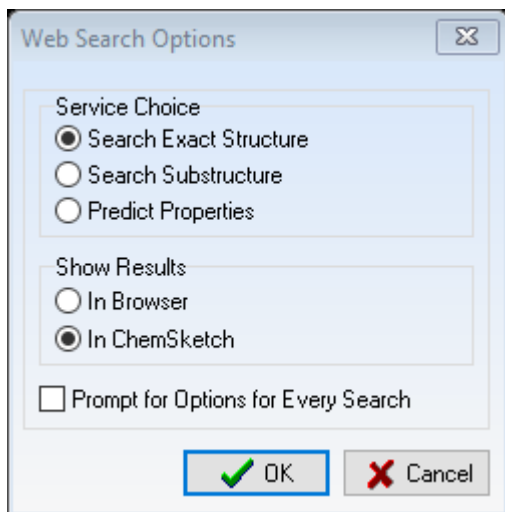


Figura 90. Opções de busca na web.

Nesse aspecto, podemos configurar a pesquisa para a estrutura exata da molécula desenhada, para estruturas derivadas ou buscar propriedades estimadas da estrutura. Também podemos escolher se os resultados serão apresentados em uma janela no *ChemSketch* (*In ChemSketch*) ou em um navegador de internet instalado no computador (*In Browser*).

Cada base de dados pode fornecer mais ou menos informações sobre a estrutura desenhada. Como exemplo, desenhamos a **estrutura A** mostrada na Figura 91 e realizamos uma pesquisa (estrutura exata), *In ChemSketch*, em cada uma das três bases de dados (Figuras 92 a 94).

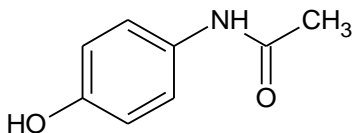


Figura 91. Estrutura A.

NIH U.S. National Library of Medicine National Center for Biotechnology Information

**PubChem** | OPEN CHEMISTRY DATABASE

Search Compounds

Compound Summary for CID 1983

Download Print Share Help

PUBCHEM > COMPOUND > ACETAMINOPHEN

# Acetaminophen

Cite this Record

Vendors Drug Information Pharmacology Literature Patents Bioactivities

**PubChem CID:** 1983

**Chemical Names:** Acetaminophen, 4-Acetamidophenol, Paracetamol, APAP, Tylenol, 4'-Hydroxyacetanilide; [More...](#)

**Molecular Formula:** C<sub>9</sub>H<sub>9</sub>NO<sub>2</sub>

**Molecular Weight:** 151.16256 g/mol

**InChI Key:** RZVAJINKPMORJF-UHFFFAOYSA-N

**UNII:** 362O9ITL9D

**Safety Summary:** [Laboratory Chemical Safety Summary \(LCSS\)](#)

**Modify Date:** 2015-09-05

**Create Date:** 2004-09-16

Analgesic antipyretic derivative of acetanilide. Acetaminophen has weak anti-inflammatory properties and is used as a common analgesic, but may cause liver, blood cell, and kidney damage.

from MeSH

Acetaminophen is a *p*-aminophenol derivative with analgesic and antipyretic activities. Although the exact mechanism through which acetaminophen exert its effects has yet to be fully determined, acetaminophen may inhibit the nitric oxide (NO) pathway mediated by a variety of neurotransmitter receptors including N-methyl-D-aspartate (NMDA) and substance P, resulting in elevation of the pain threshold. The antipyretic activity may result from inhibition of prostaglandin synthesis and release in the central nervous system (CNS) and prostaglandin-mediated effects on the heat-regulating center in the anterior hypothalamus.

Pharmacology from NCIT

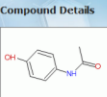
4-hydroxyacetanilide is an odorless white crystalline solid. Bitter taste. pH (saturated aqueous solution) about 6. (NTP, 1992)

Physical Description from CAMEO Chemicals

Figura 92. Resultados da pesquisa no *PubChem*.

