



ACD/ChemSketch

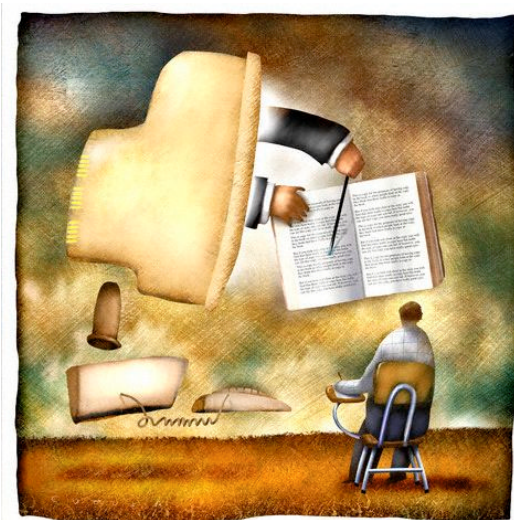
Módulo 01 - Software para desenho molecular

NAEQ

Núcleo de Apoio ao
Ensino da Química



*Curso de Informática Aplicada a
Aprendizagem da Química*



Sumário

Introdução	3
Instalação	4
Cadastramento	4
Processo de Instalação	7
Modos de Trabalho	11
Modo Estrutura	11
Modo Desenho	12
Manipulando arquivos	12
Salvando Arquivos	12
Exportando Arquivos	13
Abrindo um arquivo	13
Criando um arquivo novo	14
Imprimindo um Arquivo	14
Desenhando Moléculas	15
Barra Estrutura	15
Exercício	18
Barra de Átomos	19
ACD/Name Freeware	21
Propriedades das Moléculas	21
Barra de Radicais	22
Alterando formatação dos Átomos e Moléculas	23
Barra Geral	26
Exercícios	27
Desenhando figuras	28
Barra de Desenhos	28
Barra de Edição	31
Exercícios	33
Moléculas em 3D	35
Barra de manipulação 3D	35
Exercícios	40

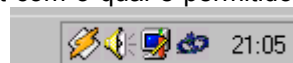
Introdução

ACD/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.

ACD/Chemsketch tem os seguintes módulos e ferramentas:

- Modo Estrutura para desenhar estruturas químicas e calcular as suas propriedades.
- Modo Desenho para texto e processos gráficos
- Cálculos de Propriedades Moleculares para estimação automática de:
 - Nomenclatura Oficial da IUPAC (em inglês)
 - Peso de fórmula;
 - Composição de porcentagem;
 - Volume de molar;
 - Índice de refração;
 - Tensão de superfície;
 - Densidade;
 - Constante dielétrica;
 - Dentre outras propriedades.
 - Diversas outras...
- Todo o software da ACDLabs trabalha com barramento 32-bits e aplicável aos PC's com Sistemas Operacionais Microsoft Windows 95/98/NT/ME/2000.
- Todo o software de ACD executado em PC's é controlado por ACD/Host com o qual é permitido um

controle central das operações envolvidas com os programas da ACDLabs.



Instalação

Veremos agora os passos necessários para ter o ACD/Chemsketch instalado em sua máquina:

Cadastramento

Abaixo, mostraremos passo a passo o processo de cadastramento junto a ACDLabs para um posterior download do software.

01) Acesse o site da ACDLabs: www.acdlabs.com

02) Na barra de links a esquerda da tela, clique em "Download".

FREWARE		
ChemSketch 5.0 Freeware	Windows	C
I-Lab Add-on for ChemSketch 5.0	Windows	C

03) A próxima etapa consiste em ir até a tabela "FREWARE" e clicar no link "ChemSketch 5.0 Freeware"

The ACD/ChemSketch 5.0 Freeware package includes [Tautomers](#), ChemSketch templates, the [Name FreeWare Add-On for ChemSketch 5.0](#) and [ACD/3D Viewer](#).

Download ChemSketch 5.0 Freeware

- **Download ChemSketch User's Guide:**
 - in English, v. 5.0: [PDF / DOC](#)
 - in Japanese, v. 3.5: [PDF / DOC](#)
 - in Chinese, v. 5.0: [RTF](#)
 - in Czech, v. 5.0: [PDF](#) - [New!](#)
- **Download 3D Viewer User's Guide:**
 - in English, v. 5.0: [PDF / DOC](#)
 - in Japanese, v. 4.x: [PDF / DOC](#)

Note: Some User's Guides are now available in PDF format. Download the latest version of the [Adobe Acrobat Reader](#) to view or print them.

- [Technical Information and FAQ's](#)
- [Read reviews of this product](#)
- [Download Demo Movies](#)

04) Após isso, procure e clique no link **“Download ChemSketch 5.0 Freeware”**.

Products download, you can return to the [main download area](#).

Solutions Please complete the following three steps to download ChemSketch 5.0 Freeware:

Training

1. Identify yourself. If you are not yet registered, please fill out the [registration form](#). Your e-mail address will become your unique identifier. Next time, you will have to enter your password and we will remember you.
2. Accept the license agreement.
3. Download software.

Downloads

App Notes

Publications

E-mail Address:

Password:

Interactive Lab

Web Store

Educators

05) Neste momento, você deve entrar com seu e-mail e senha, sendo que esta última é fornecida quando o usuário se cadastra no site. Para se cadastrar no site, clique em: **“Click Here to Register”**.

06) Neste momento, você deve preencher todos os campos para conseguir o cadastro na empresa ACD/Labs e assim, poder receber Newsletter e fazer o download dos produtos. Para fazer o download neste curso, use os seguintes e-mail e senha para se identificar:

 E-mail: naeq@ucs.br
 Senha: naeq

07) Após se identificar corretamente, aceite o termo de licença para o uso do ChemSketch pressione o botão: **I ACCEPT**

Download site		Comments
North America	Europe	
chemsk50.exe	chemsk50.exe	All-in-one 7.8 MB file
chemsk50_1.exe	chemsk50_1.exe	Part 1 of the split package (4.4 MB)
chemsk50_2.exe	chemsk50_2.exe	Part 2 of the split package (5.2 MB)

Note: ChemSketch 5.0 Freeware is not compatible with all free and commercial ACD/Labs software version 4.5 and earlier and should be installed separately. Please install to a folder which is different from that of any ACD commercial software you might have.

Download ChemSketch User's Guide:

Download Site		File Name	Size
North America	Europe	CHEMSK.PDF	935,797 bytes
North America	Europe	CHEMSK.ZIP	639,644 bytes

08) Clique em “Chemsk50.exe” (conforme indicado na imagem).

09) Salve o executável de instalação do software em algum diretório do seu HD. Para fazer o download do módulo ChemBasic e os manuais dos softwares, repita os passos comentados acima.

Processo de Instalação

Após o cadastro no site da ACDLabs e o procedimento de download do programa, iremos agora ver como instalar o ACD/ChemSketch na sua máquina. Executando o instalador “chemsk50” no diretório em que foi gravado, veremos a seguinte seqüência de telas para a instalação:

Welcome!

Welcome to the ACD/Labs software Setup program. This will install ACD/Labs software on your computer.

It is strongly recommended that you exit all Windows programs before running this Setup program.

Click Cancel to quit Setup and then close any programs you have running. Click Next to continue with the Setup program.

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

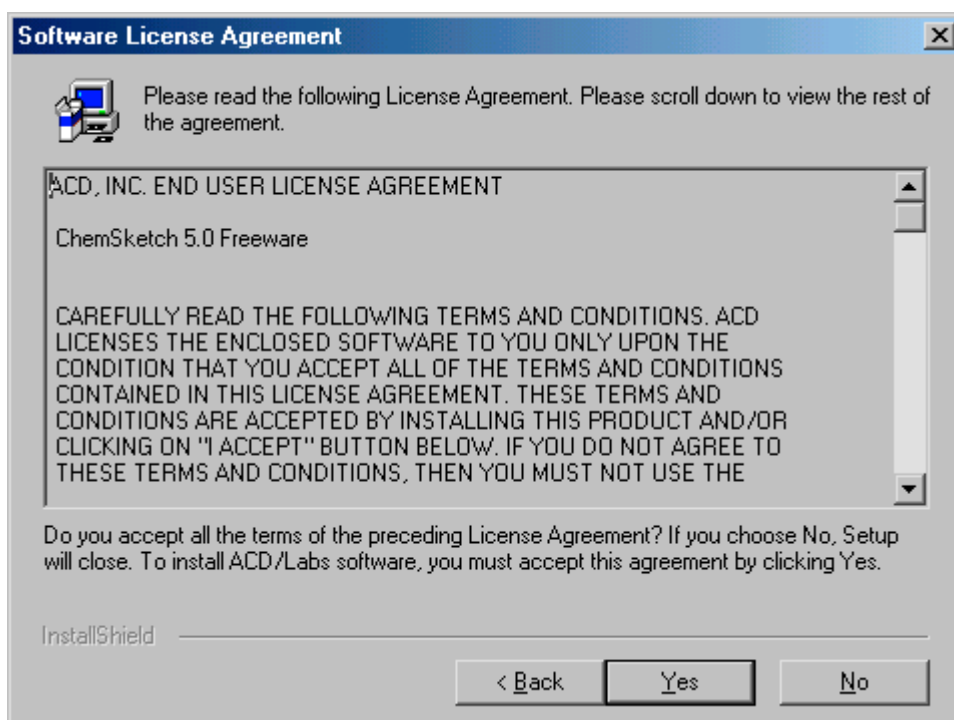
Unauthorized reproduction or distribution of this program, or any portion of it, may result in severe civil and criminal penalties, and will be prosecuted to the maximum extent possible under law.

Advanced Chemistry Development Inc.
90 Adelaide Street West
Toronto, Ontario
M5H 3V9, Canada
Toll-Free:(800)304-3988
Tel:(416)368-3435
Fax:(416)368-5596
www.acdlabs.com

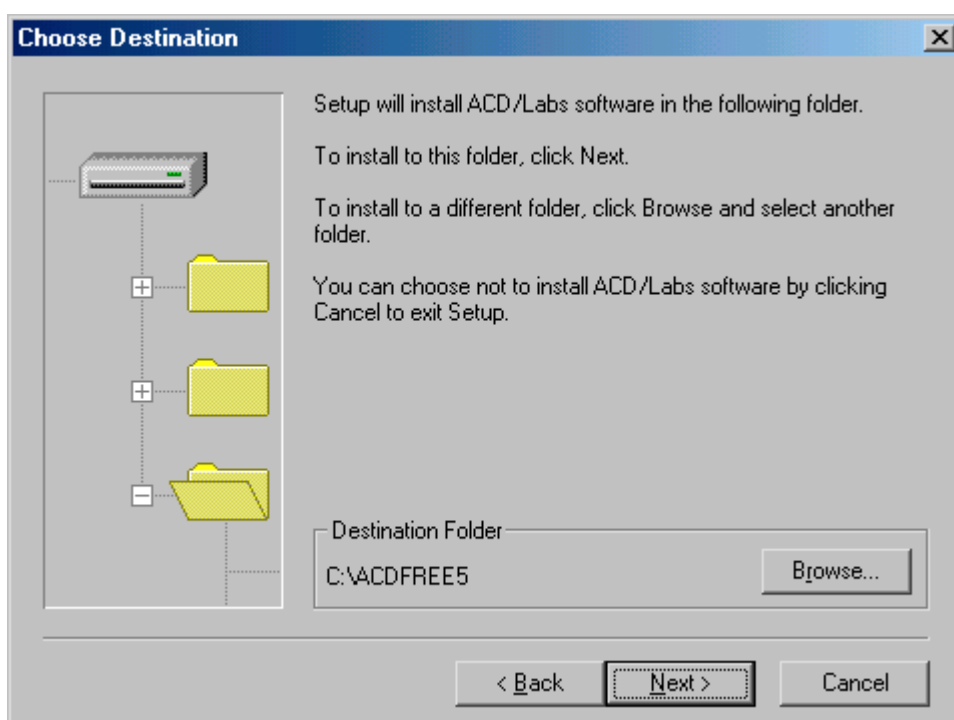
InstallShield

Next > Cancel

Essa é a primeira tela que aparecerá após a execução do aplicativo de instalação. Trata-se de um Tutorial de Instalação. Para seguir a instalação, pressione o botão: “Next >”.

