DESENHO DE ESTRUTURAS QUÍMICAS
+
TÉCNICAS DE PESQUISA ONLINE

Prof. Dr. Márcio Marques Martins 
digimarcio
http://digichem.org
http://slideshare.net/marsjomm

Dados físico-químicos

Podem ser obtidos com mais detalhes nos seguintes sites:

1) http://chemicalize.org
2) http://webbook.nist.gov

Saiba mais sobre o Chemicalize neste link: http://digichem.org/2012/03/12/dica-de-site-chemicalizeorg/

Dados físico-químicos

No google, basta digitar o nome da molécula seguida de MSDS ou FISPQ.

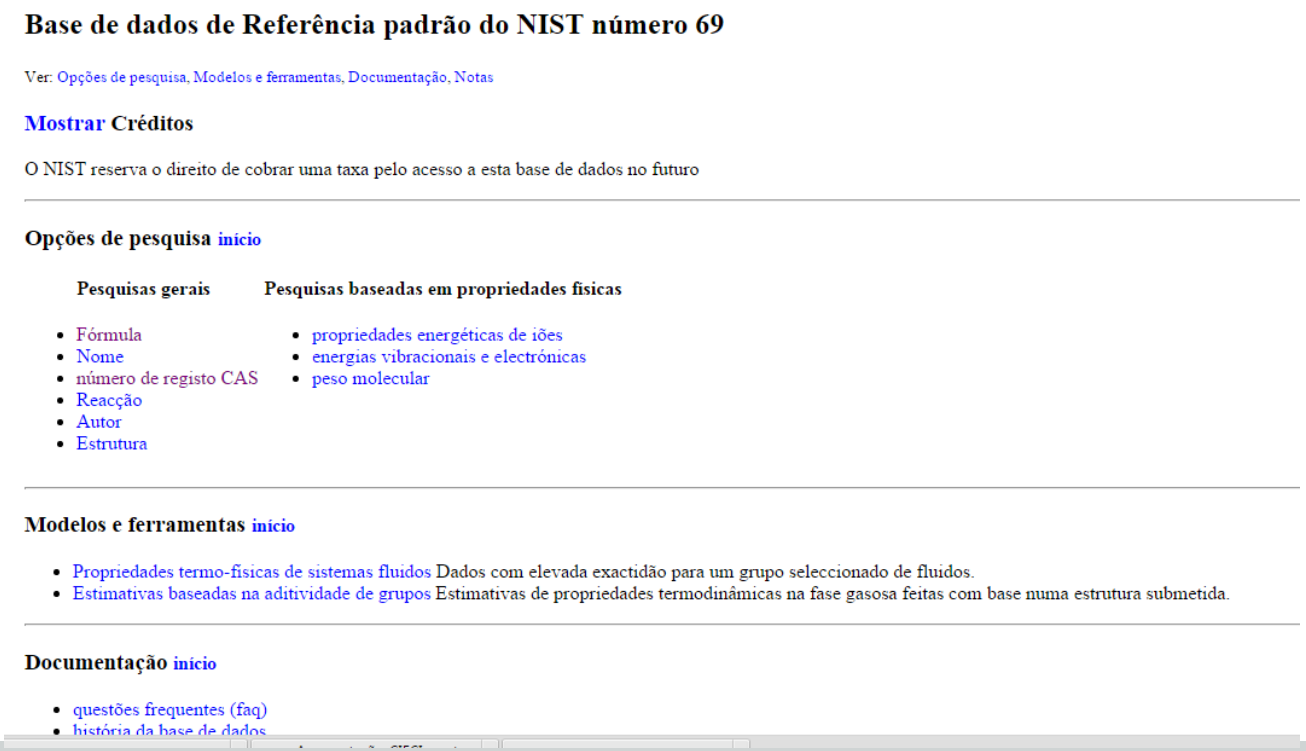
MSDS: material safety data sheet

FISPQ: ficha de segurança de produtos químicos

Dados físico-químicos

Também é possível obter muita informação usando o site do NIST:

http://webbook.nist.gov/chemistry



Base de dados de Referência padrão do NIST número 69

Ver: Opções de pesquisa, Modelos e ferramentas, Documentação, Notas

Mostrar Créditos

O NIST reserva o direito de cobrar uma taxa pelo acesso a esta base de dados no futuro

---

Opções de pesquisa inicio

Pesquisas gerais

- Fórmula
- Nome
- número de registo CAS
- Reacção
- Autor
- Estrutura

Pesquisas baseadas em propriedades físicas

- propriedades energéticas de iões
- energias vibracionais e electrónicas
- peso molecular

Modelos e ferramentas inicio

- Propriedades termo-físicas de sistemas fluidos Dados com elevada exactidão para um grupo seleccionado de fluidos.
- Estimativas baseadas na aditividade de grupos Estimativas de propriedades termodinâmicas na fase gasosa feitas com base numa estrutura submetida.

Documentação inicio

- questões frequentes (faq)
- história da base de dados

Dicas para procurar em inglês

É sempre interessante conhecer alguns termos químicos em inglês para realizar uma busca mais elaborada:

Ponto de ebulição – boiling point
Ponto de fusão – melting point
Ponto de ignição - flash point
Entalpia – Enthalpy
Entropy – Entropia
Energia Livre de Gibbs – Gibbs Free Energy

Dicas para procurar em inglês

Quanto à forma de escrever os nomes de substâncias:
Alcano – alkane
Alceno – alkene
Alcino – alkyne
Álcool – alcohol/ Aldeído – aldehyde
Amina – Amine / Amida - Amide
Cetona - ketone
Ácido carboxílico – carboxylic acid
Éter – ether
Éster – esther
Hidro – hydro
Cloro – Chlorine
Cloreto – Chloride / Clorato – Chlorate / Clorito - Chlorite
Fluor – Fluorine / Fluoreto - Fluoride
Bromo – Bromine / Brometo - Bromide
Iodo – Iodine / Iodeto - Iodide
Silício – Silicon
Silicona - Silicone

Dicas para procurar em inglês

Quanto à forma de escrever os nomes de substâncias:
Oxigênio - Oxygen
Enxofre – Sulfur ou Tio
Selênio – Selenium
Telúrio – Telurium
Boro – Boron
Metais, em geral, ganham a terminação -ium
Alumínio – Aluminium
Cromo – Chromium
Platina – Platinum
Lítio – Lithium/Sódio- Sodium/Potássio – Potassium/Rubídio-Rubydium
Berílio - Ber
Ferro – Iron
Cobre – Copper
Níquel – Nickel
Ouro – Gold
Prata – Silver

Dicas para procurar em inglês

Quanto à forma de escrever os nomes de substâncias:
Hidrogênio – Hydrogen / Hidreto – Hydride / Hidrato - Hydrate
Etileno – Ethylene
Propileno – propylene
Metil – Methyl
Butil = butyl
Acetil – Acethyl
Alil – Allyl
Benzil – Benzyl
Infravermelho – Infrared (IR)
Ultravioleta – ultraviolet (UV)
Ressonância Magnética Nuclear (RMN) – Nuclear Magnetic Ressonance (NMR)
Espectroscopia – Spectroscopy
Espectro – Spectrum (patronum?)
Cromatografia – Chromatography
Titulação – Tritration

Dicas para procurar em inglês

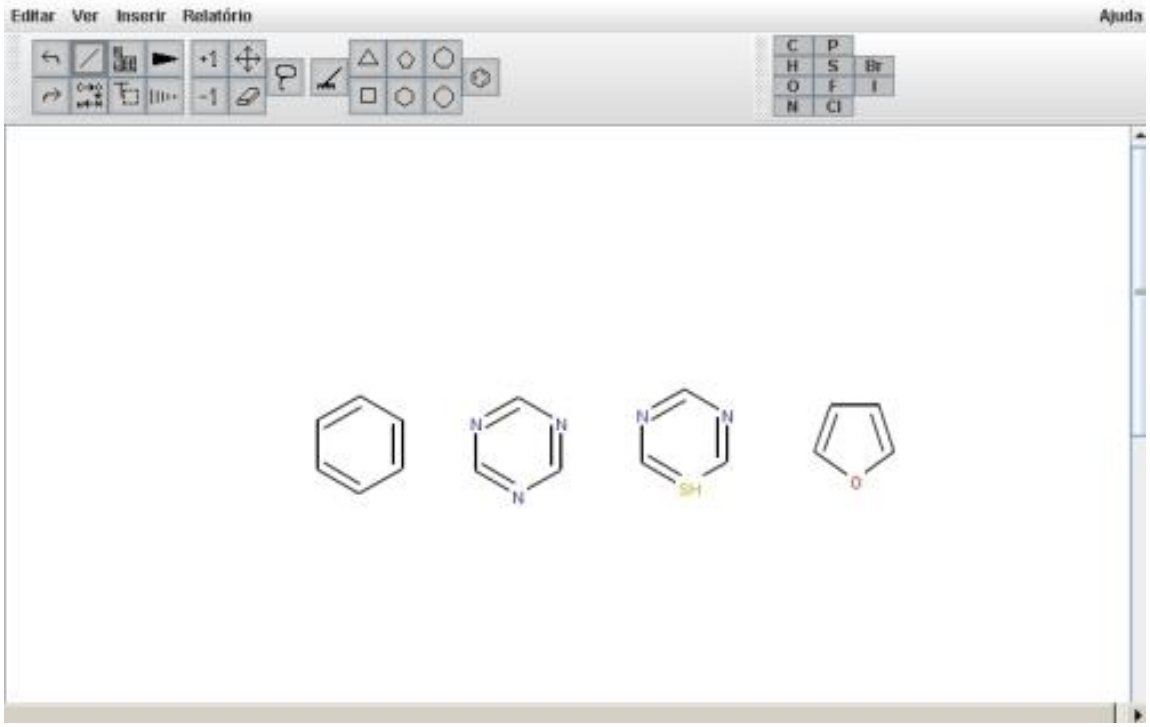
Tubo de ensaio – Test tube
Frasco de Erlenmeyer – Conical Flask
Placa de Petri – Petri Dish
Agitador Magnético – Magnetic Stirrer
Condensador/condensação – Condenser/condensation
Balão volumétrico – Volumetric flask
Vidro temperado – tempered glass
Pipeta graduada – pipette
Agitar/agitação – Stir/stirring
Verter ou derramar – Pour/pouring
Misturar/misturando – Mix/mixing
Aquecer/aquecimento – warm/warming
Ferver/fervente – boil/boiling
Resfriar/resfriamento – cool/cooling