**eMolecules** Products About Us

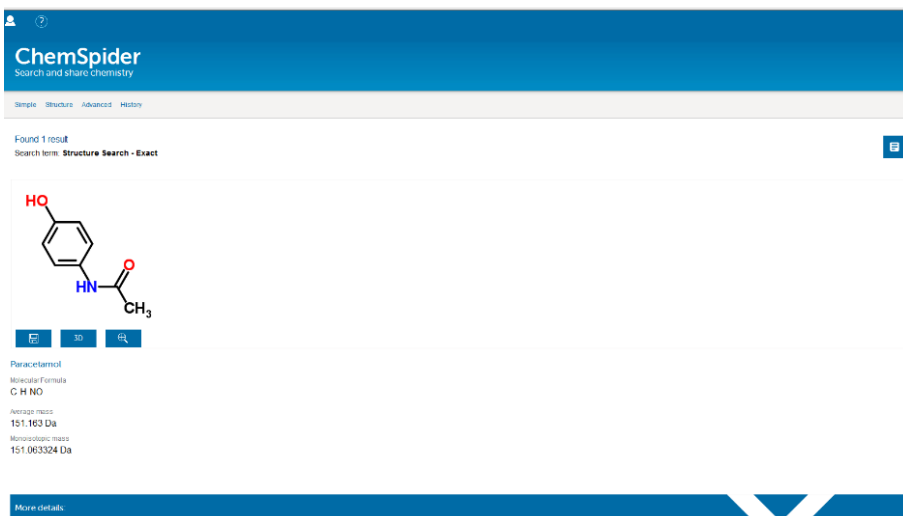
Compound Details



**Properties**  
MW: 151.163  
KE: C9H9NO2

Source	Compound ID
Acros Organics (US)	10233
ChemDiv	0099-0228
Apollo Scientific	8IA1214
ChemSonic	34210
Life Chemicals	F3096-1731
InterBioScreen	BB_SC-07122
Toronto Research Chemicals	A161220
Toronto Research Chemicals	A161221
Toronto Research Chemicals	A161222
Princeton BioMolecular Research	059K_712518
Otava	0125160289
Key Organics	STR00901
Vitas M Labs	STL140694
Vitas M Labs	BBJ055229
Alfa Aesar (US)	A11245
ChemK	CHB83103
SynQuest	4656-1-W7
Carbonyth	FA15502
TCI America	H0190
Bepham	B112079
Prestwick Chemical	Prestw-868
TCI Japan	H0390
Enamine BB	EN300-17510
Abblis	AB1009347
AK Scientific	H065
Oakwood Products (Non-EU Customers)	005037
Fluorochem (Non-US Customers)	005037
Alk Pharm	AK-42438
Alfa Aesar (UK)	A11245
BioChemPartner	BCP6000060
Fisher Scientific AG	10233
Acros Organics (EUR)	10233
Acros Organics (EURD)	10233
Acros Organics (UK)	10233

Figura 93. Resultados da pesquisa no *eMolecules*.



The image shows a screenshot of the ChemSpider website. At the top, the ChemSpider logo is displayed with the tagline "Search and share Chemistry". Below the logo, there are navigation links for "Simple", "Structure", "Advanced", and "History". The main content area shows a search result for "Structure Search - Exact" with "Found 1 result". The chemical structure of Paracetamol is shown, which is a benzene ring with a hydroxyl group (-OH) at the para position and an acetamido group (-NHCOCH<sub>3</sub>) at the other para position. Below the structure, there are icons for "2D", "3D", and "EL". The text below the structure identifies the compound as "Paracetamol", provides the molecular formula "C<sub>8</sub>H<sub>9</sub>NO", and lists the average mass as "151.163 Da" and the monoisotopic mass as "151.063324 Da". At the bottom of the screenshot, there is a "More details" link.

Figura 94. Resultados da pesquisa no *ChemSpider*.

Em todas as três pesquisas foi possível determinar que a **Estrutura A** era o **paracetamol** (fármaco com propriedades analgésicas). Informações sobre massa molar, nomes similares, histórico, aplicações clínicas; também podem ser fornecidas dependendo da molécula pesquisada.

## 9. DRAW

O Modo *Draw* do *ChemSketch* oferece liberdade de criação e edição de diversos esquemas e ilustrações que podem estar associados aos desenhos estruturais realizados no Modo *Structure*. Como já detalhamos as funções das barras específicas do modo desenho do programa, veremos algumas possibilidades que este modo proporciona para os usuários do *software*.

### 9.1 Desenhando figuras

Na barra de ferramentas de desenho, uma série de podem ser usadas para a criação de figuras na área de trabalho do *ChemSketch* (Figura 95).