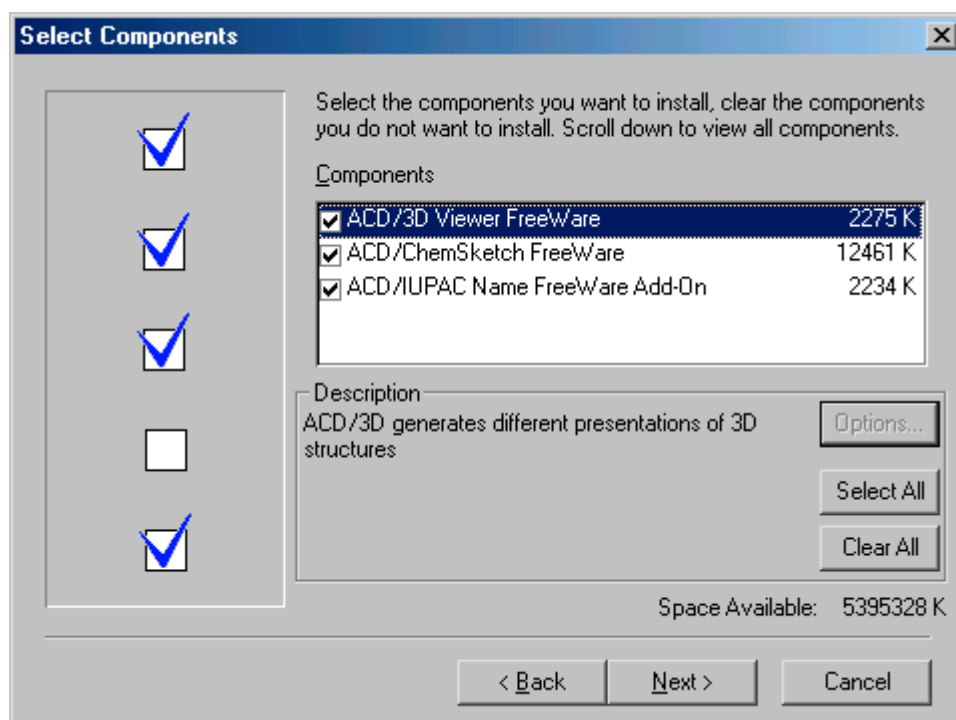


Nesta tela é mostrado o acordo de licença do programa. Como se trata de um programa Freeware¹, não há a necessidade de maiores detalhes nesta tela. Para quem desejar aprofundar-se nas restrições quanto à utilização do software pode ler o acordo de licença do software. Logo após, pressione o botão "Yes".

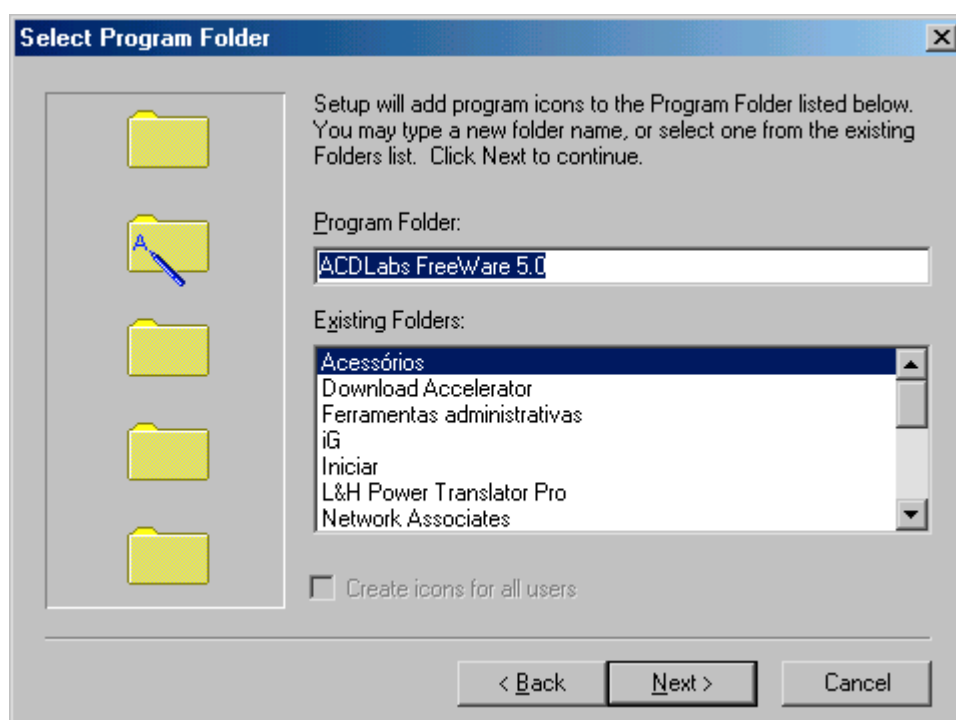


Esta tela mostra em que diretório o programa será instalado. Por padrão, utiliza-se o seguinte diretório: C:\ACDFREE5. Logo após, pressione o botão "Next >".

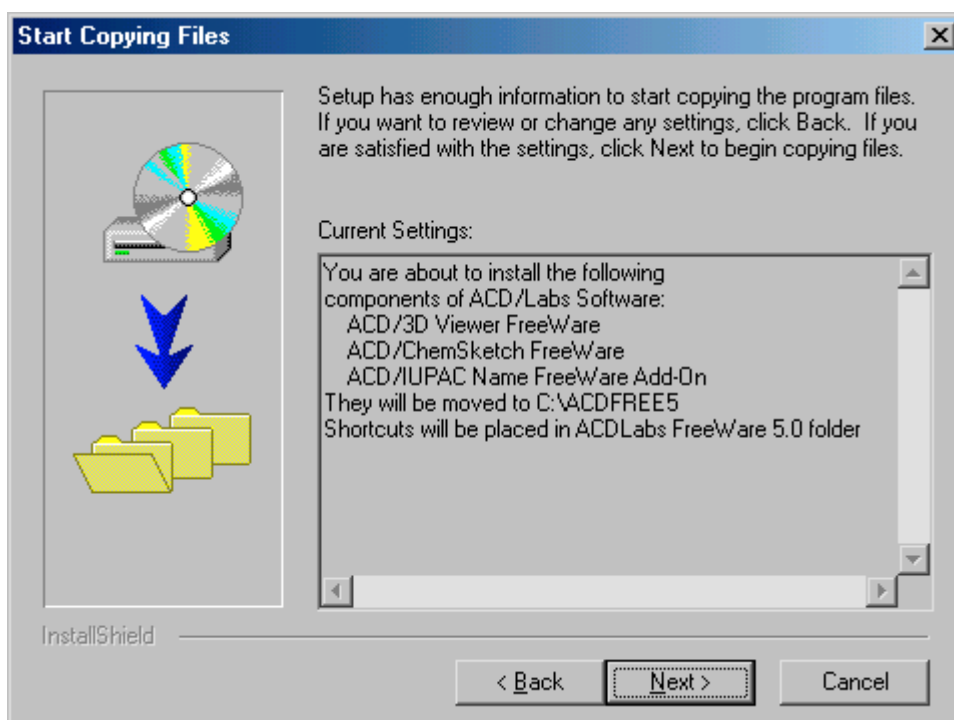
¹ Freeware: Software que pode ser instalado sem haver a necessidade de uma licença paga.



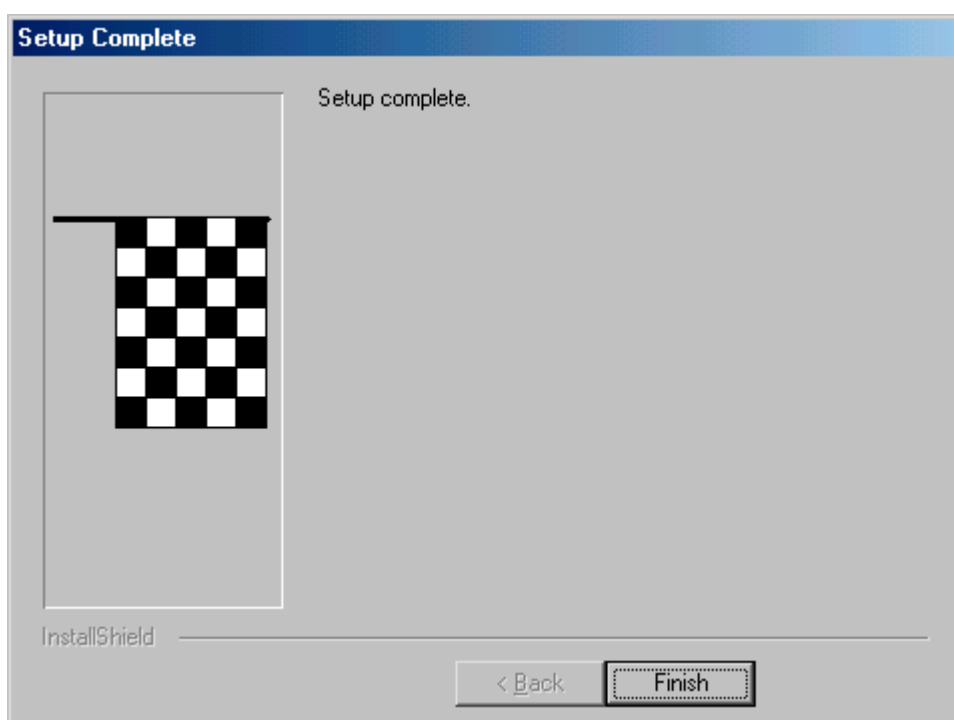
Nesta opção, temos que marcar as caixas de seleção correspondentes aos componentes que serão instalados. Como faremos uso de todos esse componente no curso, caso não estejam marcadas todas as caixas de seleção, pressione o botão “**Select All**” e, após, pressione o botão “**Next >**”.



Esta opção permite determinar onde será colocado o atalho para os programas no menu iniciar. Por padrão, utiliza-se esta configuração ao lado. Após isso, pressione o botão “**Next >**”.



Esta opção apenas informa o que será instalado no momento seguinte do Tutorial. Pressione o botão **“Next >”**



Esta opção informa que os programas foram instalados com sucesso. Basta então, pressionar o botão **“Finish”**.

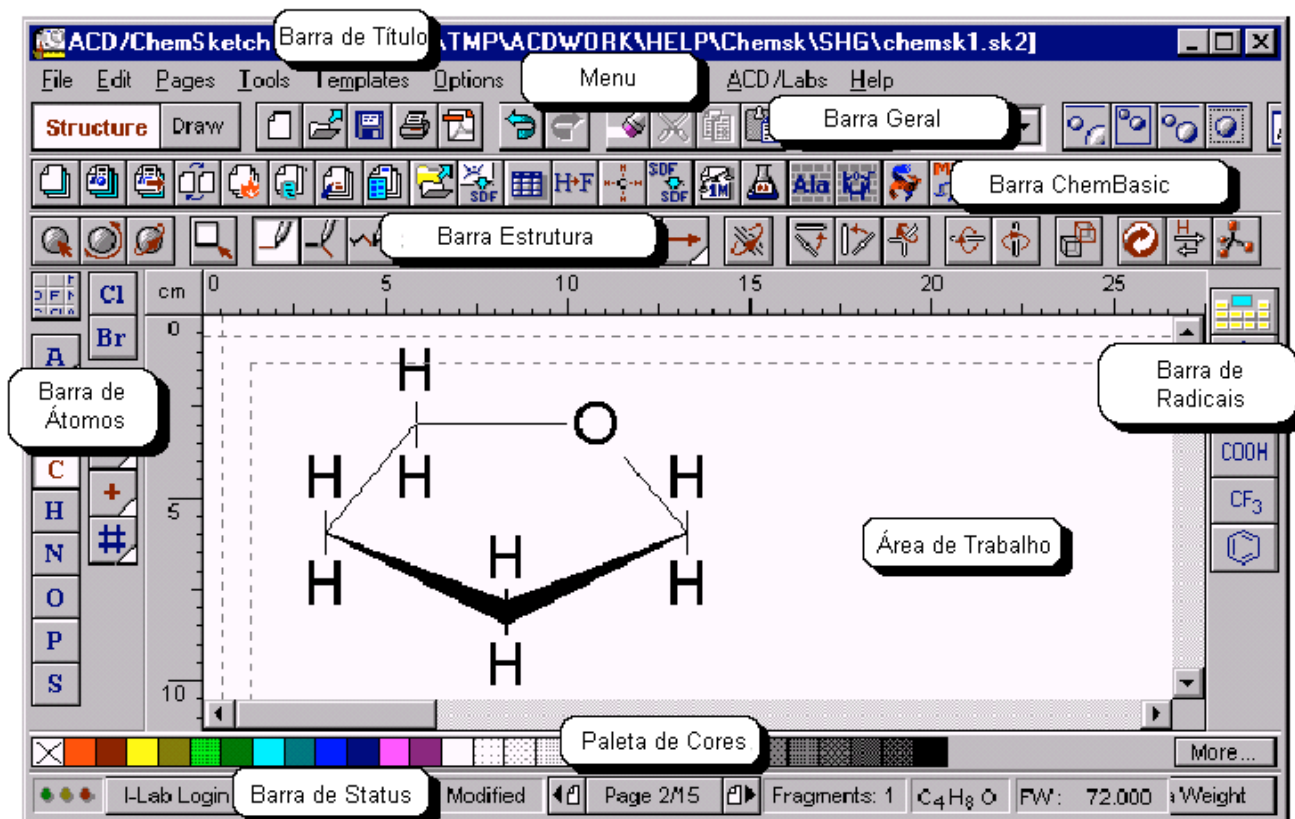
Modos de Trabalho

Iremos ver agora os modos de trabalho do programa ChemsSketch e suas principais características. Para alternar entre os modos de trabalho, basta utilizar o par de botões abaixo, localizados no software no canto superior esquerdo da tela.



Modo Estrutura

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 ChemsSketch 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, dentre 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 .