Desenho de estruturas químicas

Online:
JChemPaint
Engg Heads Chembox
Offline:
SymyxDraw / Site
ChemSketch

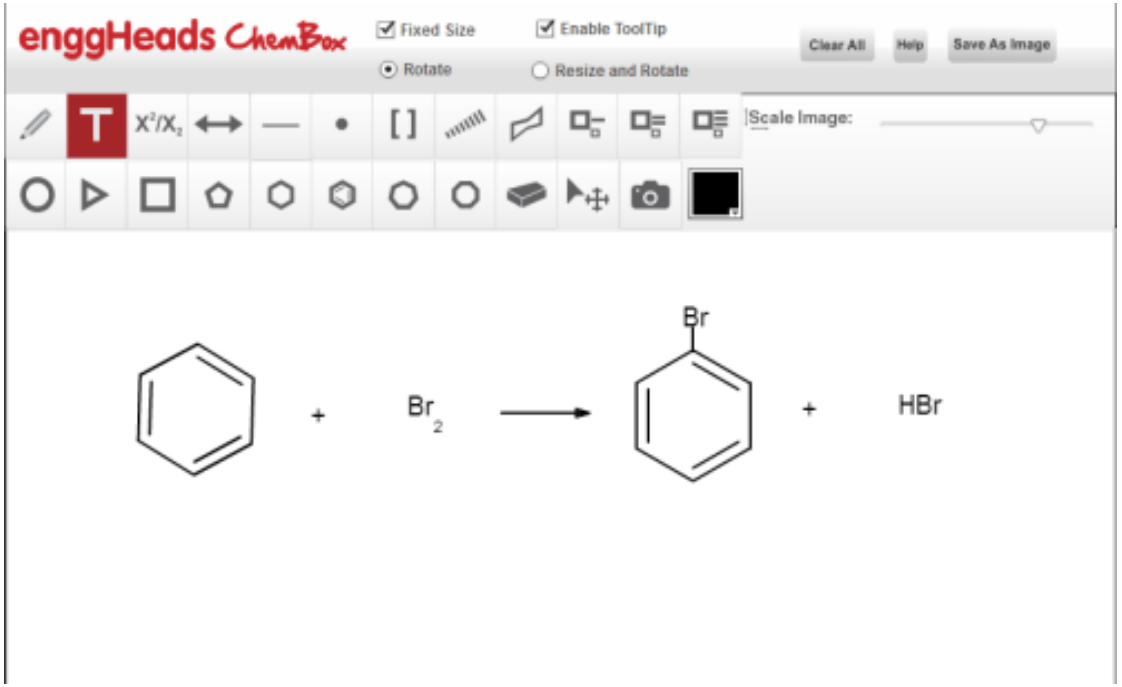
Desenho de estruturas químicas

Online:
JChemPaint



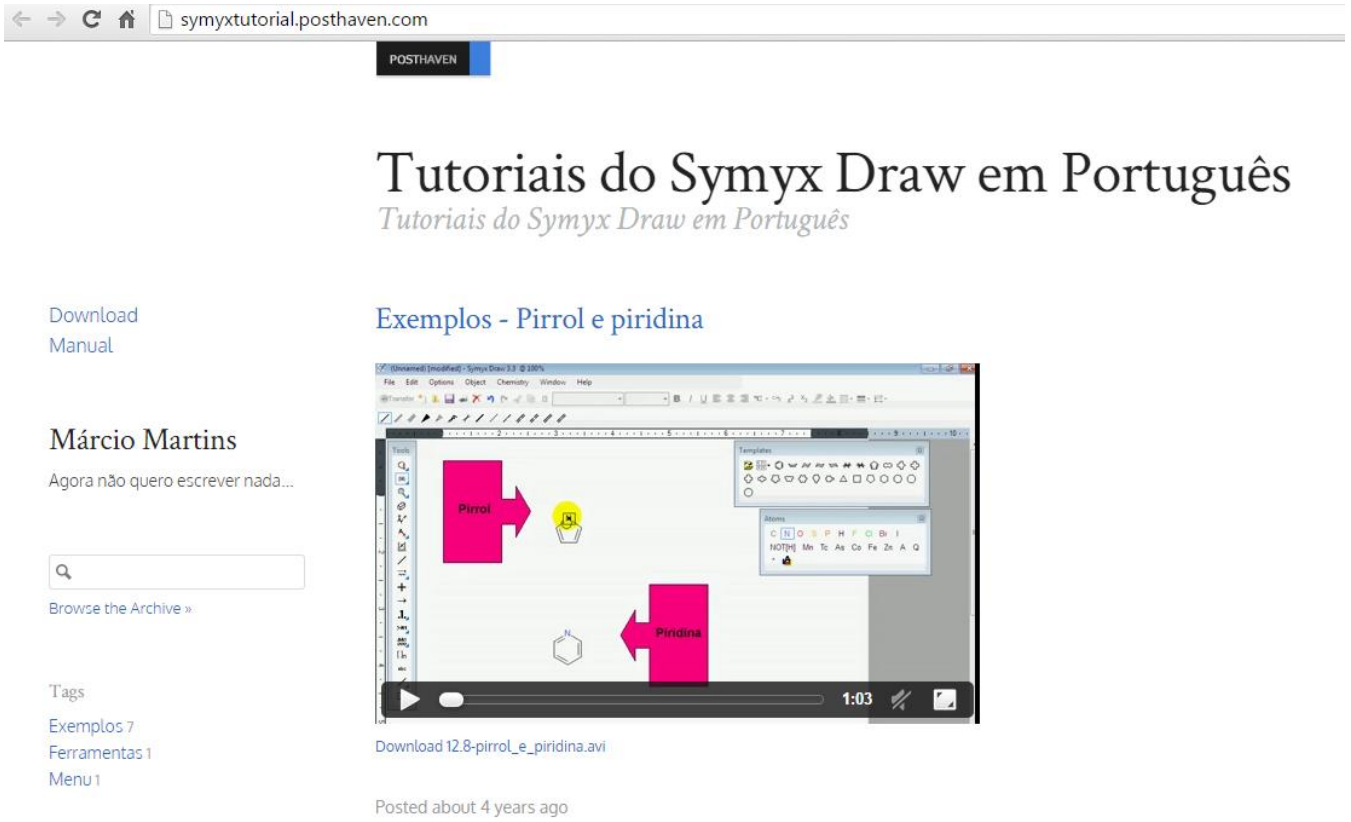
Desenho de estruturas químicas

Online:
[Engg Heads Chembox]



Desenho de estruturas químicas

Offline:
SymyxDraw / Site

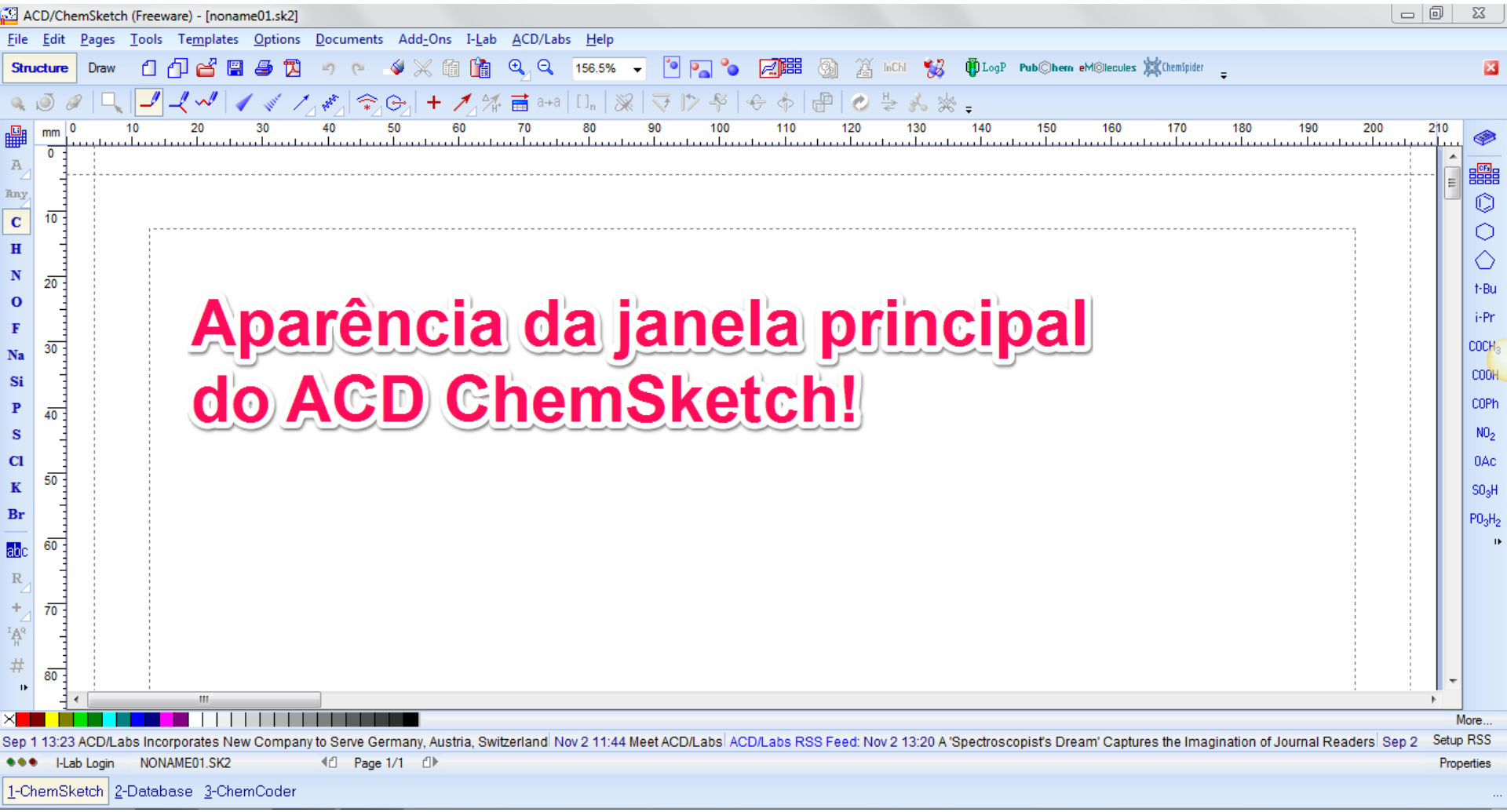


Como pesquisar em inglês?