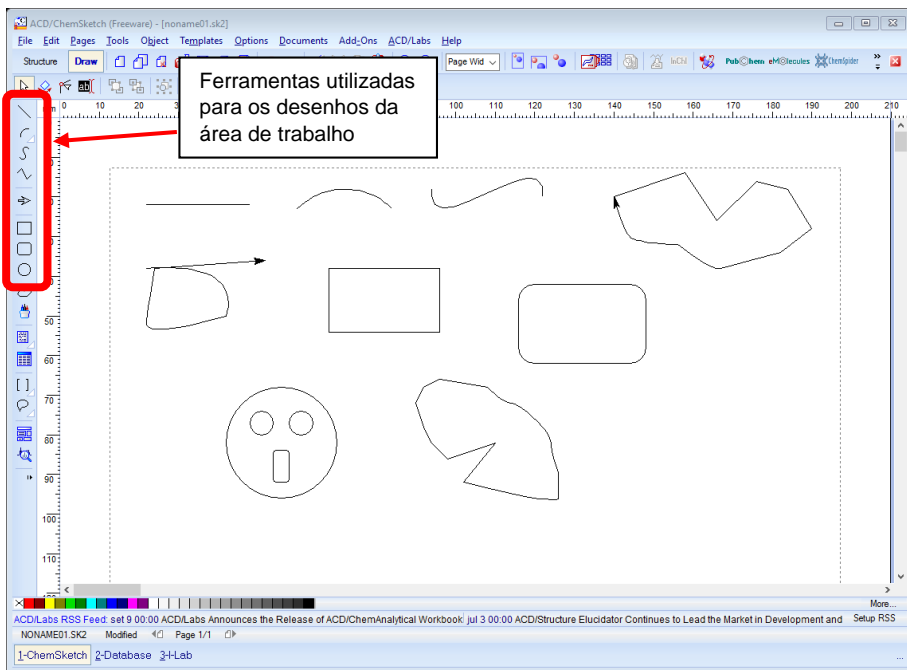



Figura 95. Figuras criadas no Modo *Draw*.




Com as ferramentas destacadas na imagem anterior, uma série de figuras podem ser criadas e copiadas para outros programas (*Microsoft Power Point*, por exemplo). Contudo, nesse aspecto, é a criatividade e a experiência do usuário que permitirá a elaboração de desenhos mais detalhados e complexos.


## 9.2 Criando textos e tabelas

O *ChemSketch* no modo *Draw* permite a criação de textos e de tabelas que podem ser editadas no próprio programa. Para se

adicionar uma caixa de texto, basta se clicar sobre o ícone . Após isso, será possível a digitação do texto desejado ou inserir algum proveniente de outro programa, através dos recursos copiar e colar.

Também podemos inserir textos por meio do ícone .

Ao se clicar sobre o que foi digitado, uma caixa de edição é aberta, permitindo a realizações de alterações como tipo de fonte, tamanho e atributos da fonte, além de edições no parágrafo digitado (Figura 96).

Para se criar uma tabela, clica-se sobre o ícone , depois um clique e arraste sobre a área de trabalho faz com que seja aberta a janela *Insert Table*. Nela é possível escolher o número de linhas e de colunas da tabela, além de opções de alinhamento da mesma. Após criada, um clique duplo sobre a tabela abre a janela *Objects Panel*, onde é possível personalizar a tabela já criada (Figura 97).

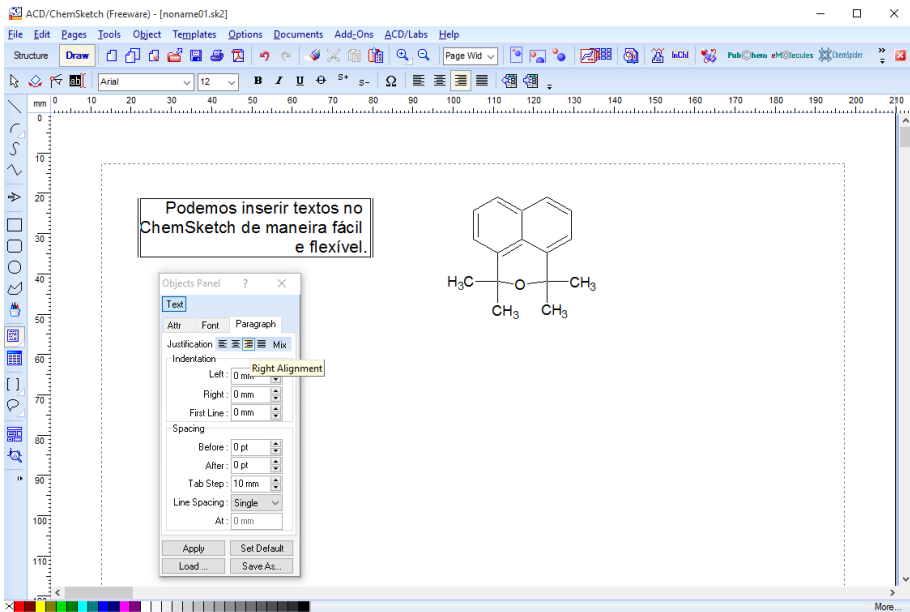


Figura 96. Criação de texto no Modo Draw.