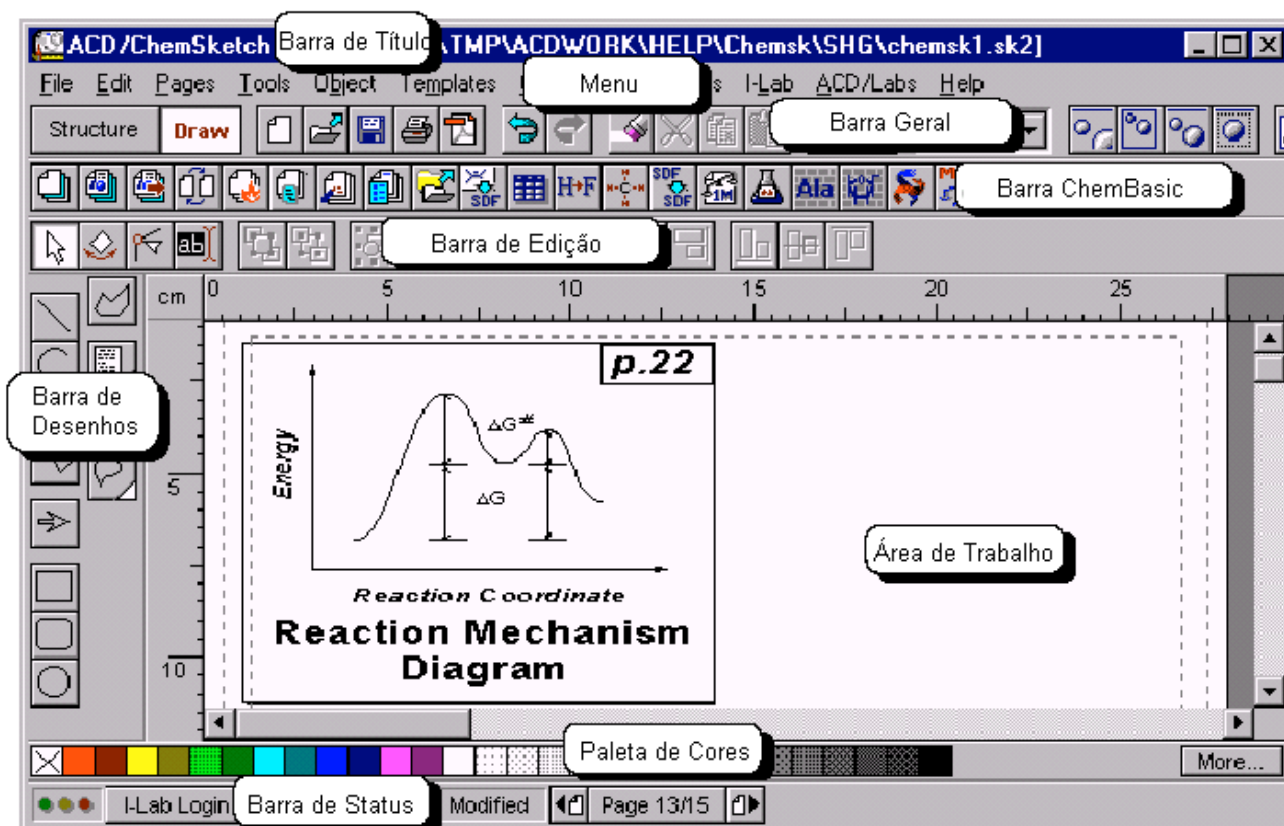
Área de Trabalho: Grande área branca localizada no meio da tela, local onde as estruturas são desenhadas.

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 estruturas selecionadas.

Modo Desenho

O modo “**desenho**” permite ao usuário trabalhar com as diversas ferramentas de desenho para auxiliar nos diagramas e reações que se deseja fazer com o Chemsketch. Abaixo, analisamos as barras que compõem o modo desenho.




Barra de Desenhos: Localizada a esquerda da tela, possui diversas ferramentas para desenho, desde ciclos, quadrados, setas além de inúmeras outras possibilidades.

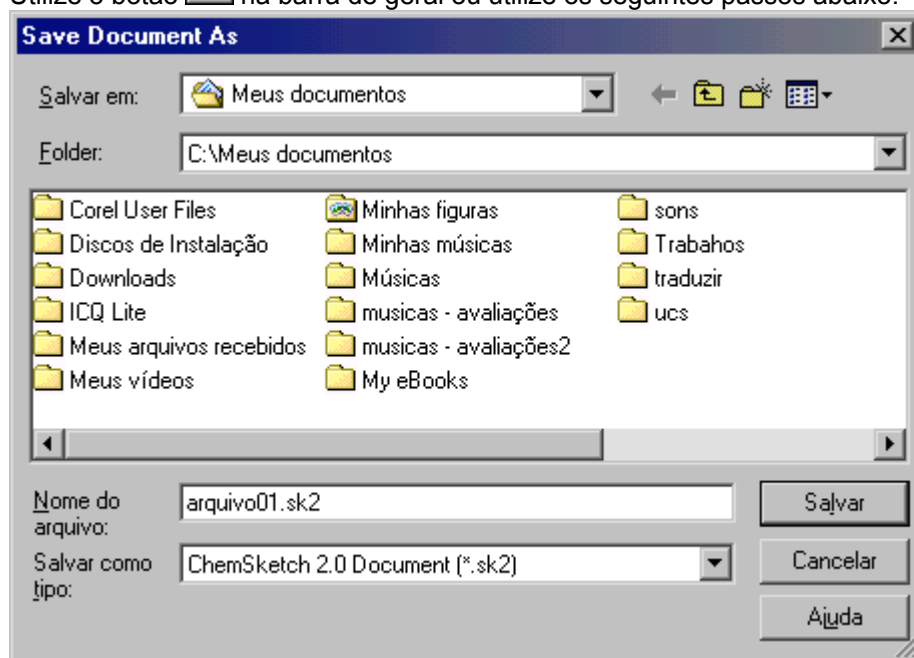
Barra de Edição: A barra de Edição permite manipular e alterar os desenhos no que diz respeito à posição, tamanho, ordem, etc.

Manipulando arquivos

Salvando Arquivos

Para guardarmos os trabalhos feitos devemos salvar o arquivo em alguma unidade de gravação (disquete ou disco rígido, por exemplo). O ChemSketch permite a gravação dos arquivos em diversos formatos. Abaixo, os passos para salvar um arquivo:

Utilize o botão  na barra de geral ou utilize os seguintes passos abaixo:



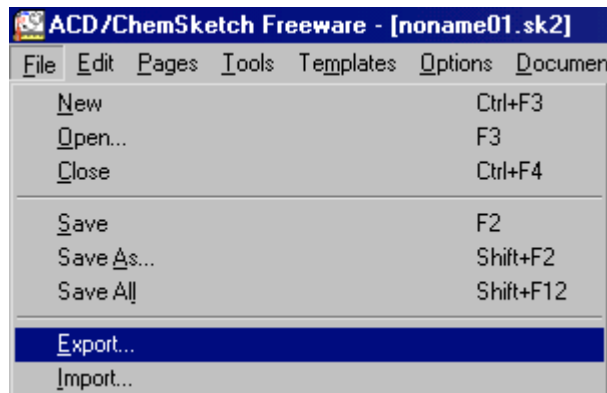
1) Clique no menu “File” e após na opção “Save As...”

2) No campo “Salvar em:” determine o local onde o arquivo será gravado. Em “Nome do arquivo” crie um nome para o arquivo. Após isso, pressione o botão “Salvar”.

Obs: O formato padrão do ChemSketch é “sk2”. Para salvar o arquivo em outro formato, devemos proceder com uma exportação de arquivo.

Exportando Arquivos

O ChemSketch possui uma interface com outros programas como ISISDraw, MDL entre outros. Essa característica permite que sejam abertos arquivos gerados com formatos de outros programas. Além disso, caso desejamos salvar o arquivo com outro formato, devemos efetuar os seguintes passos:



1) Clique no menu “File” e após na opção “Export...”

2) As opções de salvamento são as mesmas para esse procedimento. O que difere é apenas o formato desejado. Os formatos que o ChemSketch suporta exportar são:

Imagens

.bmp; .gif ; .tif;


Formatos de outros programas

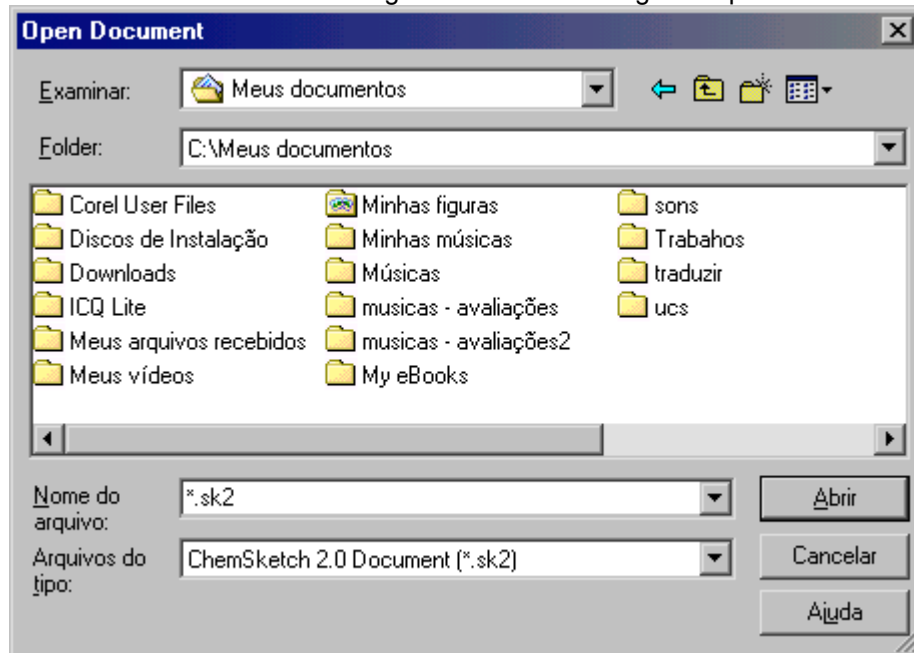
.mol; .skc; .chm;

Obs: O formato .pdf está disponível apenas na versão comercial.

Abrindo um arquivo

Para abrir um arquivo do ChemSketch já salvo em alguma unidade de disco (Hard Disk ou disquete), siga os passos abaixo:

Utilize o botão  na barra de geral ou utilize os seguintes passos abaixo:



1) Em “**Examinar**”, selecione o local onde o arquivo está gravado.


2) Em “**Nome do arquivo**”, digite, caso necessário, o nome do arquivo.

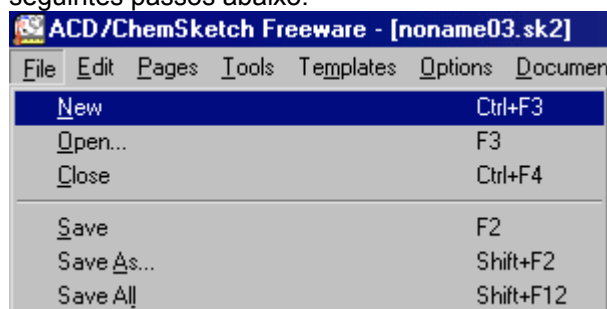
Obs:

- Utilize os sinais * para busca
- O ChemSketch abre somente arquivos no formato “sk2”.

Criando um arquivo novo

Caso você deseja criar um arquivo novo no ChemSketch, siga os passos abaixo:

Utilize o botão  na barra de geral ou utilize os seguintes passos abaixo:

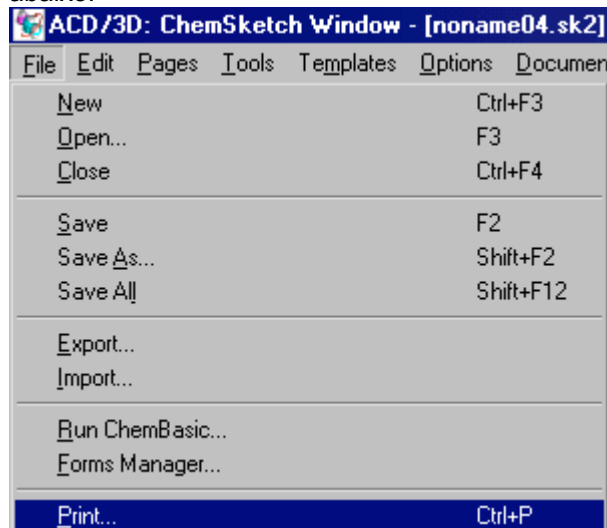


1) Clique no menu “**File**” e após na opção “**New**”.

2) Pode-se utilizar os atalhos do teclado para efetuar várias funções. Por exemplo, para criar um arquivo novo, basta clicar <Ctrl>+F3.

Imprimindo um Arquivo

Para imprimir um arquivo no ChemSketch, basta abri-lo primeiramente e, após isso, seguir os passos abaixo:



1) Clique no menu “**File**” e após na opção “**Print...**” ou então pressione <Ctrl>+P>.

2) Mude as opções desejadas e pressione o botão “**Ok**”.


Obs: Antes de imprimir um arquivo, verifique as configurações da página. Para isso, clique no menu “**File**” e após na opção “**Page Setup**”.