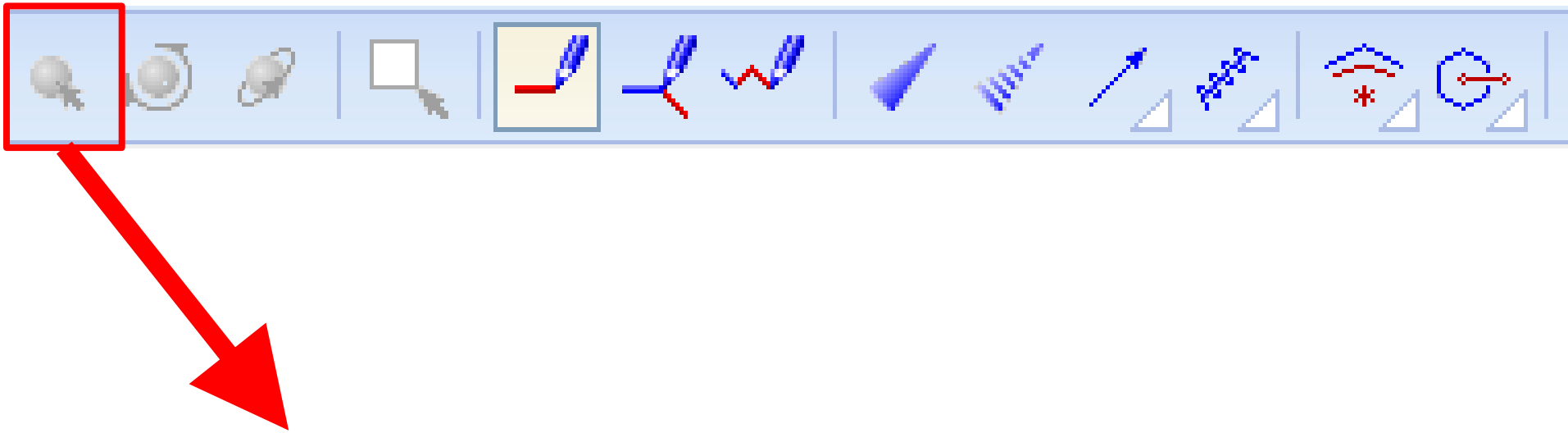
O ChemSketch pode ser baixado de forma gratuita no endereço http://goo.gl/XX9Q8j.

É necessário fazer um cadastro.