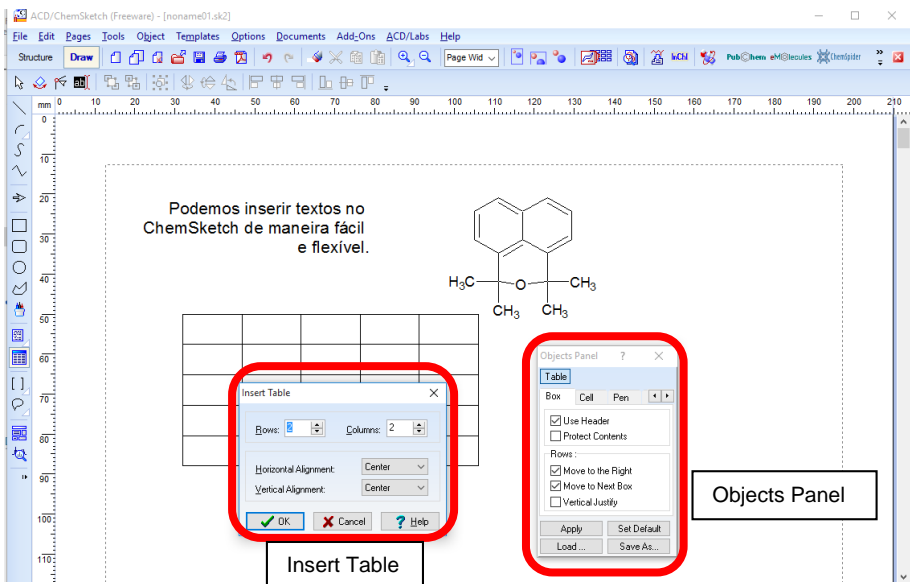



Figura 97. Criação de tabela no Modo Draw.

### 9.3 Importando e exportando imagens no Modo Draw

Para inserir uma imagem na área de trabalho do *ChemSketch* é necessário selecionar o ícone  e clicar sobre a área. Automaticamente, uma janela do explorador de arquivos do computador para que seja escolhida a imagem a ser inserida (Figura 98).

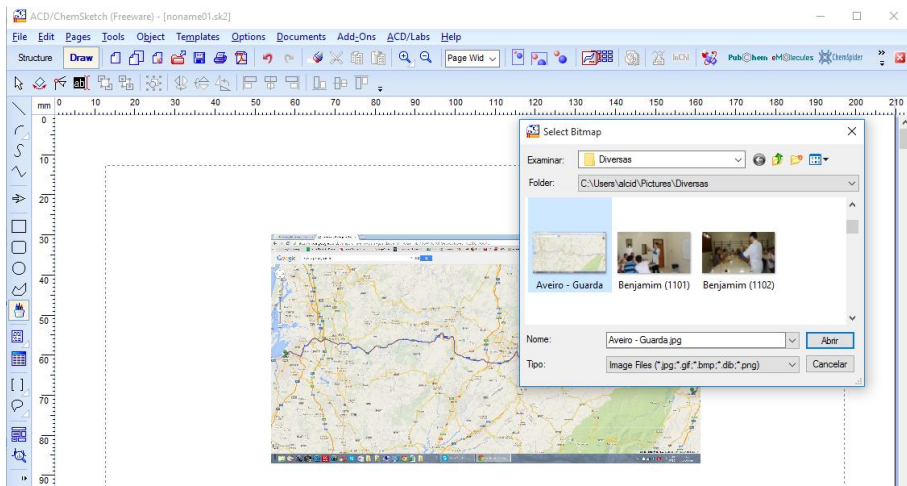


Figura 98. Inserção de imagem no Modo *Draw*.

Para se exportar uma ilustração criada no *workspace* do *ChemSketch*, basta selecionar o desenho desejado e, na barra de menu acessar o comando *File>Export*, uma janela com opções de salvamento será mostrada (Figura 99). Nela, várias opções de formatos serão disponibilizados, tais como .JPG, .PDF e .GIF.

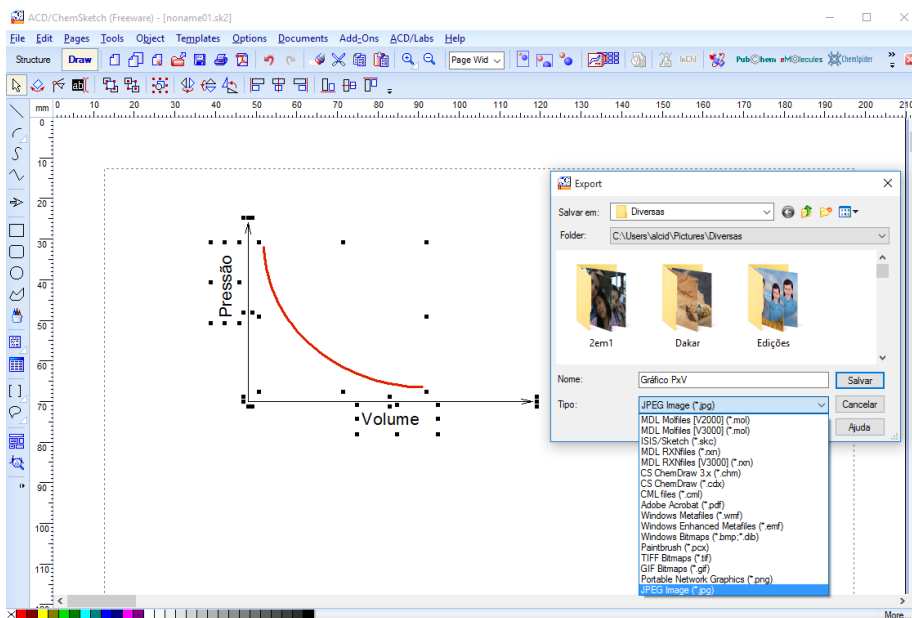


Figura 99. Exportando gráfico criado no Modo Draw.