Desenhando Moléculas


Iremos trabalhar agora com as diversas ferramentas para o desenho de moléculas orgânicas de estrutura plana.


Barra Estrutura




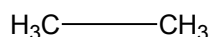
1 – **Seleciona/Move:**  Este botão permite selecionar ou mover qualquer objeto presente na área de trabalho. Seu modo de seleção consiste em abrir um retângulo sobre o que se quer selecionar.

2 – **Seleciona/Rotação:**  Este botão permite a rotação de 360° do objeto selecionado em 2D.


3 – **Rotação 3D:**  Este botão permite dar rotação em um ambiente 3D.(x, y, z).

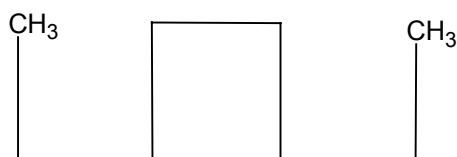
4 – **Laço:**  Este botão permite a seleção específica de algo na área de trabalho “laçando “ o objeto desenhando-se ao redor do mesmo.

5 – **Draw Normal:**  Este botão permite o desenho de uma estrutura orgânica simples como o exemplo abaixo:




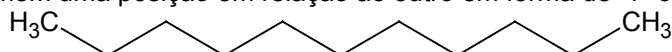
Obs: não esqueça que antes de desenhar a molécula você deve selecionar o átomo na barra de átomos.

6 – **Draw Contínuo:**  Este botão permite o desenho de uma estrutura orgânica contínua de modo que se determinam os pontos e a molécula vai se completando automaticamente, conforme o exemplo abaixo:




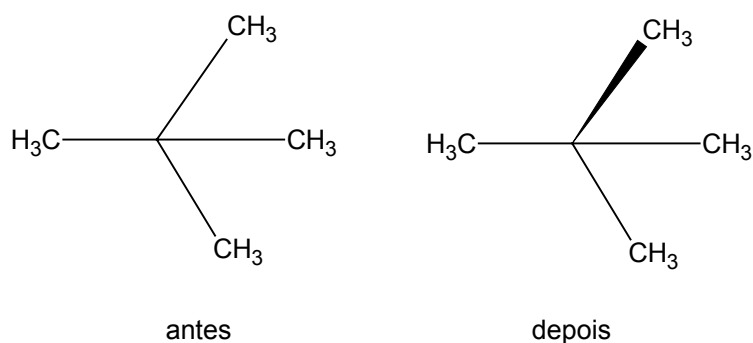
Obs: para corrigir possíveis imperfeições na molécula construída com esse botão, basta selecionar e arrastar os vértices da molécula.

7 – **Draw Cadeia Zigue-Zague:**  Este botão permite o desenho de uma estrutura orgânica contínua de modo que os átomos assumem uma posição em relação ao outro em forma de “v” conforme o exemplo abaixo:




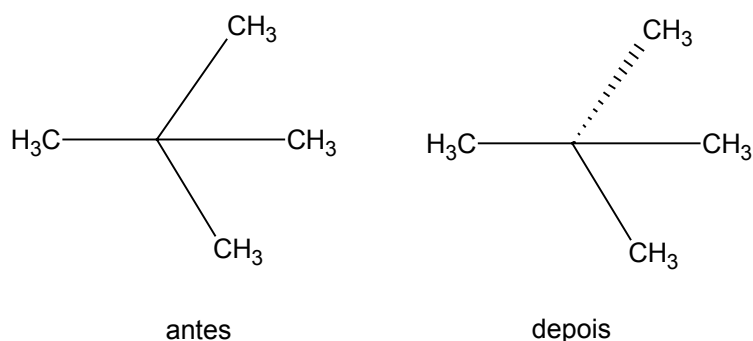
Obs: Esse botão é muito útil para cadeias muito extensas. Para saber o número de átomos de carbono na cadeia basta olhar o número logo acima do ponteiro do mouse.


8 – **Up Stereo Bonds:**  Este botão 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. Veja o exemplo abaixo:

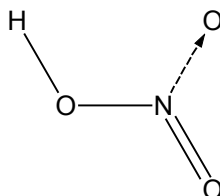



Obs: Uma forma de desfazer a aplicação deste tipo de propriedade é clicando no meu **"Edit"** e após na opção **"undo** (última ação)" ou então pressionar **<alt> + <backspace>**.

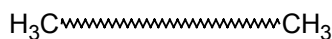
9 – **Dow Stereo Bonds:**  Este botão permite que seja aplicada a ligação entre átomos uma representação que o átomo que possui a ponta mais grossa estaria para dentro do plano da área de trabalho. Veja o exemplo abaixo:




10 – **Coordenando Ligações:**  Este botão permite que se consiga representar uma ligação coordenada dativa. Veja o exemplo abaixo:




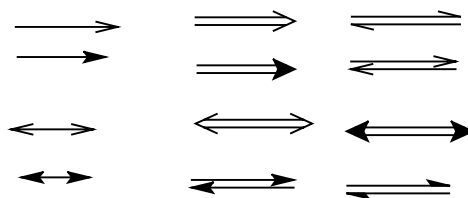
11 – **Indefinidas Ligações:**  Este botão permite representar um composto que o número de elementos entre os vértices da molécula é indefinido. Veja o exemplo abaixo:




12 – **Reaction Plus:**  Este botão permite a inserção do sinal de mais muito comum em reações orgânicas. Veja exemplo abaixo:

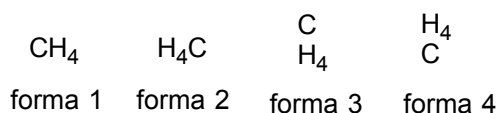


13 – **Seta de Reação:**  Este botão permite escolher dentre as diversas setas que as reações possam a necessitar. Veja exemplo das setas abaixo:




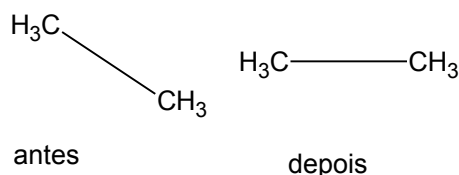
Obs: O triângulo branco localizado no canto inferior direito do botão permite a escolha dentre as diversas formas de setas.


14 – **Chance Position:**  Este botão permite mudar a posição dos átomos ligados ao átomo principal. Veja o exemplo com o gás metano:

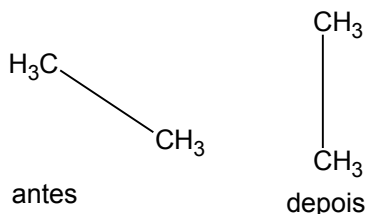



Obs: para alternar entre uma forma e outra basta clicar na molécula.

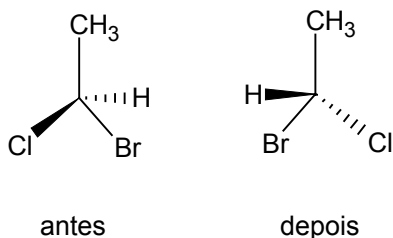
15 – **Alinhamento horizontal:**  Este botão permite alinhar a molécula na horizontal. Veja o exemplo abaixo:




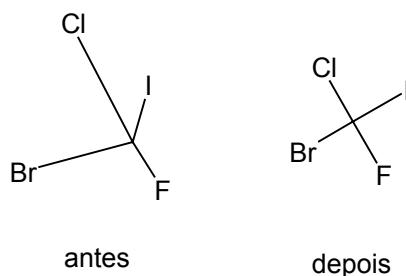
16 – **Alinhamento Vertical:**  Este botão permite alinhar a molécula na vertical. Veja o exemplo abaixo:




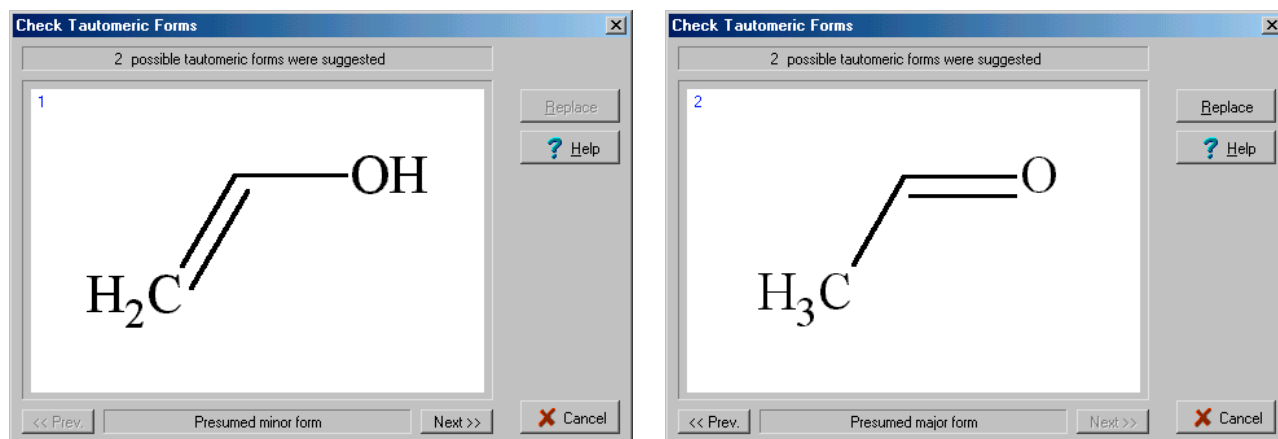
17 – **Flip on bond:**  Este botão permite que giramos a molécula a partir de um referencial ou ligação. Veja exemplo abaixo:




18 – **Limpe a estrutura:**  Este botão permite que a estrutura desenhada possua uma melhor proporcionalidade entre as ligações. Veja o exemplo abaixo:

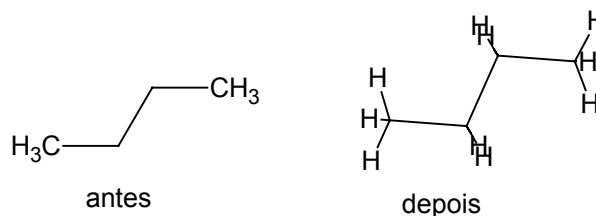


19 – **Verificar formas Tautoméricas:**  Este botão permite visualizar as formas tautoméricas (provenientes da isomeria de tautomeria) do composto. Veja exemplo abaixo para o etilenol (função enol)



Obs: clicando no botão “Replace” podemos aplicar na estrutura analisada o tautômero indicado.

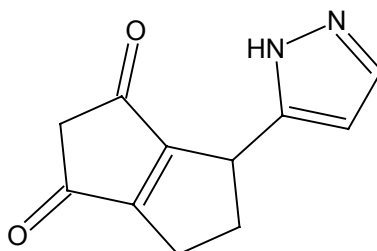
20 – **Otimização 3D:**  Este botão possibilita a adequação da fórmula estrutural para uma conformação 3D. Veja exemplo abaixo:



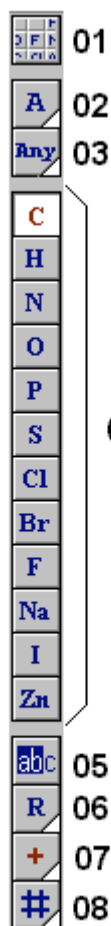
Obs: Com o botão “Rotação 3D” você pode girar a molécula e comprovar que ela está na conformação correta dos átomos pelo efeito da repulsão de cargas.

Exercício

Desenhar as 6 estruturas tautoméricas do seguinte composto abaixo:



Barra de Átomos



01 – **Tabela Periódica dos Elementos:** Este botão permite que seja escolhido o elemento com o qual se deseja trabalhar.

Obs: Outra forma de acessar a Tabela Periódica é pressionando a tecla "F7" do seu teclado de funções.

02 – Ferramentas de Átomo

- (Any) Indicação que pode ser qualquer átomo
- (Hetero) Indicação que pode ser qualquer heteroátomo
- (List) Cria uma Lista de átomos permitidos
- (Not list) Cria uma lista de átomos não permitidos

03 – Ferramentas de Ligação

- (Any) indica que pode possuir qualquer tipo de ligação (simples, dupla, tripla ou aromática)
- (Aromatic) indica que pode somente possuir ligação aromática
- (Single/Double) indica que pode possuir ligações simples e duplas (triplos e aromáticas não)
- (Ring) indica que a ligação faz parte de um anel (não de uma cadeia)
- (Chain) indica que a ligação faz parte de uma cadeia (não de um anel)

04 – Estes botões são colocados automaticamente em função do seu uso. Os mais usados permanecem listados.

05 – **Edit Atom Label:** Permite alterações e inclusões de novos textos em qualquer lugar na Área de Trabalho do Chems sketch.

06 – Radical Label: Permite substituir um átomo ou criar um átomo com o rótulo de radical.