Janela principal

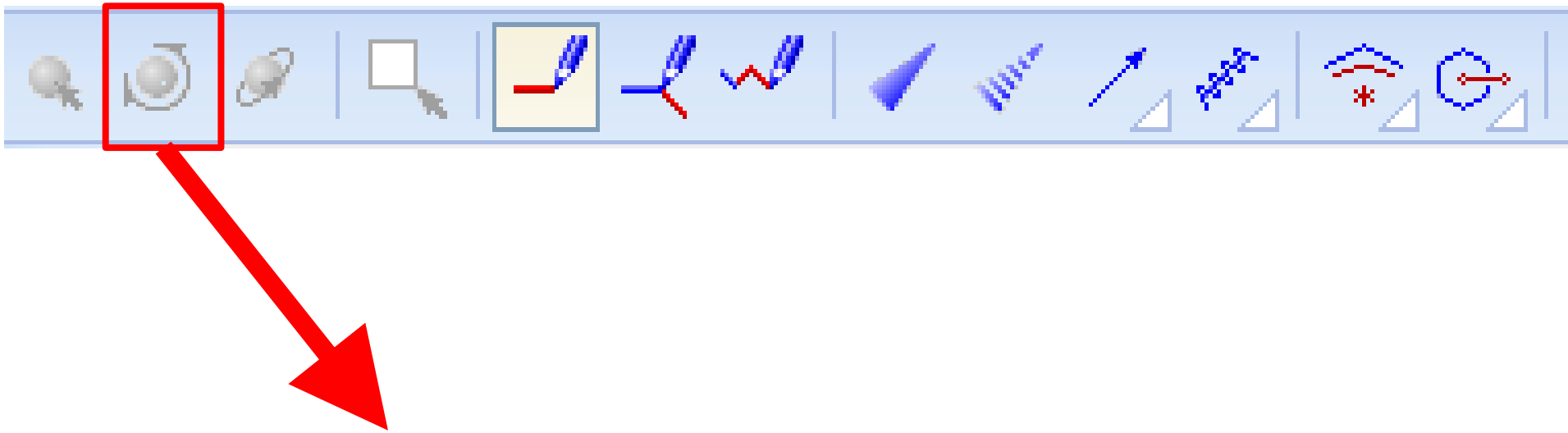


Barra de desenho



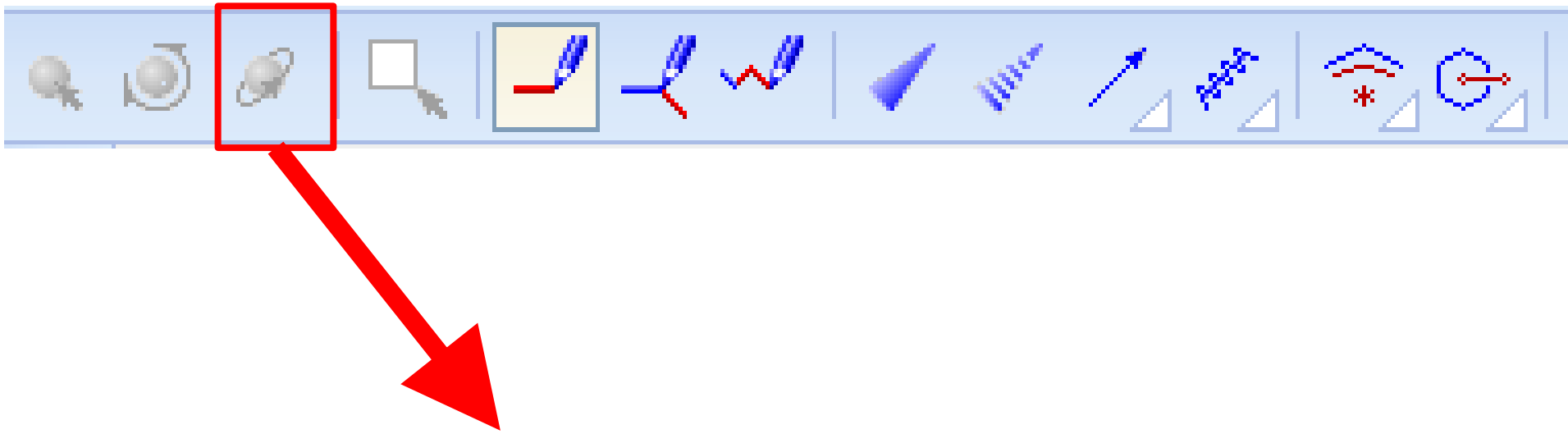
SELECIONAR/MOVER

Barra de desenho



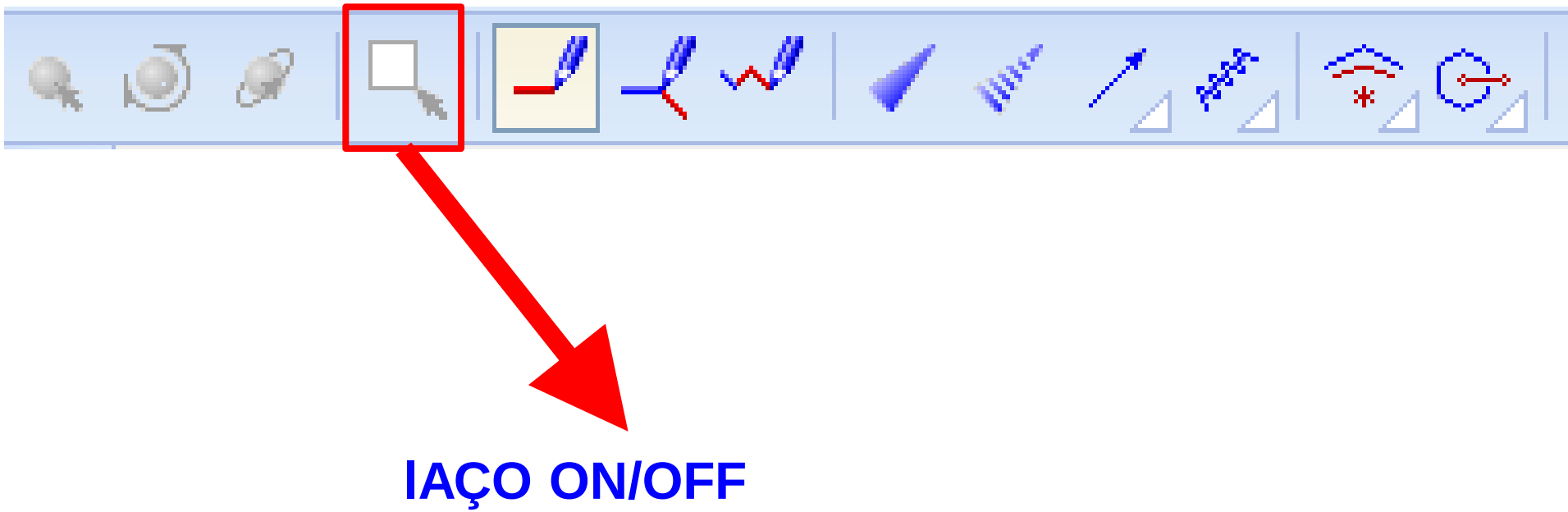
SELECIONAR/MOVER/REDIMENSIONAR

Barra de desenho

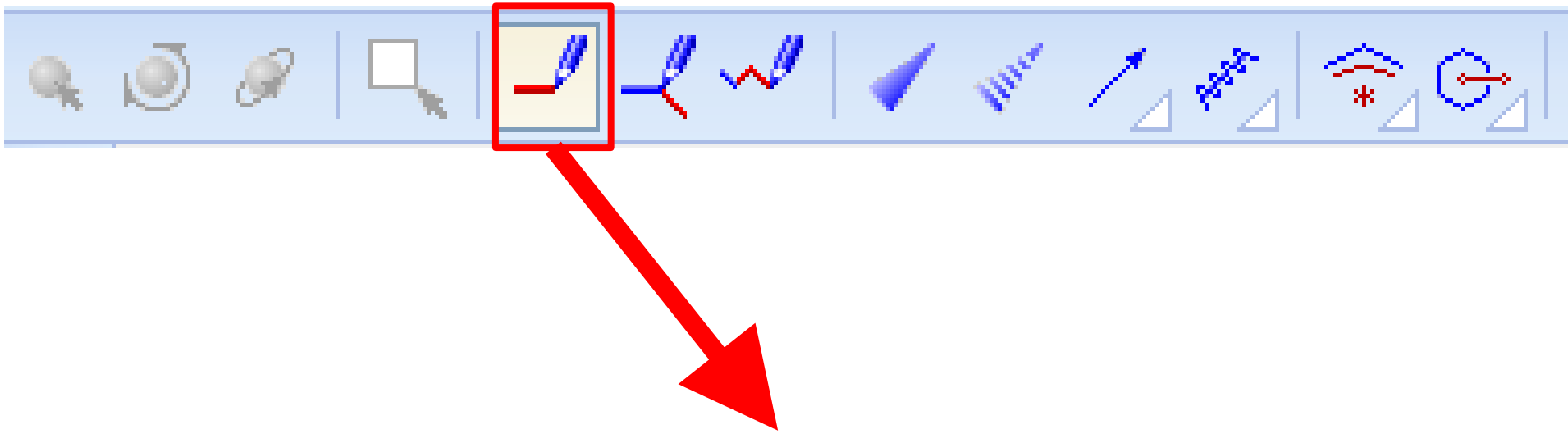


ROTAÇÃO 3D

Barra de desenho

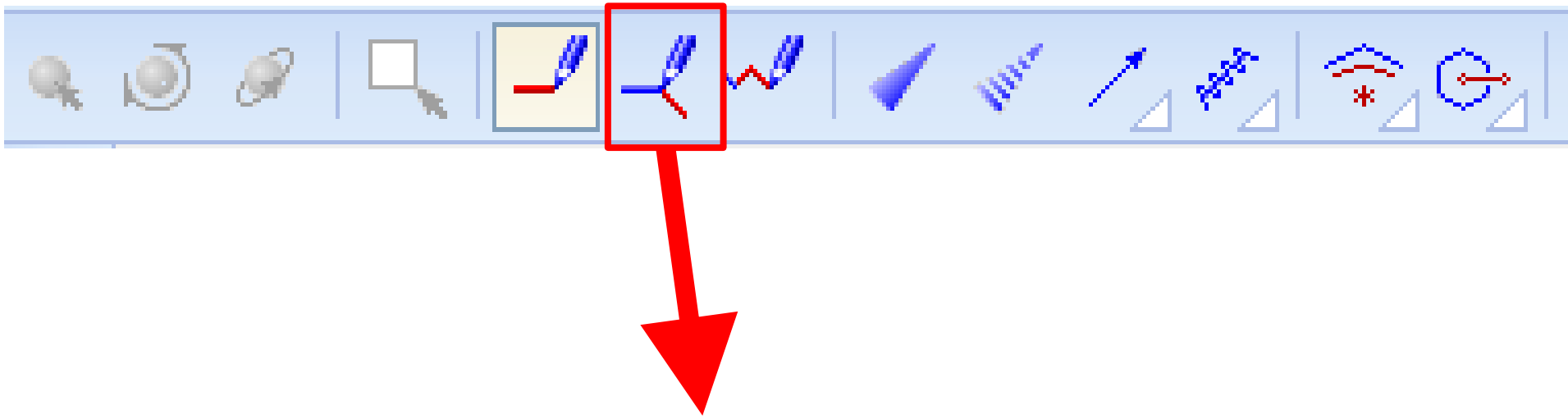


Alternando entre modos de desenho



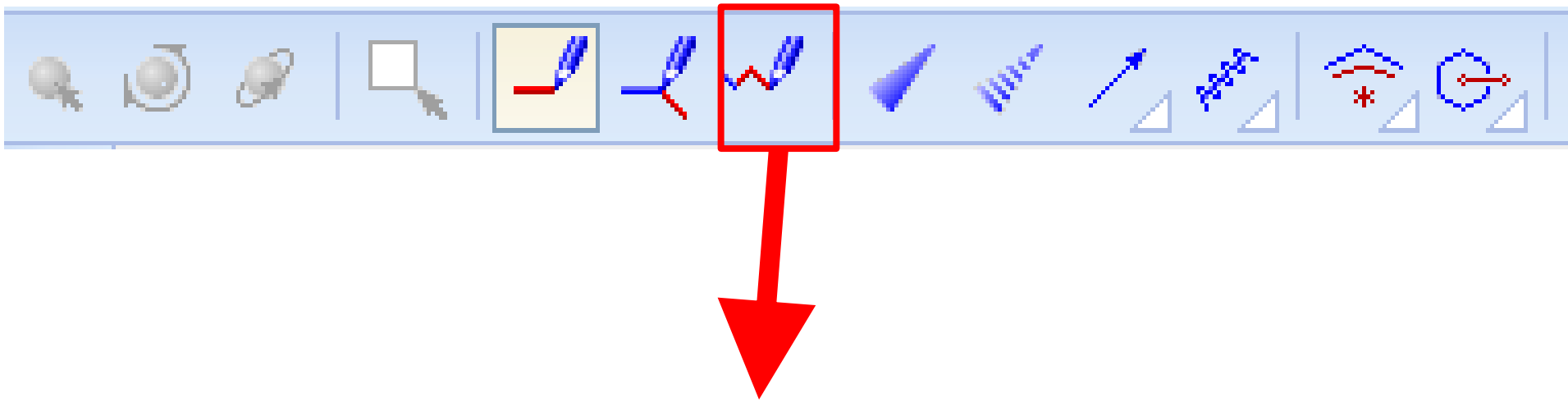
DEsENHAR NORMAL - PRODUZ MOLÉCULAS COM BAIXA PRECISÃO ESTRUTURAL

Alternando entre modos de desenho



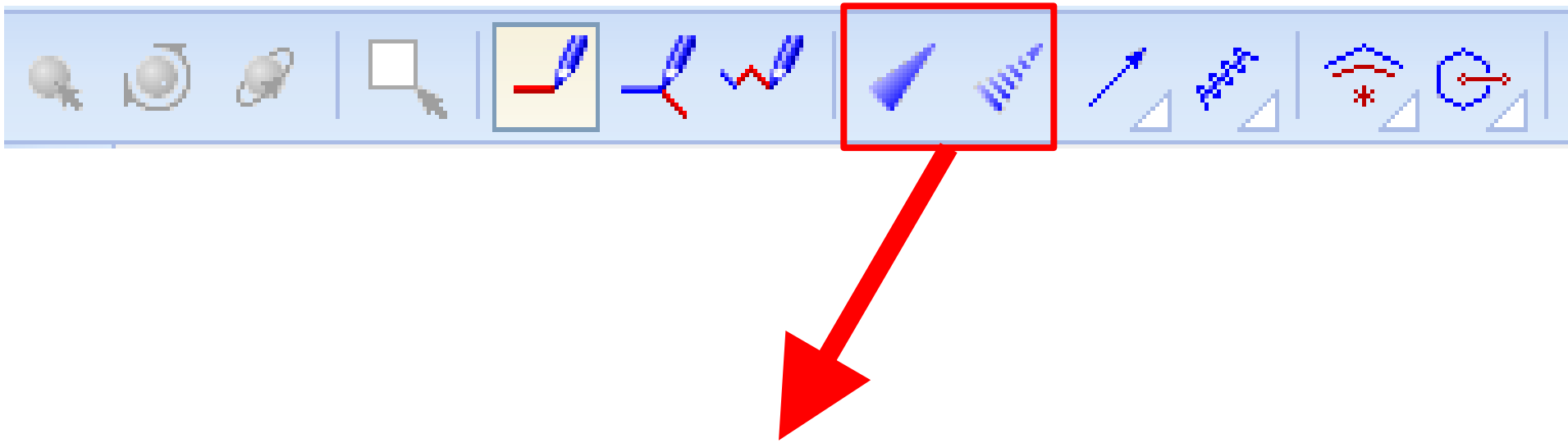
DEsENHAR CONTÍNUO - SIMILAR AO MODO NORMAL