## 9.4 Criando Esquemas de Reações Químicas

Para facilitar a elaboração de equações químicas, o *ChemSketch* oferece uma série de recursos e símbolos reacionais. Equações simples, como mostrado na Figura 100, utilizam poucos recursos do programa para serem escritas.

No entanto, para mecanismos reacionais orgânicos complexos, uma série de recursos nos dois modos do programa precisam ser utilizados. Na Figura 101, está representado um mecanismo de reação para a obtenção da Aspirina feito no *ChemSketch*.

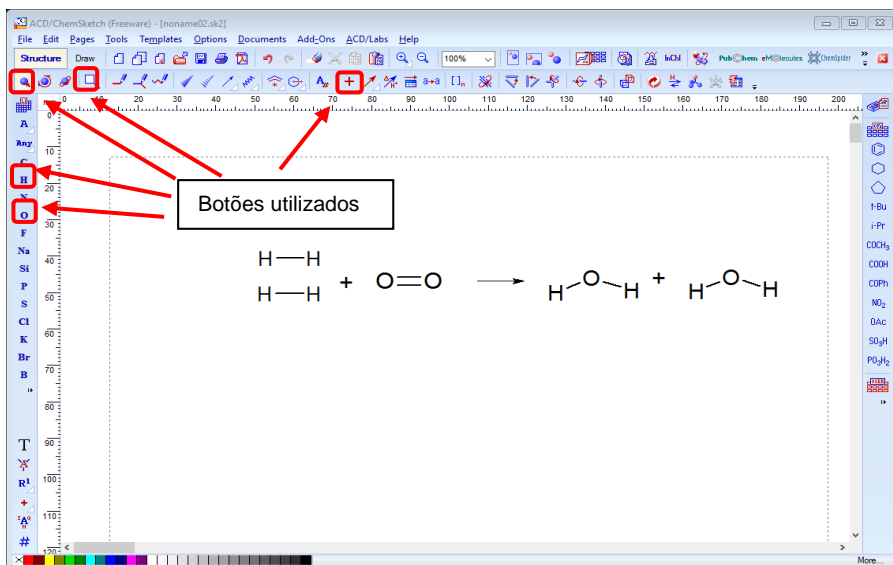


Figura 100. Equação química de formação da água.

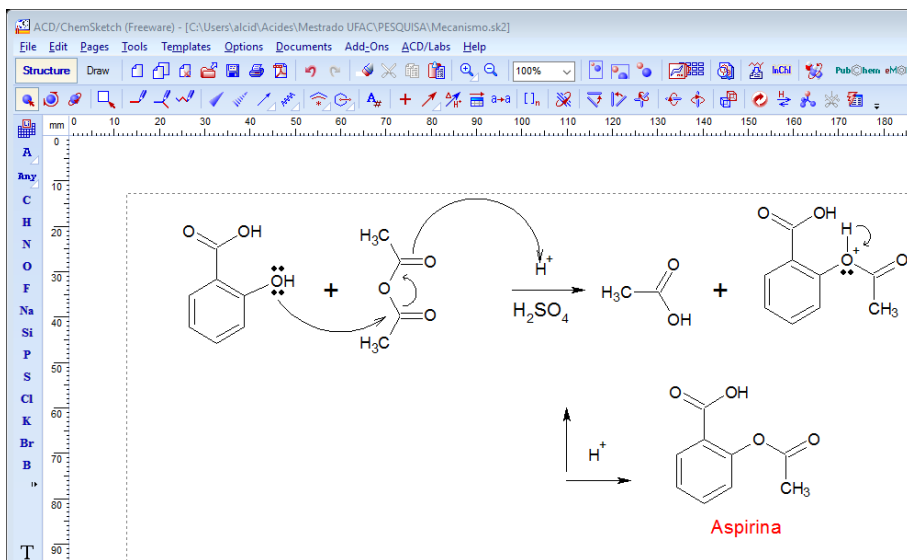


Figura 101. Mecanismo de obtenção da Aspirina.

## 9.5 Montagem de esquemas a partir de templates

Como sabemos, o *ChemSketch* possui uma rica base de dados off-line chamada de *Template Window*. Além das estruturas, é possível acessar diversas ilustrações que podem ser usadas para a criação de esquemas no modo *Draw*.