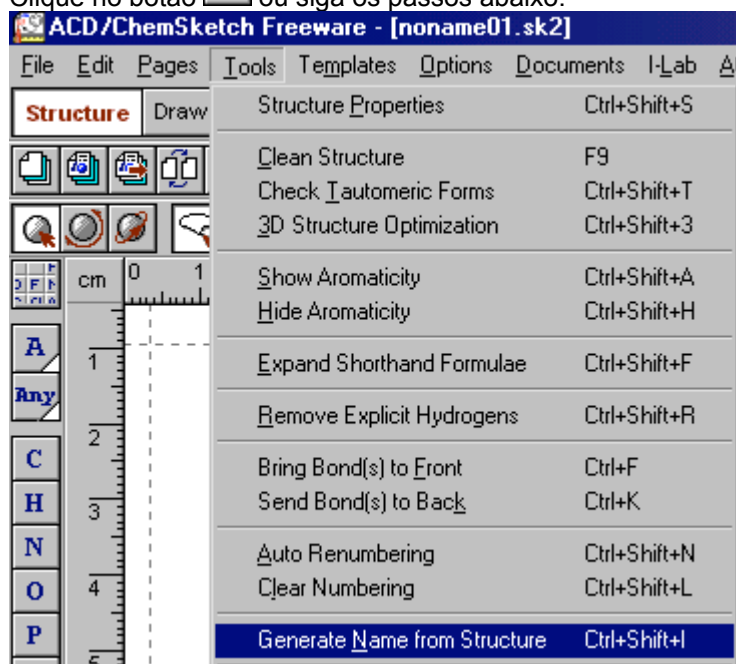
07 – Atribuições de carga e radical

- atribue ao átomo uma carga positiva acrescentando mais um átomo.
- atribue ao átomo uma carga negativa retirando um átomo ligado ao átomo principal
- atribue ao átomo a forma de radical livre
- atribue ao átomo a forma de íon radical positivo
- atribue ao átomo a forma de íon radical negativo

ACD/Name Freeware

Iremos agora ver como utilizar o serviço de nomenclatura freeware do ChemSketch.

Clique no botão  ou siga os passos abaixo:

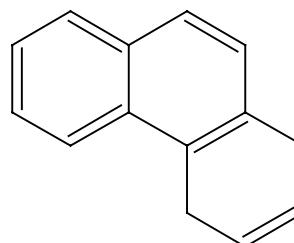
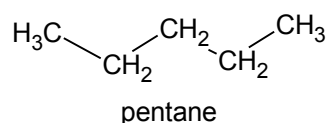


1) Selecione a molécula a qual deseja-se dar o nome.

2) Clique no menu “**Tools**” e após na opção “**Generate Name from Structure**”.

Obs: Nomes para estruturas com mais de 50 átomos (sendo que os disponíveis são: H, C, N, P, O, S, F, Cl, Br, eu, Li, Na, K) ou mais de 3 ciclos são só disponíveis na versão comercial do ChemSketch.

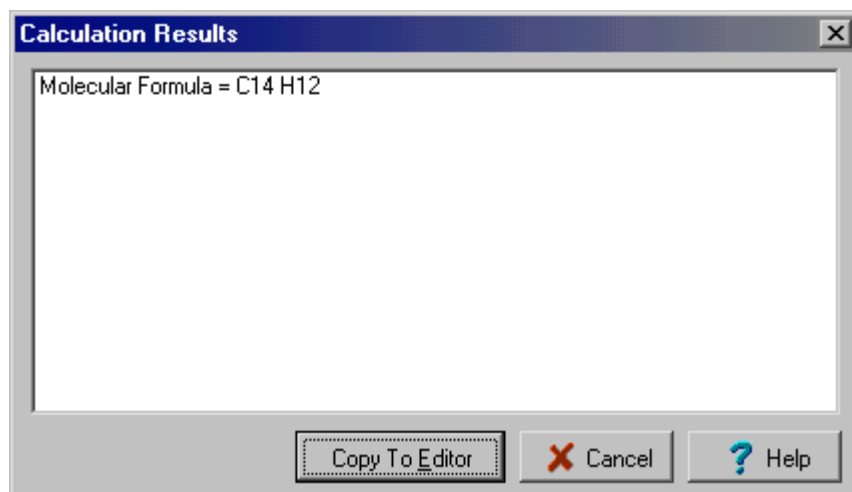
Exemplo:



1,4-dihydrophenanthrene

Propriedades das Moléculas

O ChemSketch permite adicionarmos algumas propriedades da entidades químicas desenhadas na área de trabalho. Para adicionar essas propriedades, siga os passos abaixo:



1) Clique no menu “**Tools**”, aponte para “**calculate**” e selecione a propriedade desejada.

2) Caso queira copiar a propriedade para a área de trabalho, clique no botão “**Copy to Editor**”.

As propriedades disponíveis são:

Molecular Formula	→	Fórmula Molecular
Formula Weight	→	Peso Molecular
Composition	→	Composição
Molar Refractivity	→	Refratividade Molar
Molar Volume	→	Volume Molar
Parachor	→	tensão superficial ajustada ao volume molar
Index of Refraction	→	Índice de refração
Surface Tension	→	tensão de superfície
Density	→	densidade
Dielectric Constant	→	constante dielétrica
Polarizability	→	Potencial de Polarização
Monoisotopic Mass	→	Massa monoisotópica
Nominal Mass	→	Massa nominal
Average Mass	→	Massa média
All Properties	→	todas a propriedades

Barra de Radicais

Para acessar a tabela de radicais, basta clicar no atalha na barra de radicais:



Table of Radicals

Chains: n-C₃, n-C₄, n-C₅, i-Pr, i-Bu, s-Bu, t-Bu, i-Am

Cycles: C₇, C₈

C-Groups: CH=CH₂, CH=CH₂/CH₂, C≡CH, CN, CF₃, CCl₃, C(i-Pr)₃, CPh₃, CH₂Ph, COPh, CO(i-Pr), CO(t-Bu), CHO, COCH₃, CONH₂, COCl, COOH, COOMe, COOEt, COOPh

Miscellaneous: NO₂, NCO, OAc, SO₃H, PO₃H₂, ONO₂, NCS, NHAc, SO₂H, OPO₂H₂, NO, OCN, OCHO, SO₂NH₂, OPO₃H₂, ONO, SCN, NHCHO, SO₂Cl, OMe, N₃, NC, NHSO₃H, OSO₃H, SO₂CF₃

Amino Acids: Ala-, Gly-, Phe-, Arg-, His-, Pro-, Asn-, Ile-, Ser-, Asp-, Leu-, **Thr-**, Cys-, Lys-, Trp-, Gln-, Met-, Tyr-, Glu-, Orn-, Val-

Protecting Groups: BOC, CBZ, DAN, TOS, TFA, ACA, FMOC, THP, 9-BBN

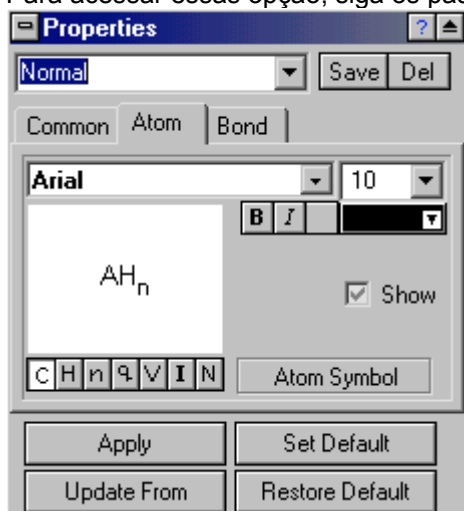
Threonine (C-radical) structure: CC(O)C(N)C(=O)R

Buttons: Cancel, Help

Na tabela de radicais temos uma relação restrita, porém muito usual de radicais orgânicos simples e complexos. Para selecionar um radical, basta clicar nele e adicionar no local desejado na área de trabalho.

Alterando formatação dos Átomos e Moléculas

Para alterarmos qualquer formato (cor, tamanho, etc), utilizamos a opção propriedades das estruturas. Para acessar essas opção, siga os passos abaixo:




1) Clique no menu “**Tools**” e após na opção “**Structure Properties**”.

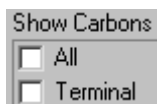
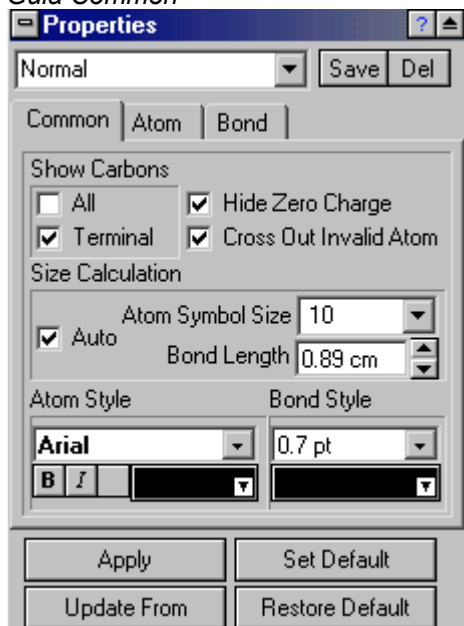
2) Altere as opções desejadas e clique no botão “**Apply**”.

Obs: Para acessar as propriedades da estrutura, clique duas vezes sobre a entidade química (íon, átomo ou molécula).

Abaixo analisaremos cada guia com detalhe:

Dica: para obter ajuda nas caixa de propriedades do ChemSketch, utilize o botão ajuda  no canto superior direito da caixa.

Guia Common



A opção “**All**”, quando marcada, faz com que sejam mostrados os carbonos na molécula. Já a opção “**Terminal**” faz com que somente os átomos dos vértices da molécula são mostrados.



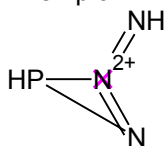
Opção terminal Marcada Opção All marcada

Obs: Caso queira que as próximas moléculas fiquem da mesma forma, pressione antes do botão “**Apply**” o botão “**Set Default**”.

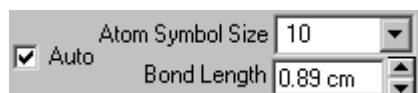
Hide Zero Charge : Esta opção quando marcada esconde o nox “0” das entidades químicas. Caso a opção esteja desmarcada, o nox “0” passa a ser colocado automaticamente.

Cross Out Invalid Atom: Esta opção dá autonomia para que o ChemSketch “risque” as estruturas inviáveis desenhadas.

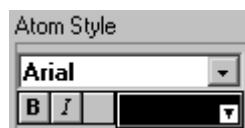
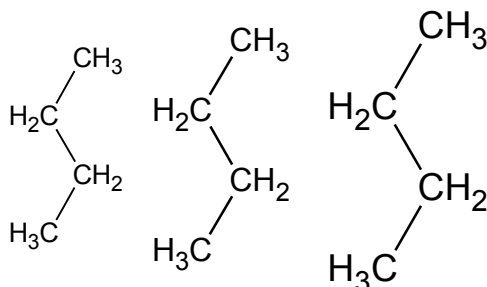
Exemplo:



A opção desmarcada faz com que não seja possível desenhar tal estrutura inviável. Aconselhasse a deixar marcada a opção por padrão.

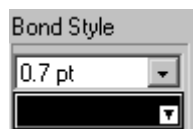
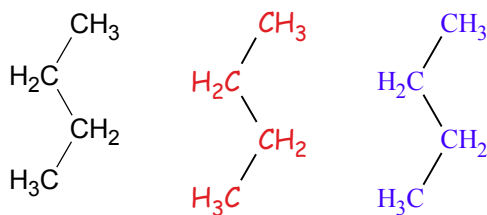


: Este conjunto de opção permite determinarmos o tamanho da fonte que será usada para desenhar os átomos e também o comprimento da ligação. Deixando a opção **“Auto”** marcada, deixamos por conta do programa calcular a proporção do comprimento da ligação em função da fonte utilizada.

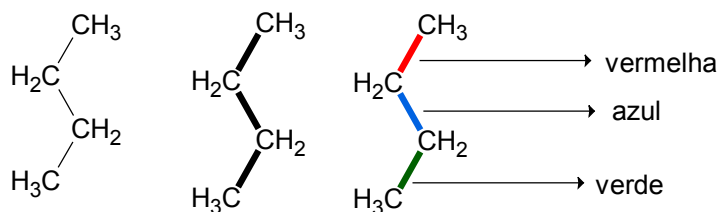


: Este conjunto de opções permite determinarmos a formação da fonte utilizada.

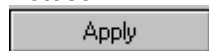
Exemplos:



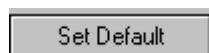
: Este conjunto de opções permite determinarmos o estilo das ligações entre os átomos.



Botões:



: 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.

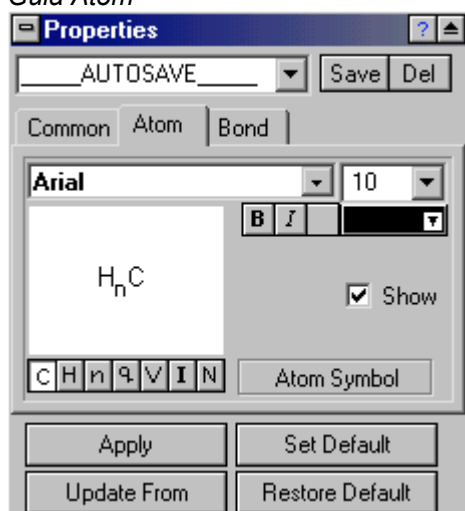


: Permite copiar formatação de uma entidade química e aplica-la em outra.