Alternando entre modos de desenho



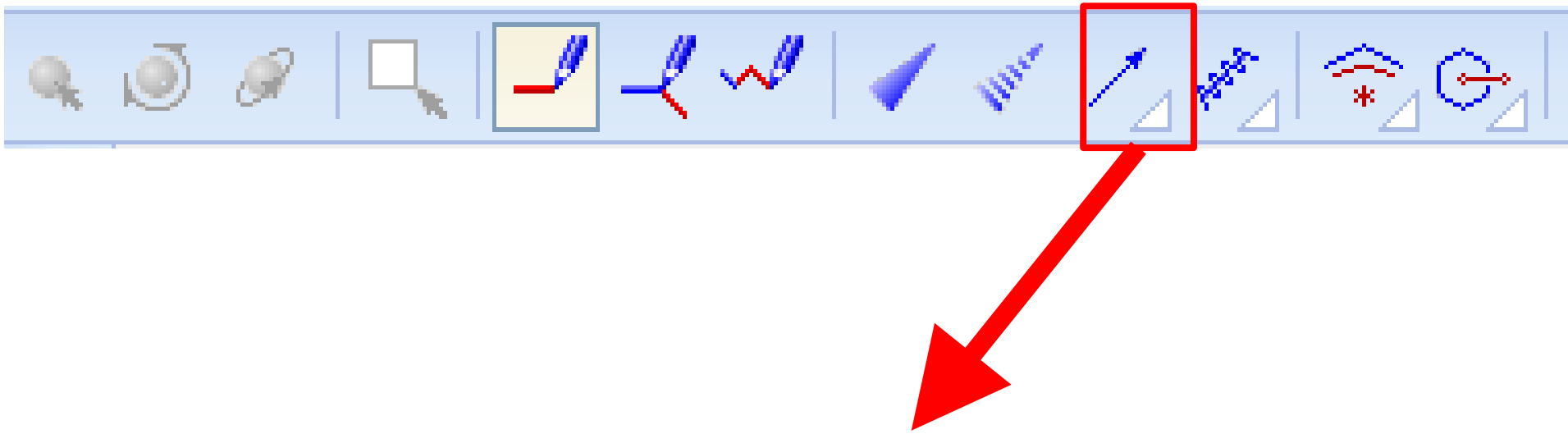
DEsENHAR CADEIAS -
cLIQUE E ARRASTE O MOUSE E UMA CADEIA CARBÔNICA SURGIRÁ COM O TAMANHO QUE VOCÊ QUISER.