Uma das possibilidades é a montagem de esquemas de vidrarias e equipamentos típicos de um laboratório de química, afim de simular processos de separação e reacionais, por exemplo. A Figura 102, apresenta um esquema elaborado a partir dos *templates*.

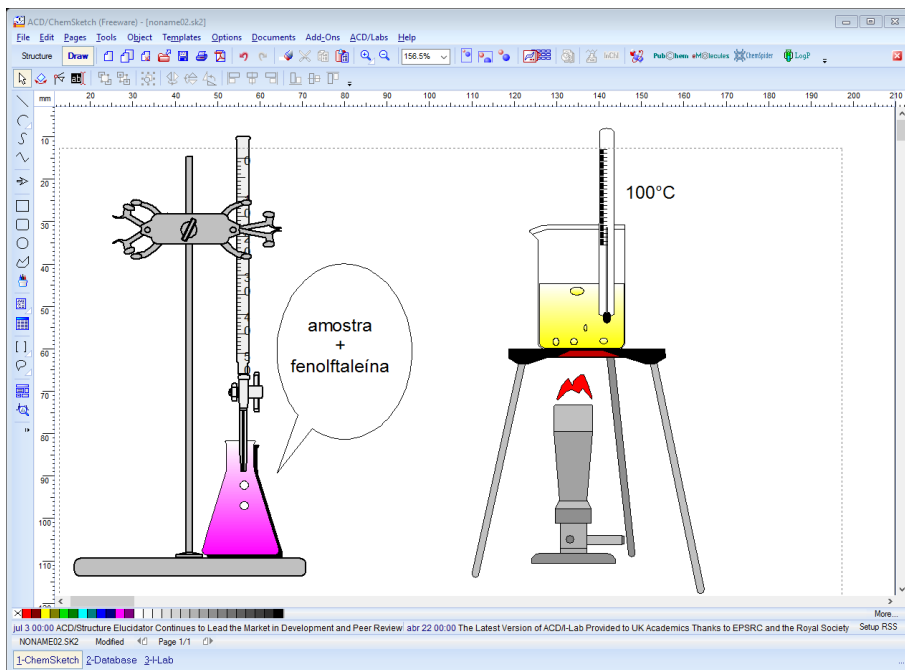


Figura 102. Esquema de laboratório.

Os templates também possuem dados de orbitais e de estruturas de Lewis (Figura 103). Tais informações podem ser úteis para a criação de ilustrações detalhadas de ligações químicas e processos de hibridação, por exemplo. As figuras elaboradas podem

ser exportadas por completo ou separadamente, de acordo com as seleção realizada.

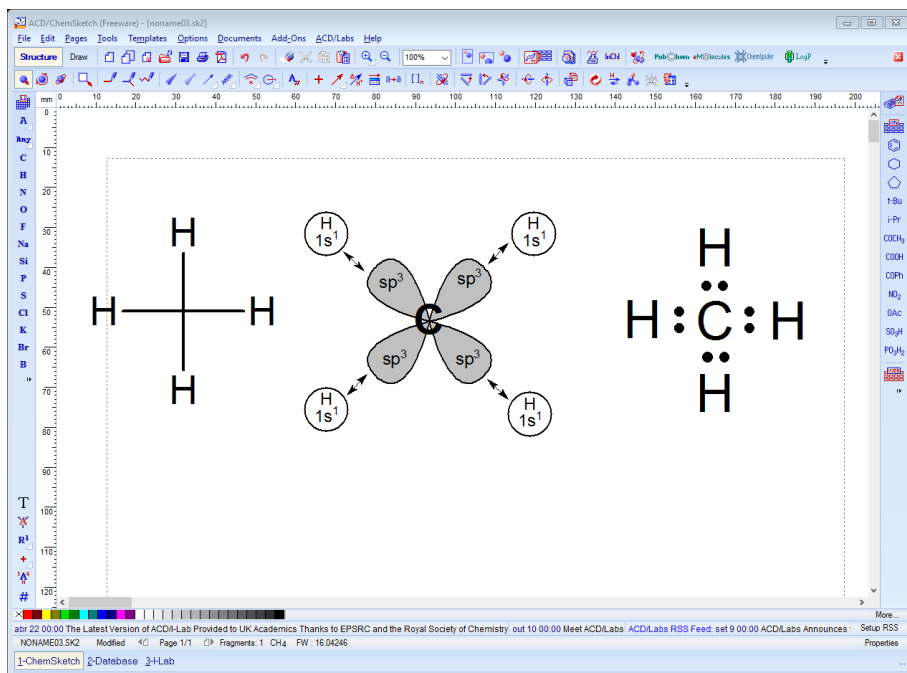


Figura 103. Vários esquemas criados no *ChemSketch*.

## 10. PROPOSTAS DE ATIVIDADES NA EDUCAÇÃO BÁSICA

A seguir serão apresentadas as atividades sugeridas pelos participantes do minicurso CHEMSKETCH: APRENDENDO A DESENHAR ESTRUTURAS ORGÂNICAS, realizado dias 21 e 22 de outubro de 2015, na Universidade Federal do Acre.