: Permite restaurar as configurações padrão do ChemSketch.

Guia Atom



Este conjunto de opções permite alterar a formatação da entidade química selecionada.

Obs: selecione a entidade química a qual você deseja alterar.



1 – Escolha o átomo principal de sua entidade química e altere a sua formatação.

2 – Altera as configurações dos átomos de hidrogênio presentes nas entidades químicas.

3 – Determina a posição, na vertical, que ficará o número que indica a quantidade de hidrogênios na entidade química.

4 – Indica a carga da entidade química desenha.

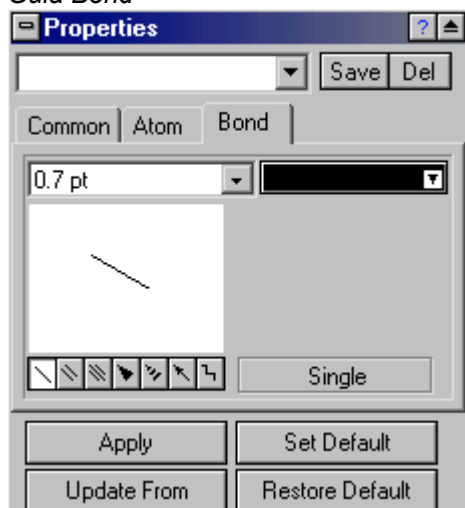
5 – Determina a valência do átomo selecionado.

Obs: Não esqueça de selecionar o átomo (referência 1) antes de alterar a valência do átomo.

6 – Permite explicitar qual isótopo estamos usando na entidade química.

7 – Permite determinar a numeração e sua posição nos eixos X e Y da entidade química selecionada.

Guia Bond



Este conjunto de opções permite definirmos a densidade das ligações entre as entidades como também sua cor.

Obs:



Estas opções permitem configurar as ligações entre as entidades químicas:

1 – Define as configurações de ligações do tipo “simples”.

2 – Define as configurações de ligações do tipo “dupla”.

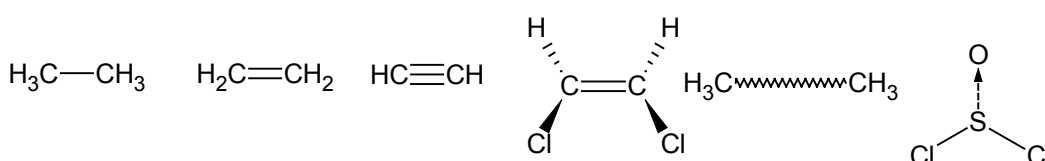
3 – Define as configurações de ligações do tipo “tripla”.

4 – Define as configurações de ligações com representação fora do plano (tela).

5 – Define as configurações de ligações com representação para dentro do plano (tela).


6 – Define as configurações de ligações do tipo “coordenada”.

7 – Define as configurações de ligações do tipo “indefinidas”.




Barra Geral

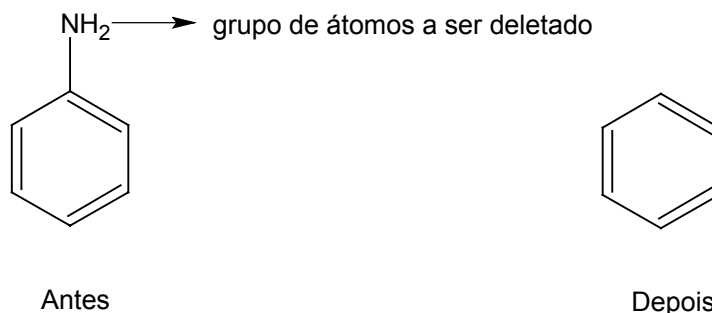
A barra geral, além dos botões que gerenciam a criação, salvamento e abertura de arquivos, possui botões que auxiliam no processo de desenho das moléculas.


 undo O botão “undo” quando pressionado, volta uma ação realizada no ChemSketch. Seu atalho no teclado é: <ctrl>+Z.


 redo O botão “redo” quando pressionado, realiza a ação anteriormente realizada.


Obs: Esses comandos estão localizados no menu “Edit”.

 delete O botão “delete” permite você apagar átomos ou conjunto de átomos específicos nas moléculas. Veja o exemplo abaixo:

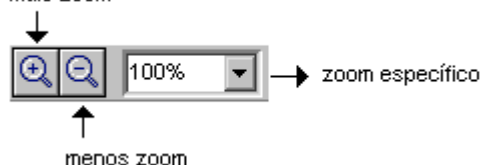


 recorta O botão “recorta” permite remover um ou um grupo de átomos selecionados. Este botão é usado quando desejamos *mover* algum objeto na área de trabalho do ChemSketch.

 copiar O botão “copiar” permite fazer cópias de um ou um grupo de átomos selecionados. É usado em conjunto com o botão *colar*.

 colar O botão “colar” permite *inserir* um ou um grupo de átomos copiados ou recortados anteriormente.

mais zoom



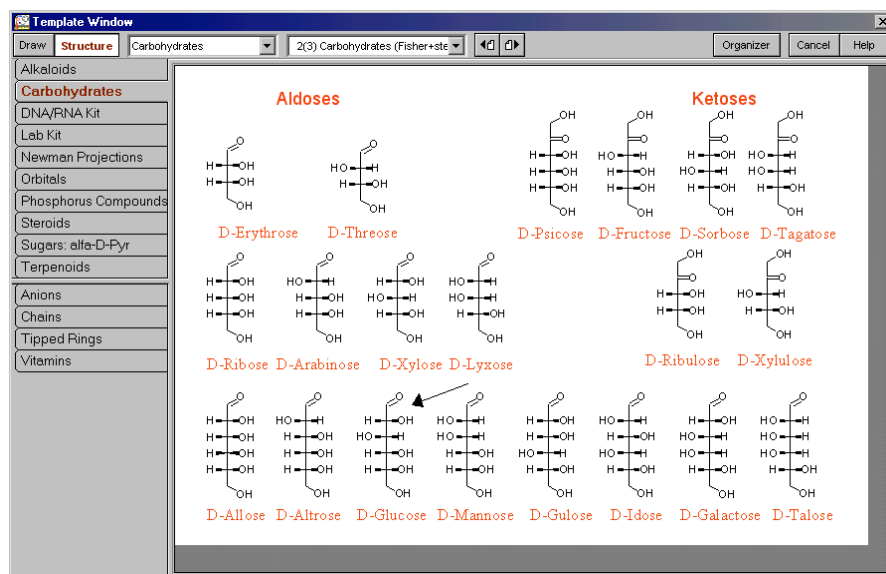
A ferramenta zoom é indispensável para dimensionar a área de trabalho conforme a situação necessitar. Para termos uma idéia do que realmente sairá impresso, devemos utilizar a zoom 100%.



O botão “windows Templates” permite abrir a coleção de modelos de inúmeras estruturas já prontas para serem usadas. Iremos trabalhar com alguns desses modelos abaixo:

Atividade:


Inserindo a D - Glucose, na projeção de Fisher:



1) Precione o botão “**Template Window**” na barra geral, pressione a tecla **F5** ou então clique no menu “**Template**” e após na opção “**Template Window**” para abrir a janela de modelos.

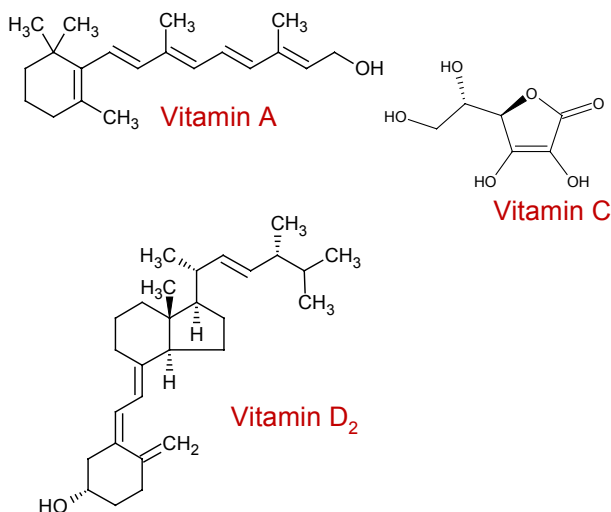
2) Clique na guia “Carbohydrates” e selecione a D- Glucose conforme indicado na figura ao lado.

3) Mova o cursor até o colar onde você deseja colar a molécula e clique uma vez sobre o local.

Obs: Utilize os botões  para alternar nas páginas de uma mesma guia de modelos.

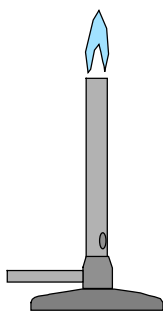
Exercícios

01) Procure e cole na área de trabalho do ChemSketch as seguintes vitaminas: A, C e D₂.



02) Cole as três moléculas no Microsoft Word, diminua o tamanho do desenho até aproximadamente o tamanho da figura da apostila.

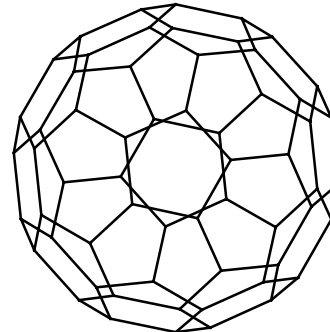
03) Procure as seguintes figuras no “Windows Template do ChemSketch e adicione-as na área de trabalho.



Bico de Bunsen



Bureta

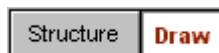


Fulereo

04) Adicione no documento anterior, abaixo das moléculas, os desenhos solicitados cuidando para que eles fiquem em uma folha somente e, após isso, imprima o documento.

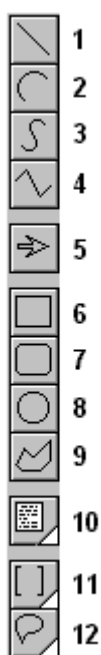
Desenhando figuras


Iremos a partir de agora ver as ferramentas de desenho que o ChemSketch proporciona no módulo Draw.

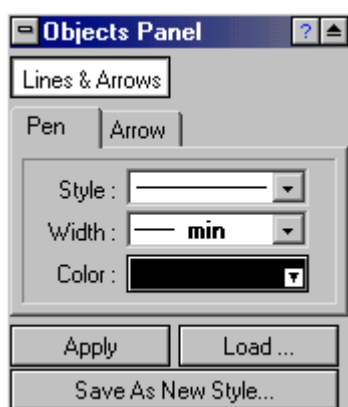


Barra de Desenhos

A barra de desenhos trás consigo uma série de ferramentas para criarmos os desenhos mais variados. Abaixo, a descrição de cada uma dessas ferramentas:



1 –  “Line”: Permite criar uma linha reta:
Obs: Clique duplo sobre a linha permite definir sua formatação.



Guia Pen




Style: Escolhe o tipo de linha

Width: Densidade da linha

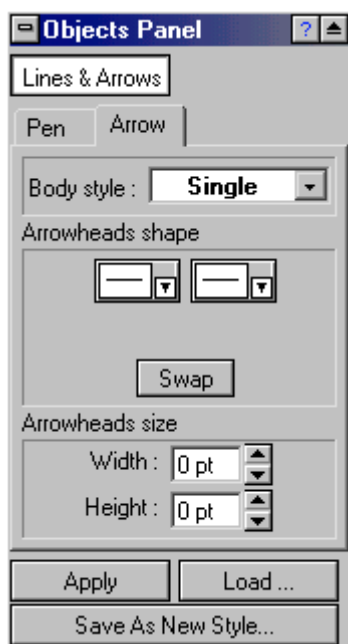
Color: Cor da linha

: Aplica as alterações no objeto selecionado

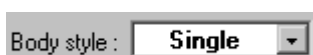
: Permite aplicar no objeto selecionado uma configuração pré-existente no ChemSketch ou uma feita pelo usuário.

: Salva as configurações feitas para serem usadas posteriormente

Obs: para selecionar a configuração, usa-se o botão “Load...”




Guia Arrow





Body style : Permite escolher o tipo de linha (simples, dupla, tripla, etc).

Arrowheads shape : Permite definir as configurações de cada ponta da linha, transformando-as em flechas por exemplo.

Arrowheads size : Permite definirmos a densidade das linhas e/ou flechas.

2 –  **“Arc”**: Permite criar uma linha em curva, na forma de arco.


3 –  **“Curve”**: Permite criar uma linha utilizando curvas.

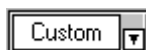
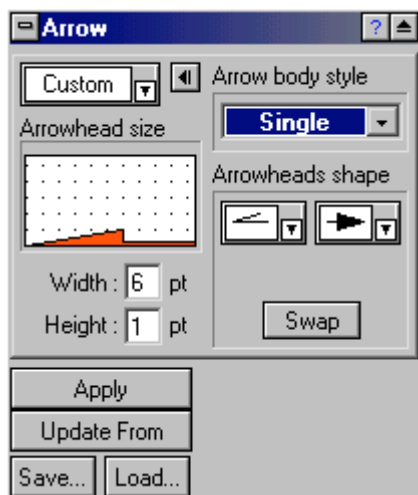
4 –  **“Polyline”**: Permite criar uma forma de linha personalizada.