Tipos de ligações químicas



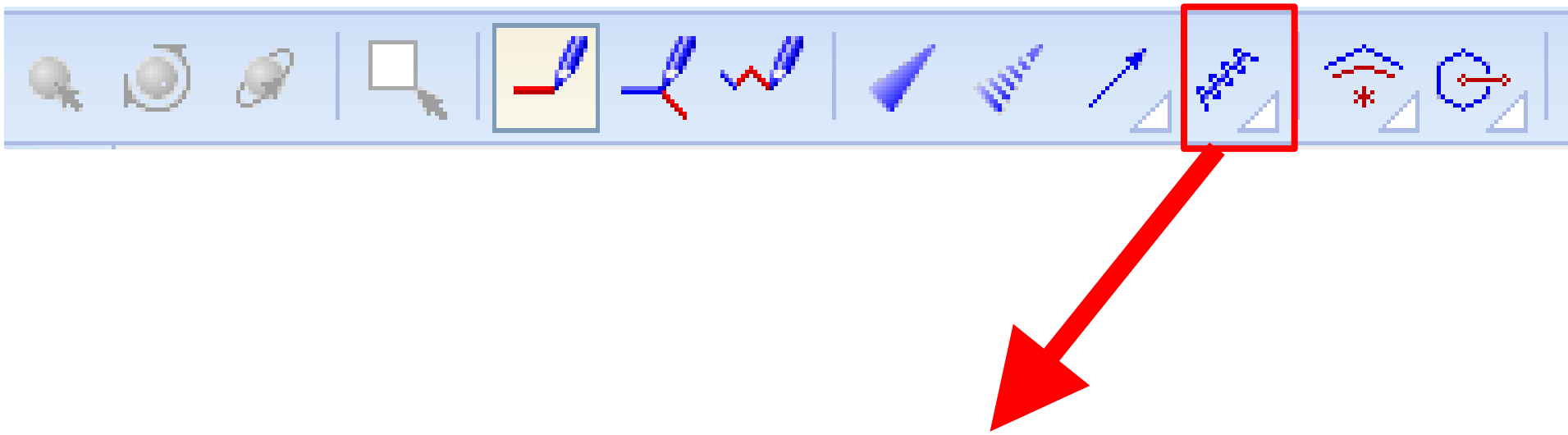
LIGAÇÕES ESTEREOQUÍMICAS

Tipos de ligações químicas



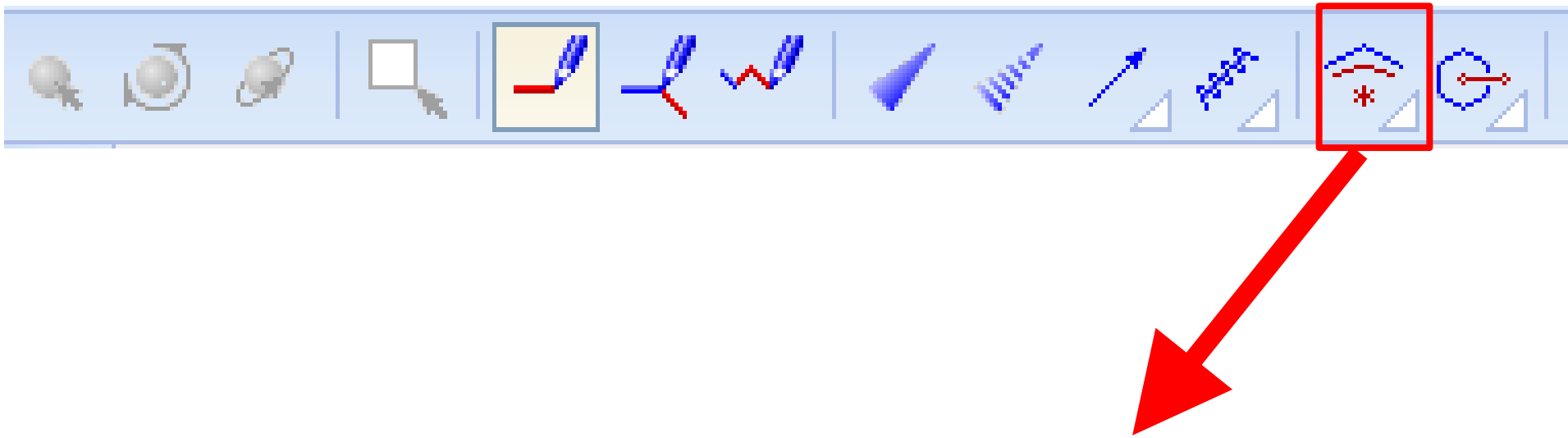
vÁRIOS TIPOS DE LIGAÇÕES COORDENADAS

Tipos de ligações químicas



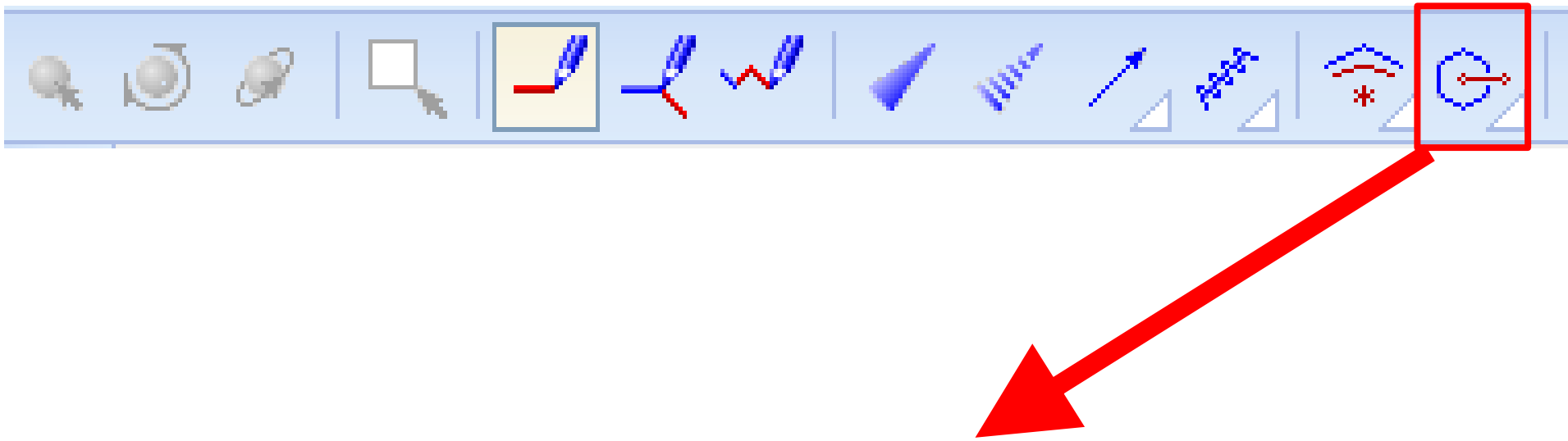
LIGAÇÕES ESTÉREO INDEFINIDAS

Tipos de ligações químicas