### Atividade 1: Estruturas a partir de dados

**a) Objetivo:** Montar estruturas orgânicas a partir do lançamento de dados.

**b) Metodologia:** Confeccionar quatro dados: um equivalente ao número de carbonos (de 1 a 6), outro com ligações (simples, duplas ou triplas), outro com seis grupos funcionais e o último com o número da posição das insaturações ou grupos funcionais em cada carbono. Os alunos jogariam os dados e, de acordo as quatro faces de cima, eles montariam as respectivas estruturas orgânicas no *ChemSketch*, projetando a construção das moléculas através de um *Datashow*. Essa atividade pode ser realizada em grupo. Por exemplo, se os resultados dos lançamentos dos dados fossem:

1º Dado: 5 (composto com cinco carbonos)

2º Dado: - (ligações simples)

3º Dado: -OH (hidroxila)

4º Dado: 2 (hidroxila ligada ao carbono 2 da cadeia)

Estes resultados levariam aos alunos a desenharem uma estrutura no programa que se atende às faces dos dados. Neste caso, o composto que deveria ser desenhado no *ChemSketch* pelos alunos seria o pentan-2-ol (Figura 104). Se no segundo dado, uma ligação dupla ou tripla fosse sorteada, o dado 4 deveria ser lançado para determinar a posição da instauração.



Caso os alunos não conseguissem desenhar as estruturas correspondentes, o professor poderia mostrar como a estrutura seria no quadro, para posteriormente a desenhar no *software*. O número de lançamentos e de dados poderá aumentar ainda mais as possibilidades desta atividade lúdica. A adoção de pontuações para cada acerto pode estimular ainda mais os alunos, garantindo o envolvimento deles e o sucesso da atividade.

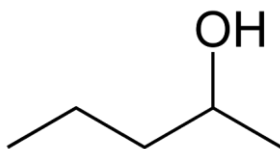


Figura 104. Estrutura do pentan-2-ol.

**c) Avaliação:** Cada aluno ou grupo pode ser avaliado de acordo com as estruturas montadas. O professor também pode solicitar dos educandos as propriedades gerais e aplicações da função orgânica da substância desenhada.

## Atividade 2: Investigando compostos orgânicos

**a) Objetivo:** investigar compostos orgânicos e suas propriedades.

**b) Metodologia:** Os alunos formariam grupos e receberiam uma estrutura, sem identificação, para que fosse desenhada no *ChemSketch*. Após isso, seriam informados que eles deveriam descobrir qual substância apresenta a referida estrutura e quais suas principais propriedades e aplicações. O professor apresentaria previamente as ferramentas de busca em base de dados químicos do *software* (*PubChem*, *eMolecules* e *ChemSpider*). Após determinado tempo, os grupos apresentariam os resultados de suas pesquisas para toda a turma. Essa atividade poderia ser utilizada como forma

de introduzir determinados conteúdos, como drogas e vitaminas, por exemplo.

**c) Avaliação:** De acordo com a descoberta da substância que tem a estrutura passada pelo professor e da apresentação de suas propriedades.

### **Atividade 3: Elaboração de gráficos termoquímicos**

**a) Objetivo:** Desenvolver habilidades de elaboração e compreensão de informações gráficas

**b) Metodologia:** Sugerir a montagem de gráficos relacionados ao conteúdo de termoquímica. Uma vez que o *ChemSketch* possibilita, no modo *draw*, a elaboração de esquemas gráficos, os alunos poderiam montar representações gráficas de reações endotérmicas e exotérmicas.

Por exemplo, o professor poderia utilizar o *ChemSketch* junto com os alunos para explorar as informações gráficas de uma reação exotérmica, conforme Figura 105. Neste caso, é possível visualizar a redução da energia dos produtos em comparação com os reagentes, além de mostrar graficamente a energia de ativação de uma reação química genérica. Esta atividade também poderia ser realizada no estudo das transformações gasosas e até em funções matemáticas.