Obs: usada em conjunto com a ferramenta  que será descrita mais adiante.

5 –  **“Draw Arrow”**: Permite desenharmos flechas com diversas configurações:

Obs: Ao clicar na ferramenta **“Draw Arrow”**, abre-se automaticamente a caixa de opções **“Arrow”**.

Dica: Use o botão  para mostrar todas as opções da caixa **“Arrow”**.



: Permite escolhermos o estilo de seta que desejamos usar.




Esta ferramenta permite definirmos a largura (Width) e a altura (Height) da flecha. Estes parâmetros podem ser especificados em pontos pela simples alteração nas caixas de formulário correspondentes ou então manualmente.

Arrowheads shape: Permite escolher o estilo da linha da flecha (simples, dupla, tripla, etc...) permitindo definir tipos de setas diferentes para cada extremidade da flecha.

6 –  **“Retângulo”**: Permite desenhar formas retangulares.

Obs: Para desenhar um quadrado, ao desenhar o objeto deixe pressionada a tecla **“shift”** do seu teclado.

7 –  **“Retângulo arredondado”**: Permite o desenho de retângulo com os cantos arredondados.

8 –  **“Elipse”**: Permite desenharmos uma elipse na área de trabalho.

Obs: Para desenhar um círculo, ao desenhar o objeto, deixe pressionada a tecla **“shift”** do seu teclado.

9 –  **“Polígono”**: Permite desenharmos formas geométricas diversas.

10 –  **“Text”**: Permite a adição de texto na área de trabalho.

Obs: Para formatação do texto, observe os seguintes botões adicionados a barra de edição quando a ferramenta é selecionada.



: permite a alteração do tipo de fonte usada.



: Permite alterarmos o tamanho da fonte.



: Permite adicionarmos o carácter “negrito” ao texto.



: Permite adicionarmos o carácter “itálico” ao texto.



: Permite adicionarmos o carácter “sublinhado” ao texto.



: Permite adicionarmos o carácter “texto riscado” ao texto.



: Permite adicionarmos o carácter “sobscrito” ao texto.



: Permite adicionarmos o caráter “subscrito” ao texto.



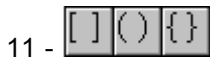
: Permite configurarmos o alinhamento do texto. Da esquerda para a direita, temos os seguintes tipos de alinhamento: esquerdo, central, direito e justificado.



: Este botão permite restaurarmos o estilo padrão definido.



: Este botão permite definirmos o estilo padrão de texto (default).



11 - : Permite escolhermos os seguintes símbolos, da esquerda para direita: Chaves, parênteses, colchetes.

Obs: Para mostrar as várias opções da ferramenta, clique no triângulo localizado no canto inferior direito do botão.



12 - : Estes botões são utilizados para alguma descrição estilo “balões de texto”.

Barra de Edição

A barra de edição permite manipularmos os objetos já desenhados na área de desenho. Abaixo, veremos as funções de cada botão.





1 – **“Select/Move/Resize”**: Este botão permite ao usuário selecionar, mover e dimensionar um objeto na área de trabalho.



2 – **“Select/Move/Rotate”**: Este botão, além das funções de seleção e movimentação dos objetos, tem como outra função a rotação em 2D.



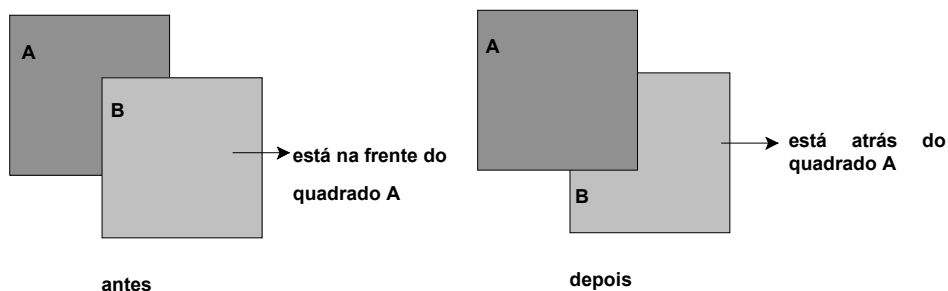
3 – **“Edit Nodes”**: Este botão permite a edição dos nós de um objeto. Exemplo de ferramentas que criam objetos com nós são:  , .



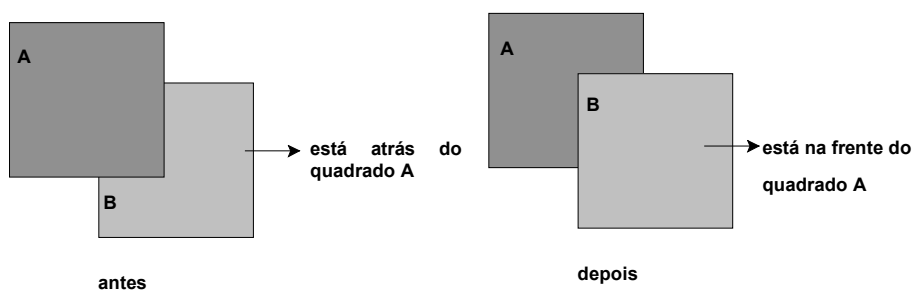
4 – **“Edit Text”**: Habilita a opção de editarmos alguma caixa de texto presente na área de trabalho..





5 – **“Bring to de front”**: Faz com que o objeto selecionado fique na frente dos demais objetos.



6 – **“Send to back”**: Faz com que o objeto selecionado fique atrás dos demais objetos.




7 –  **“Group”**: Permite agruparmos dois ou mais objetos selecionados fazendo-os serem um só objeto.

8 –  **“Flip left to right”**: Permite girar o objeto na horizontal, girando da esquerda para a direita.

9 –  **“Flip top to bottom”**: permite girar o objeto no sentido vertical, girando do topo para o rodapé.

10 –  **“Rotate 90°”**: Permite rotacionar o objeto em ângulos fixos de 90°.

11 –  **“Alinhamento Horizontal”**: Permite alinhar o objeto a esquerda, centro ou direita respectivamente.

12 –  **“Alinhamento vertical”**: Permite alinhar o objeto na parte superior, central ou inferior.

Exercícios

Reproduzir os esquemas mostrados abaixo:

Reactants:

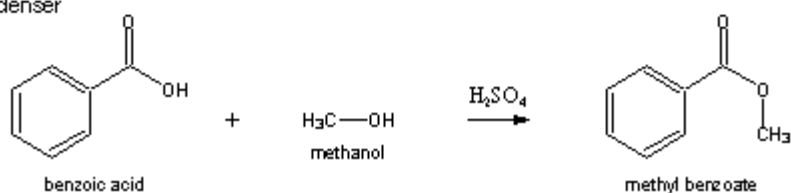
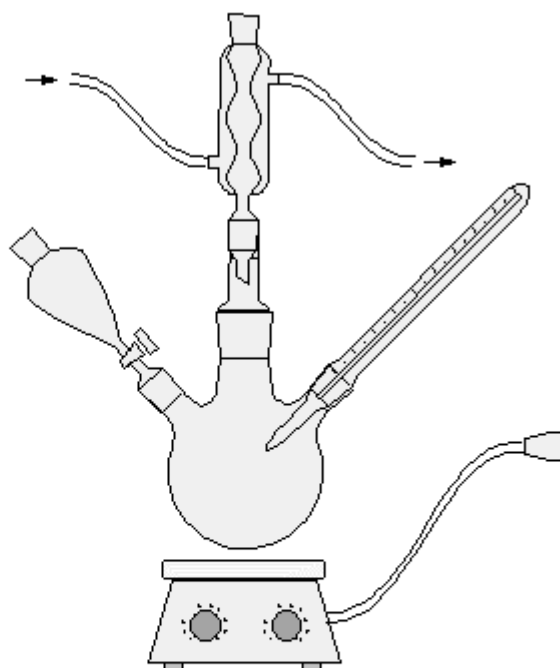
benzoic acid 15g
methanol 20 mL
sulfuric acid 3 mL

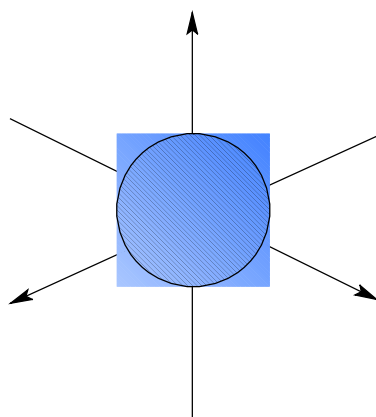
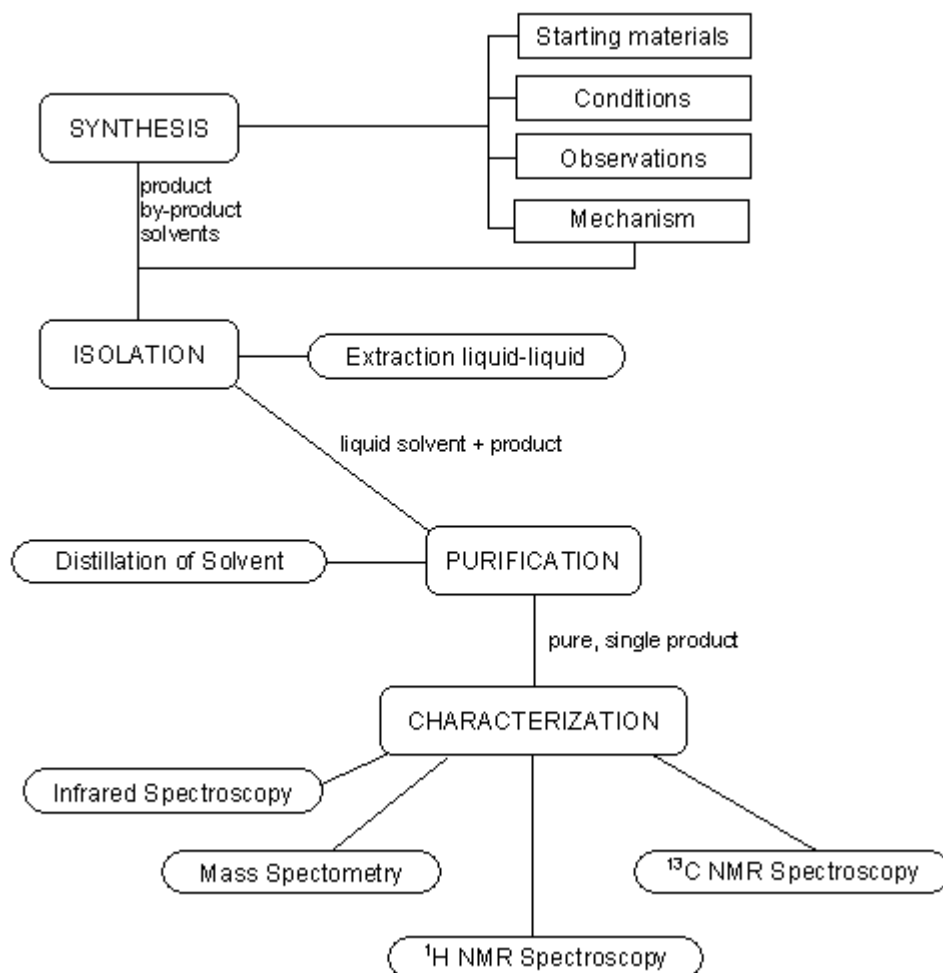
Combination:

reflux 20 min.

Observations:

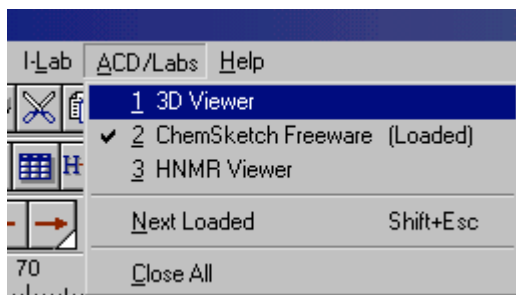
reflux line approx.
halfway up
condenser






Moléculas em 3D

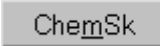

Além da estrutura plana, o ChemSketch possui um módulo de geração e visualização de moléculas em 3D. Para criar uma visualização 3D a partir de uma estrutura plana criada na área de trabalho, siga os passos abaixo:



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

2) Otimize as ligações na conformação 3D clicando no botão .


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


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


Barra de manipulação 3D

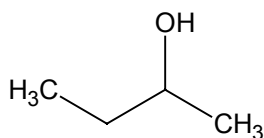
Abaixo traremos uma visão geral das ferramentas de manipulação 3D



1 –  "Open File": Este botão permite abrimos um arquivo 3D criado no ChemSketch (extensão .s3d).

2 –  "Save File": Este botão permite salvamos o documento ativo no formato de visualização 3D do ChemSketch (extensão .s3d).