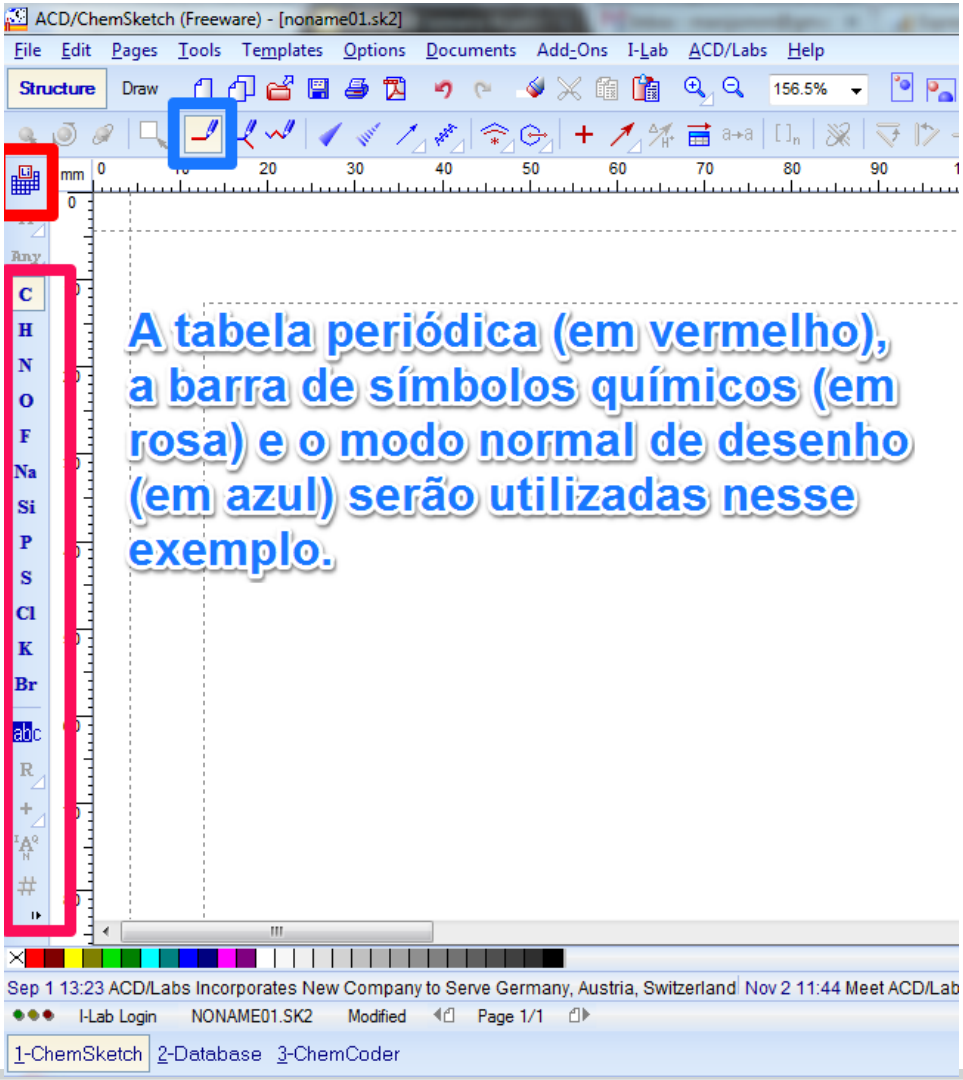
LIGAÇÕES DESLOCALIZADAS

Tipos de ligações químicas

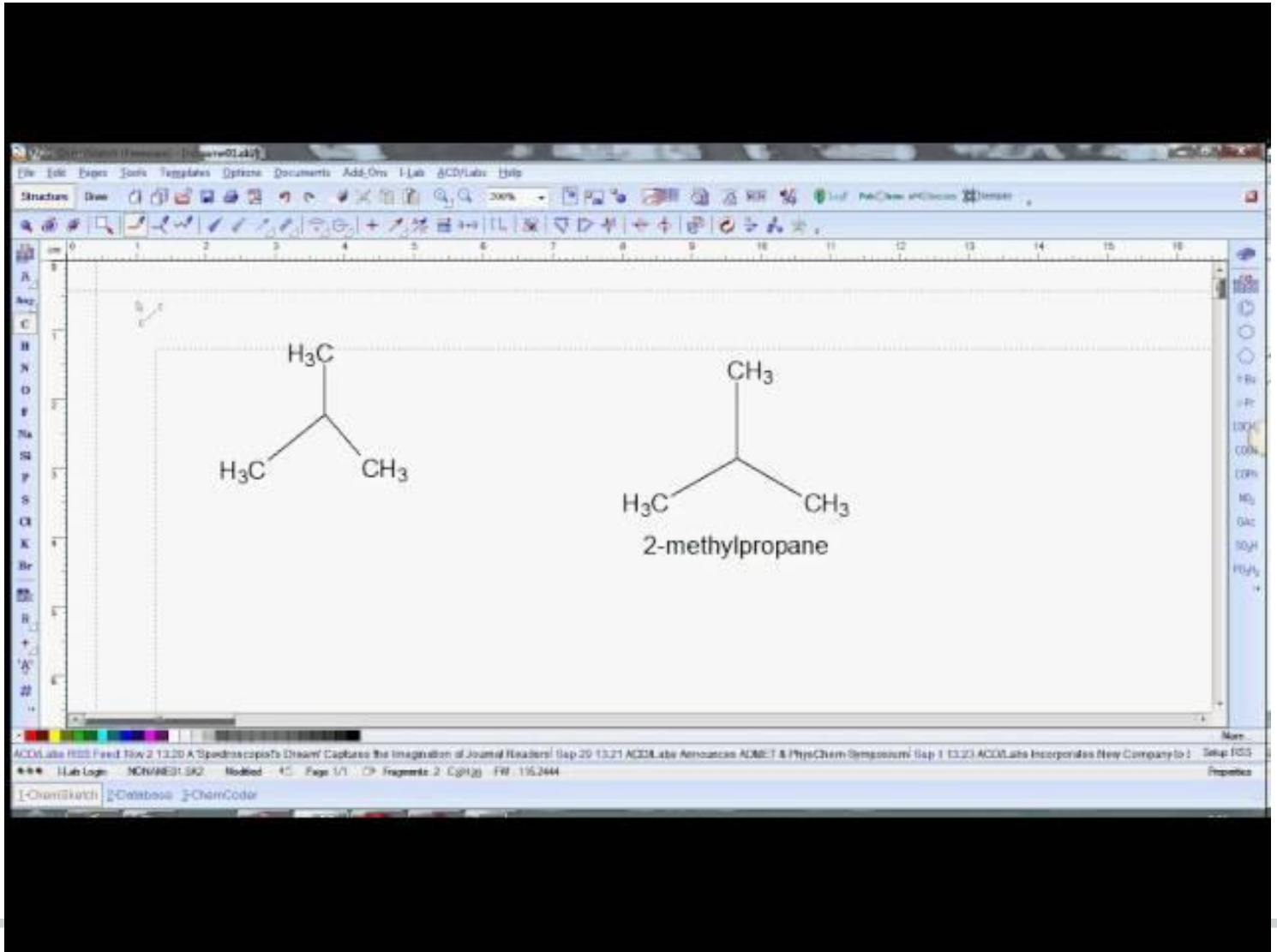


LIGAÇÕES DE MARKUSH
LIGANTES EM POSIÇÕES INDEFINIDAS

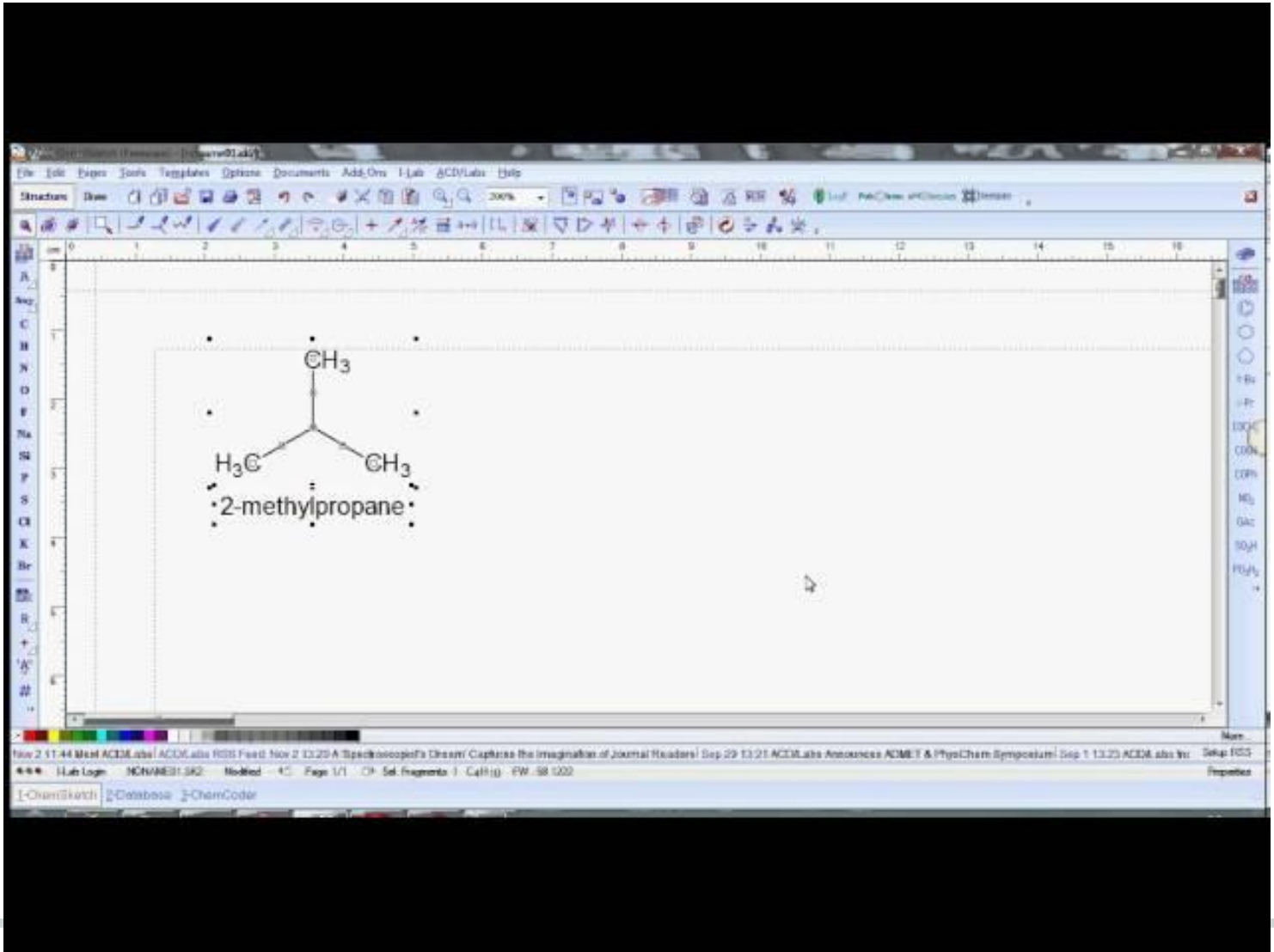
1º exemplo: desenho modo normal



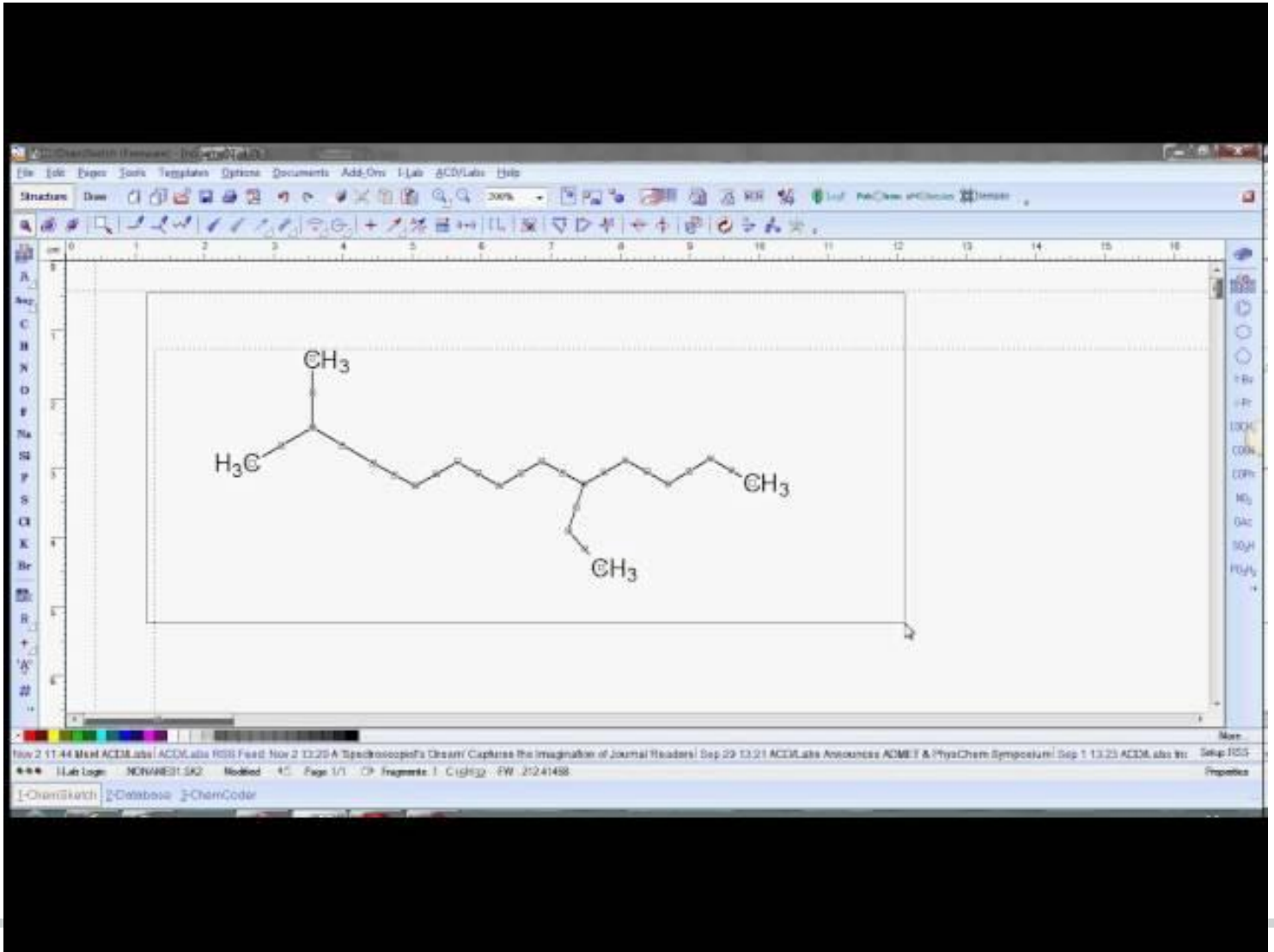