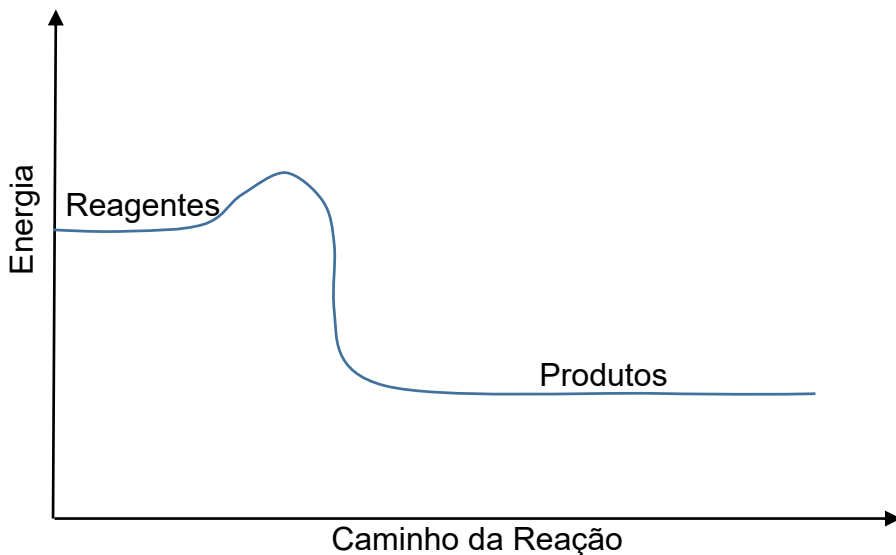


Figura 105. Gráfico de uma reação exotérmica.

**c) Avaliação:** Os alunos podem ser avaliados através dos gráficos elaborados e de suas interpretações.

#### **Atividade 4: Conhecendo o laboratório**

**a) Objetivo:** Introduzir aulas práticas e conhecer os principais materiais de laboratório de química

**b) Metodologia:** Na falta de laboratório e até mesmo como forma de preparar os alunos para a realização de práticas experimentais, o *ChemSketch* pode ser utilizado para atividades em que os alunos montem alguns esquemas importantes presentes em laboratórios de Química. Eles poderiam aprender os nomes das principais vidrarias e equipamentos, além de demonstrar sistemas como o de destilação, de filtração, de titulação, etc. Por exemplo, o professor poderia sugerir misturas aos alunos e que eles montassem, no *ChemSketch*, um

sistema de vidrarias e equipamentos que permitissem a separação de cada um dos seus componentes. Sistemas de destilação simples, filtração e titulação são algumas das possibilidades a serem criadas pelos alunos na interface do programa.

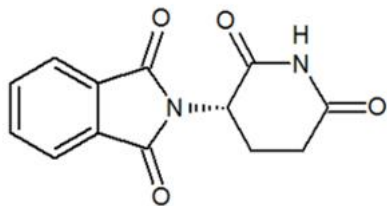
**c) Avaliação:** O professor poderá avaliar se os sistemas montados pelos alunos são adequados para a separação das misturas propostas.

### **Atividade 5: Estudando isomeria**

**a) Objetivo:** Estudar isomeria espacial a partir da visualização tridimensional de estruturas montadas no *ChemSketch*.

**b) Metodologia:** Nessa atividade, as moléculas seriam mostradas no plano bidimensional e em três dimensões, mostrando aos alunos as diferenças espaciais que compostos orgânicos de mesma fórmula molecular apresentam. Os tipos de isomeria, especialmente, a estereoisomeria, poderia ser apresentada aos alunos, permitindo que eles criem e manipulem as estruturas. A possibilidade de visualizar e movimentar estruturas moleculares, pode facilitar a compreensão de isomeria pelos alunos. Além disso, o *ChemSketch*, ao gerar os nomes para as estruturas, identifica se os isômeros são E ou Z (em caso de isomeria geométrica) ou, R ou S (em caso de isomeria óptica). Por exemplo, o professor pode sugerir uma discussão sobre o caso da talidomida. Substância que pode apresentar ações sedativas ou ter efeitos teratogênicos, dependendo da disposição espacial dos átomos dessa substância. Com o *ChemSketch*, as duas talidomidas (Figura 106), a R e a S, poderiam ser desenhadas e visualizadas tridimensionalmente e discutidas suas diferenças.

S-Talidomida: Teratogênica



R-Talidomida: Sedativa

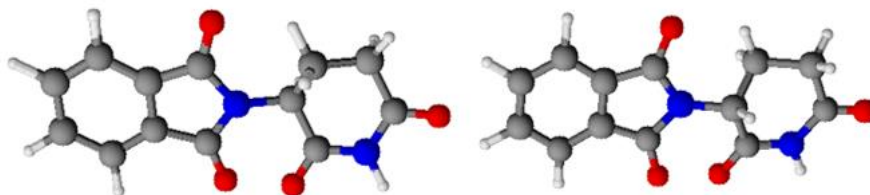
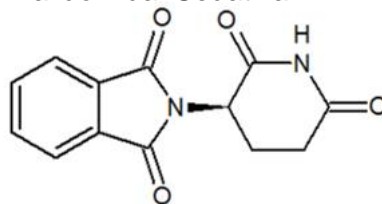


Figura 106. Estruturas da talidomida.

**c) Avaliação:** O professor pode avaliar a habilidade dos alunos em desenhar as estruturas, manipulá-las em 3D e compreender as diferenças existentes entre substâncias isômeras.

Autorizo a reprodução deste material, desde que citado a fonte.