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



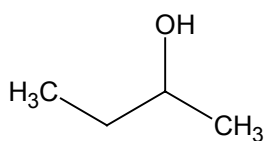
Estrutura plana



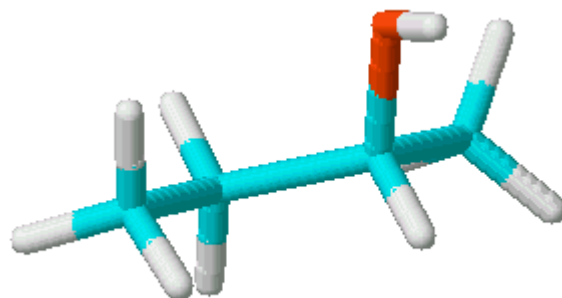
Estrutura 3D – modo linhas

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

Exemplo:



Estrutura plana

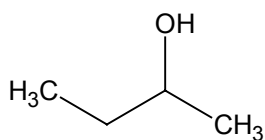


Estrutura 3D – modo varas

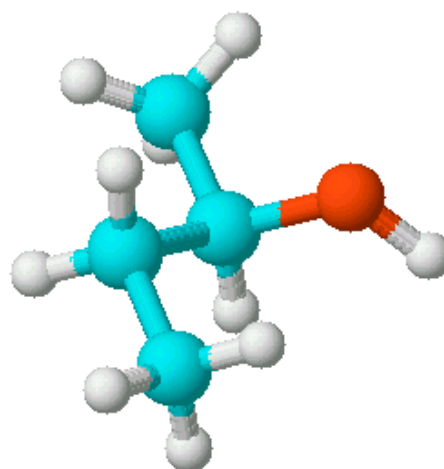


5 – **“Balls & Sticks”**: Tipo de representação 3D que mostra a molécula na forma “bolas e varas”.

Exemplo:



Estrutura plana

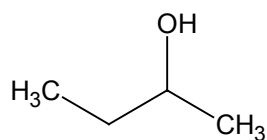


Estrutura 3D – modo bolas e varas

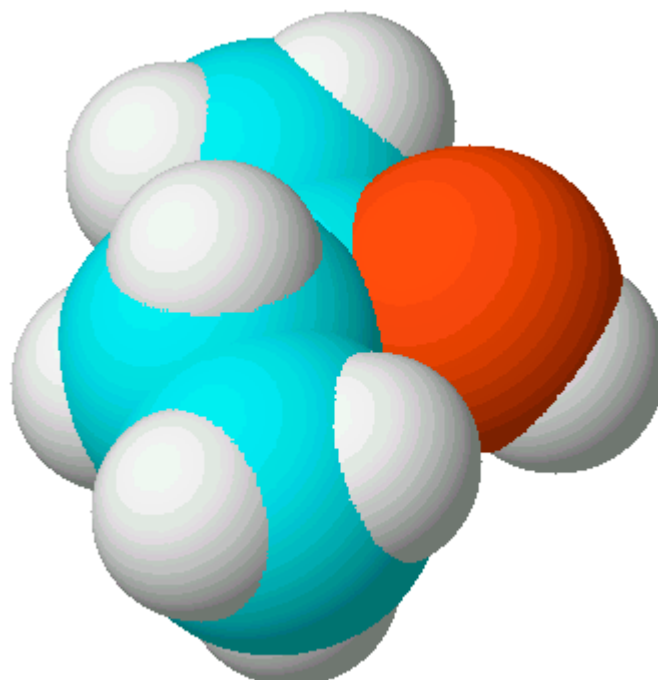


6 – **“Spacefill”**: Tipo de representação 3D que mostra a os espaços vazios da molécula “preenchidos” (semelhante ao modelo Stuart)


Exemplo:





Estrutura plana

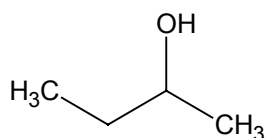


Estrutura 3D – modo de Stuart

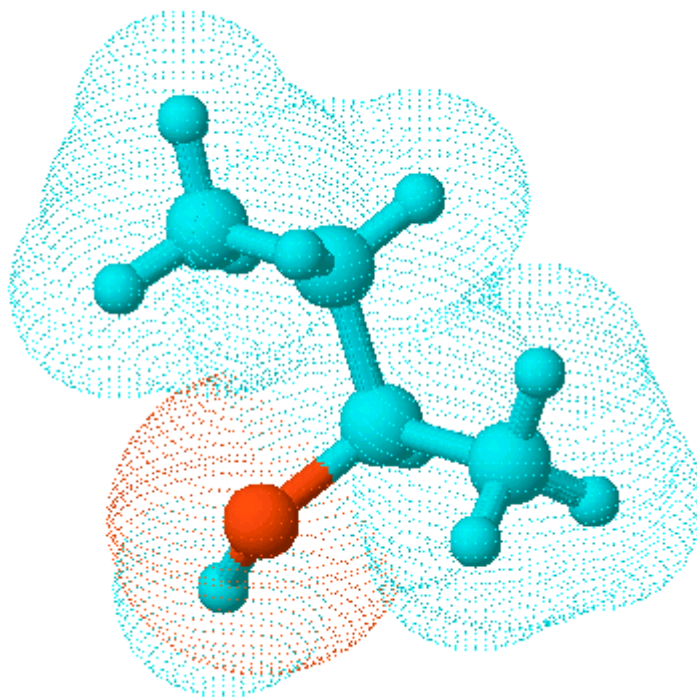
7 –  **“Dots only”**: Tipo de representação 3D que mostra “somente pontos” representando os átomos e ligações da molécula.

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

9 –  **“With Dots”**: Marcado mostra os “pontos” da representação 3D em qualquer forma de visualização.
Exemplo:




Estrutura plana



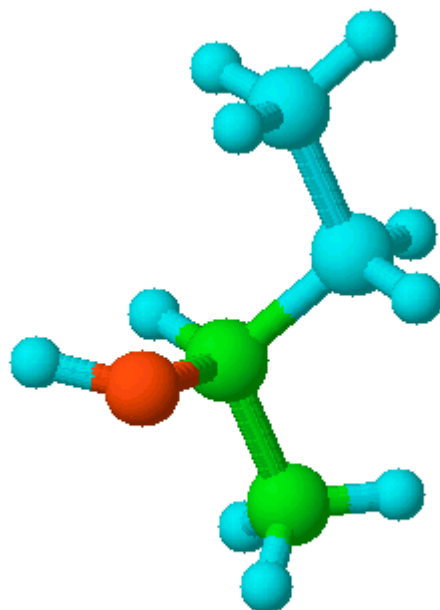
Estrutura 3D – Bolas e varetas com pontos

10 –  **“Increase Radii by 5%”**: Aumenta o tamanho dos átomos da molécula a uma taxa fixa de 5%.


11 –  **“Decrease Radii by 5%”**: Diminui o tamanho dos átomos da molécula a uma taxa fixa de 5%.

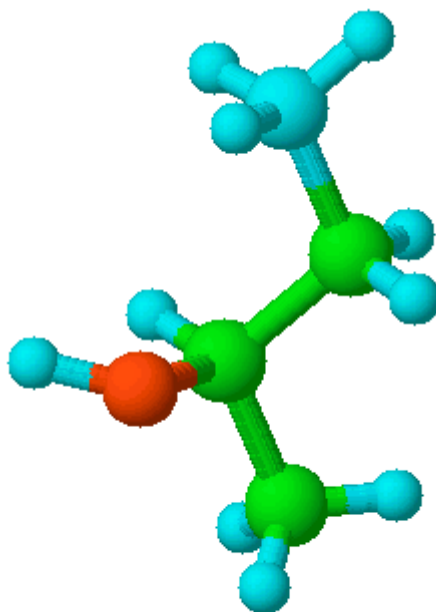
12 –  **“Measure Distance”**: Permite determinarmos a distância entre dois átomos em Å (angstrom).
Obs: Para determinar a distância entre dois átomos, clique primeiramente na ferramenta e após isso selecione dois átomos. Os átomos selecionados para a avaliação ficam, por padrão, de coloração verde. A distância é informada na barra de status da tela.

Exemplo:




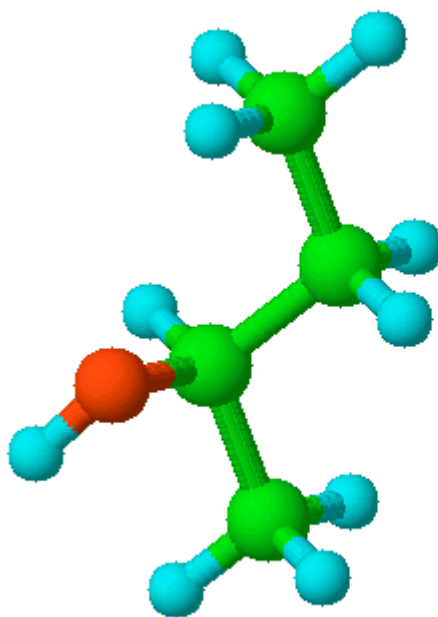
NONAME03.S3D Distance (C 3, C 4) = 1.5296 A

13 –  **“Measure Bond Angle”**: Permite determinarmos o ângulo entre três átomos (valor dado em deg).
Exemplo:




NONAME03.S3D Bond Angle (C 4, C 3, C 2) = 109.480 Deg


- 14 –  **“Measure Torsion Angle”**: Permite determinarmos o ângulo de torção entre os átomos.
Exemplo:




NONAME03.S3D Torsion Angle (C 4, C 3, C 2, C 1) = 178.519 Deg

- 15 – **“3D Optimization”**: Permite otimizar a estrutura no formato 3D.

- 16 –  **“Colors...”** Este botão permite definirmos as cores tanto dos átomos e ligações como também do plano de fundo.

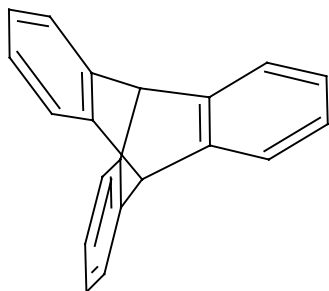
- 17 –  **“Auto Rotate”**: Permite a molécula adquirir auto-rotação.

- 18 –  **“Auto Rotate and Change Style”**: Além da auto-rotação, a opção permite que o programa troque automaticamente entre as visualizações disponíveis.

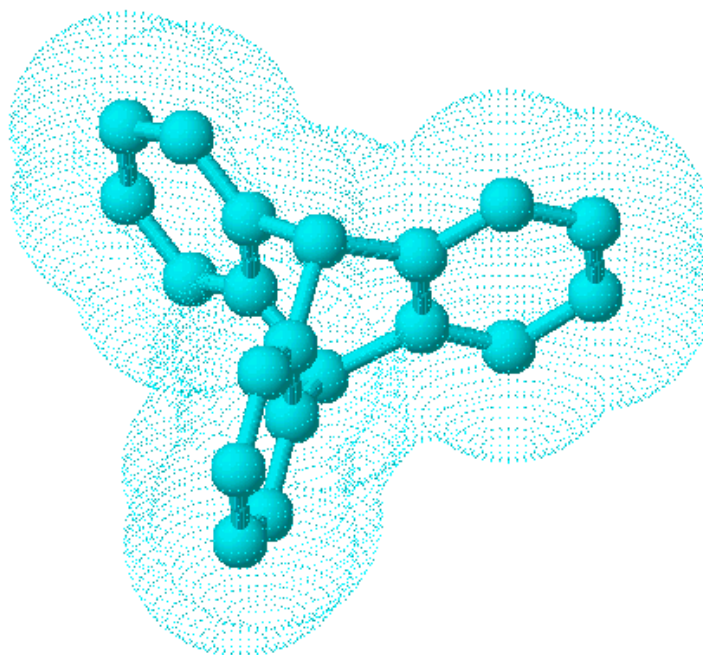
Exercícios

Desenhe as estrutura plana e 3D conforme as figuras abaixo:

a)

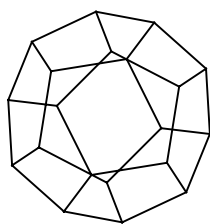


Estrutura Plana (com otimização 3D)

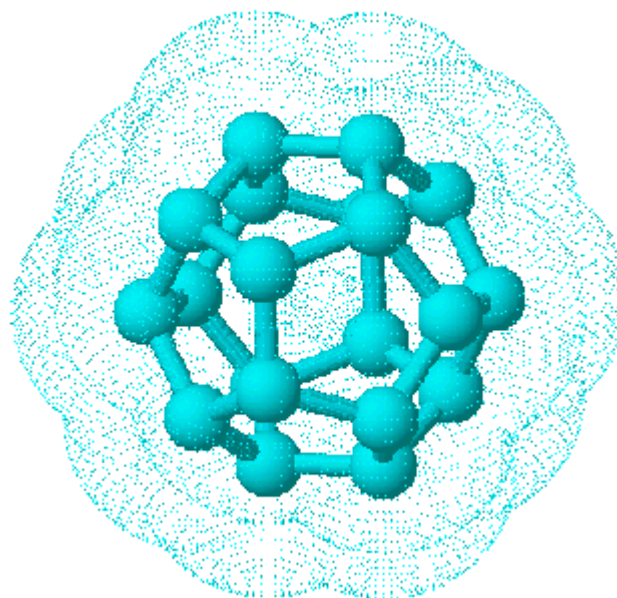


Estrutura 3D

b)



Estrutura Plana (com otimização 3D)



Estrutura 3D