1.desenhando o 2-metilpropano



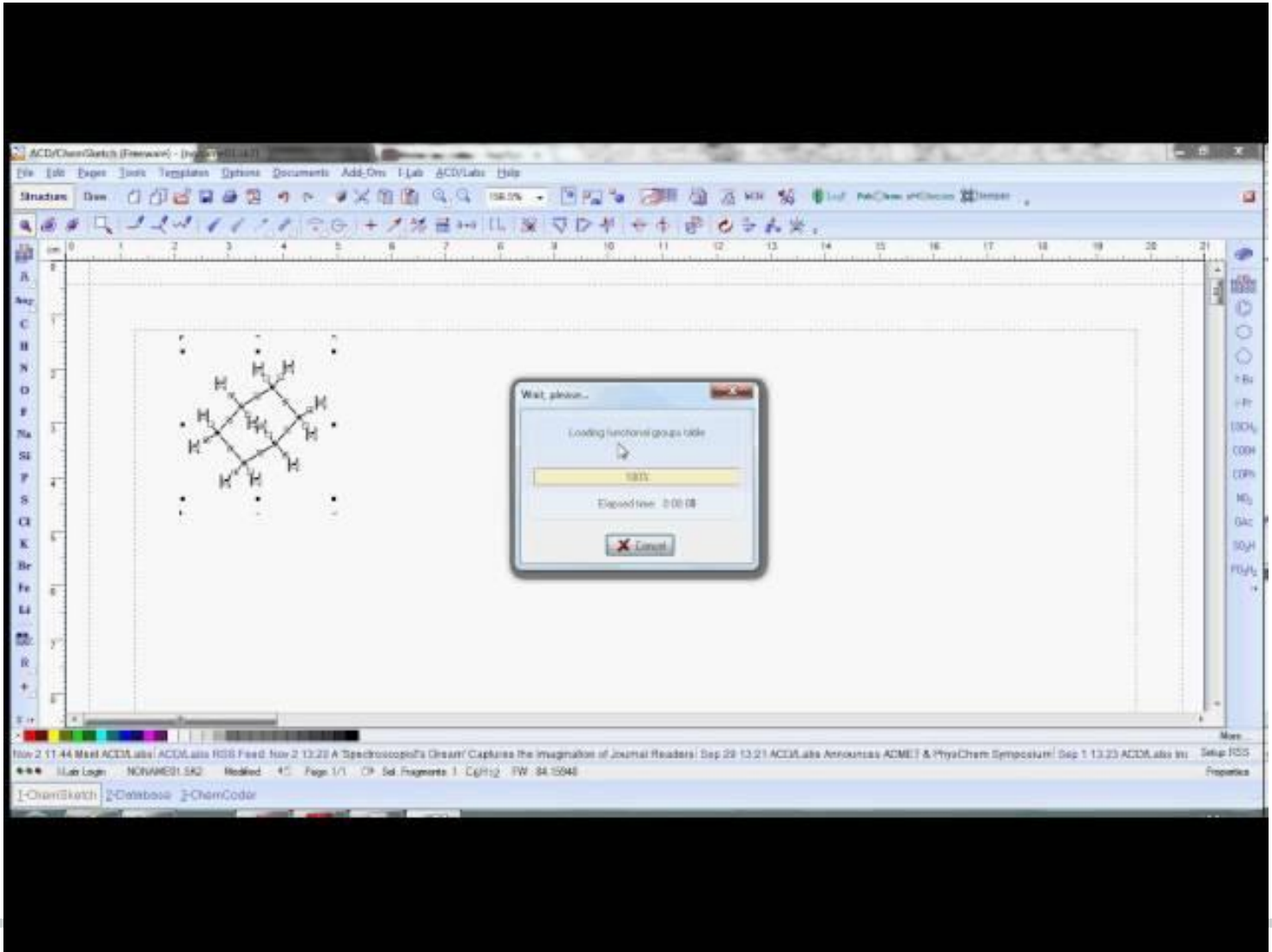
2-obtendo info sobre o 2- metilpropano



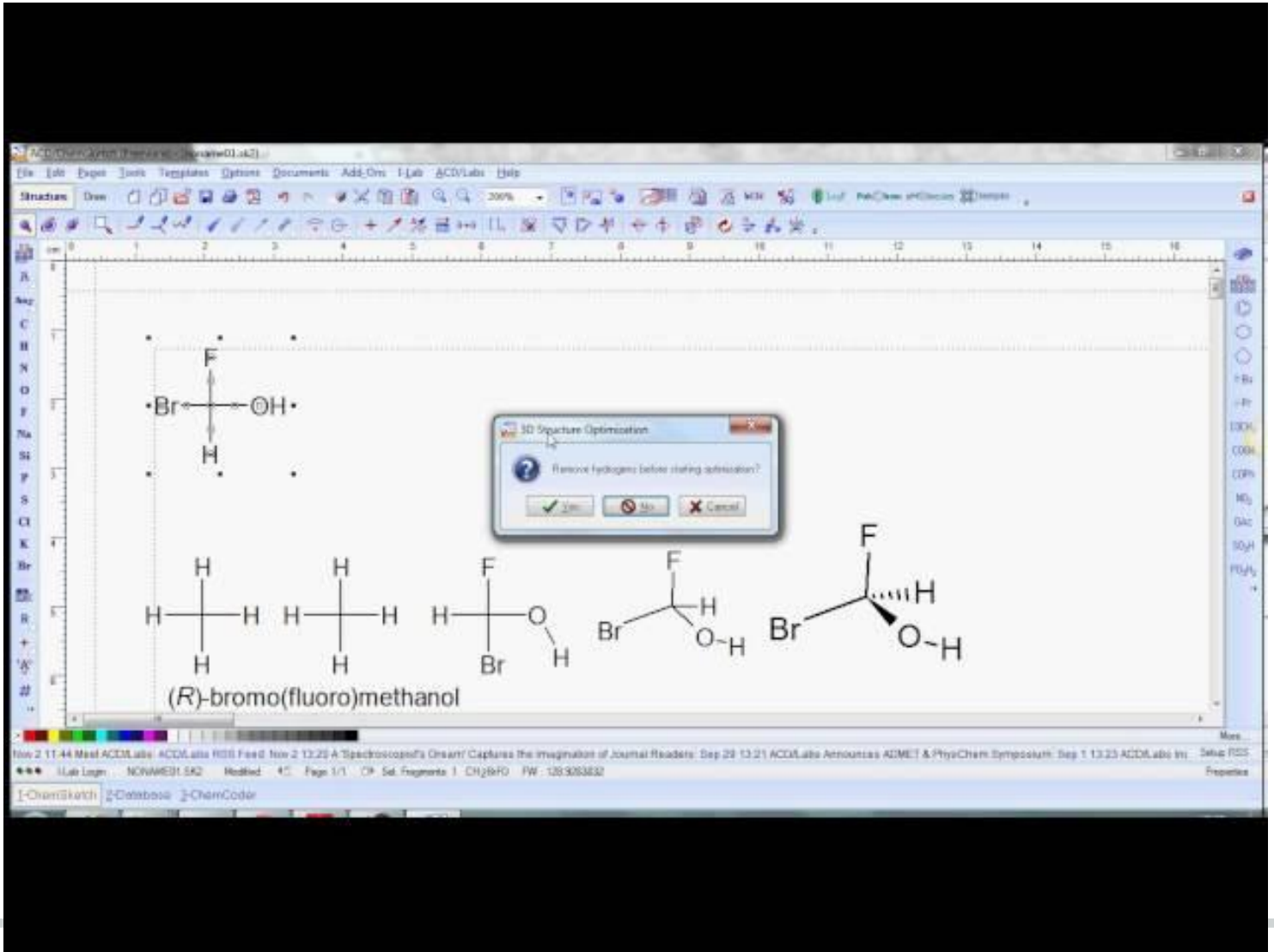
3.desenhando no modo cadeias



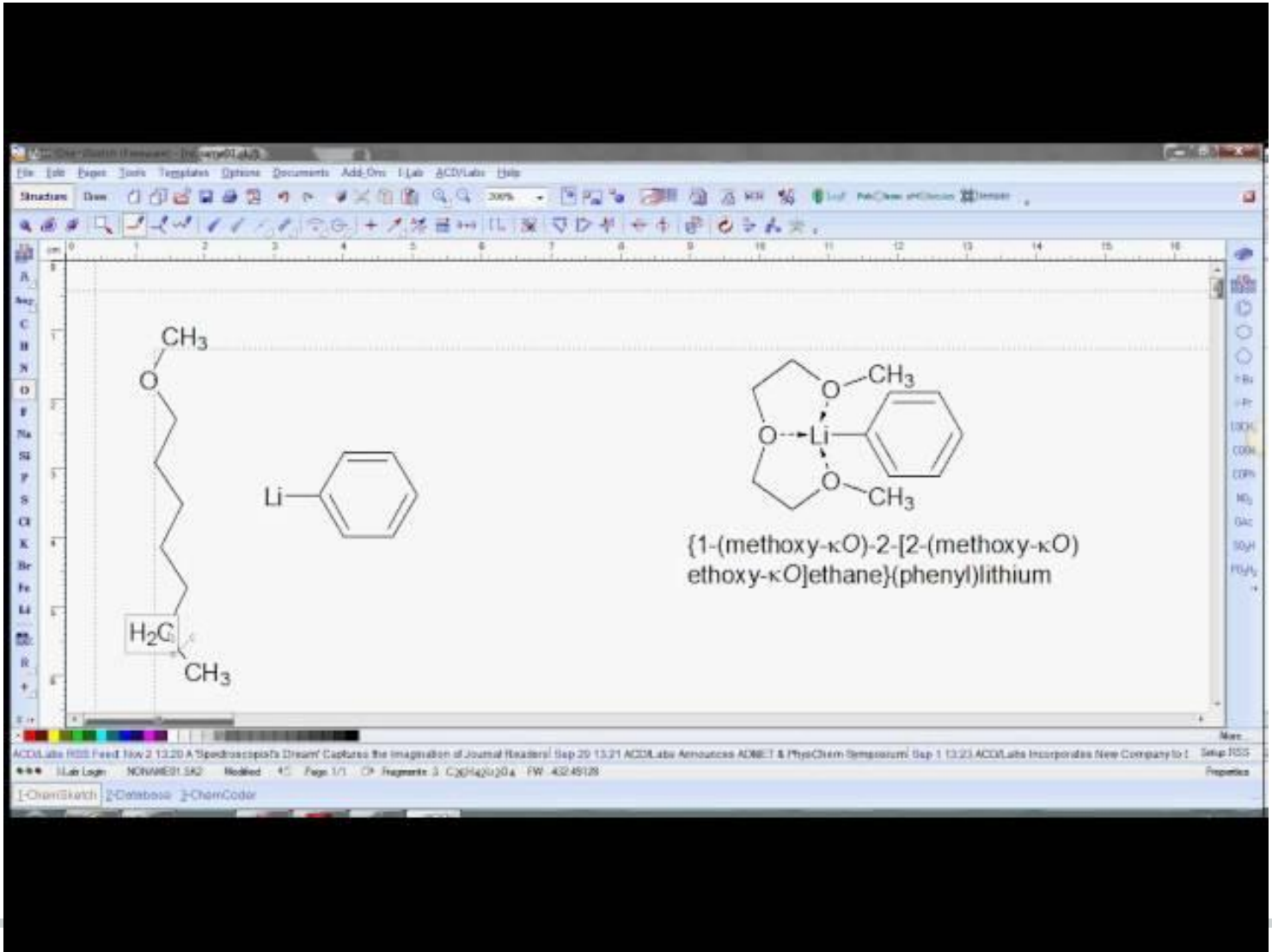
4.desenhando ciclohexano (modo contínuo)



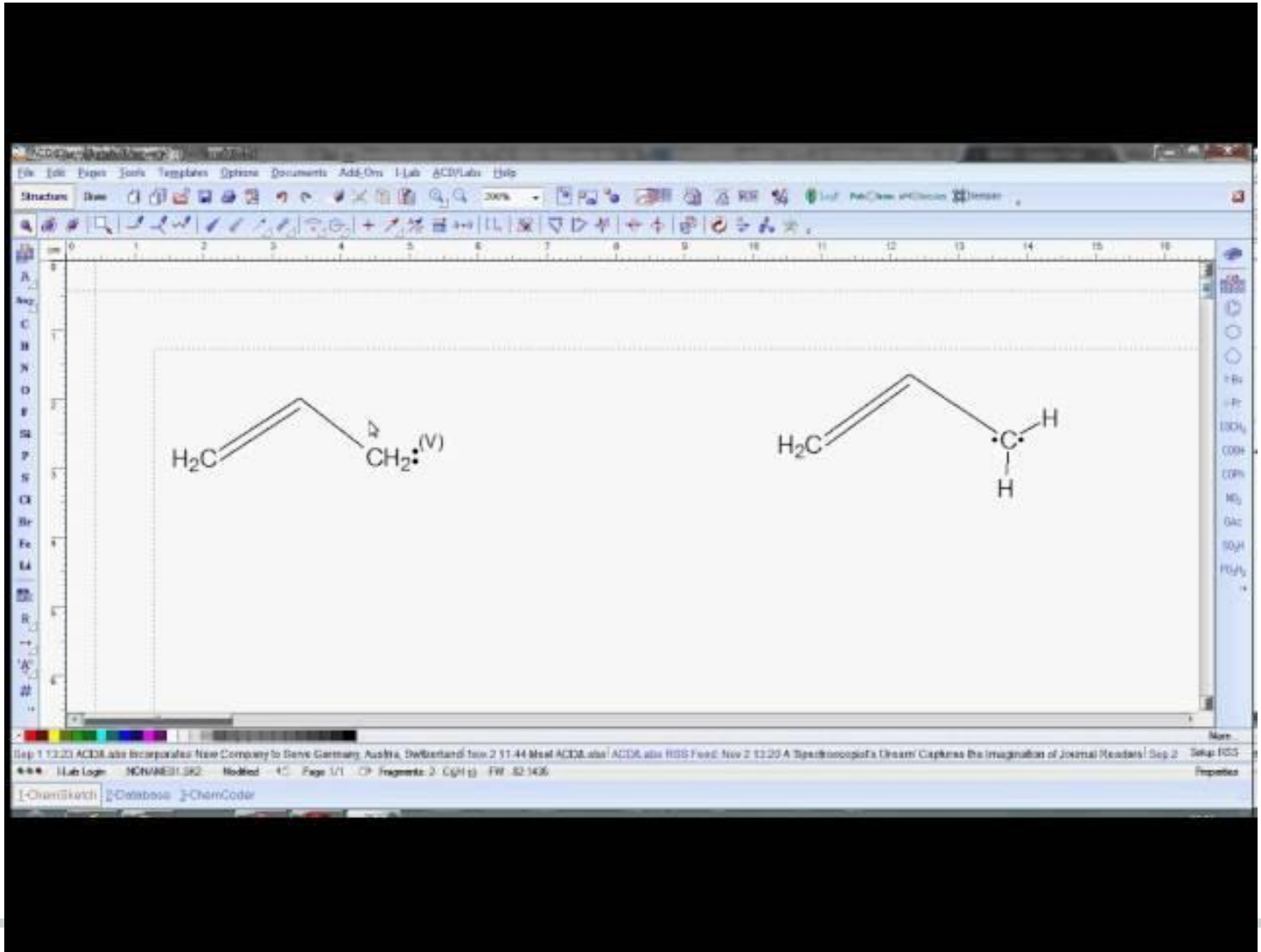
5.desenhando isômeros



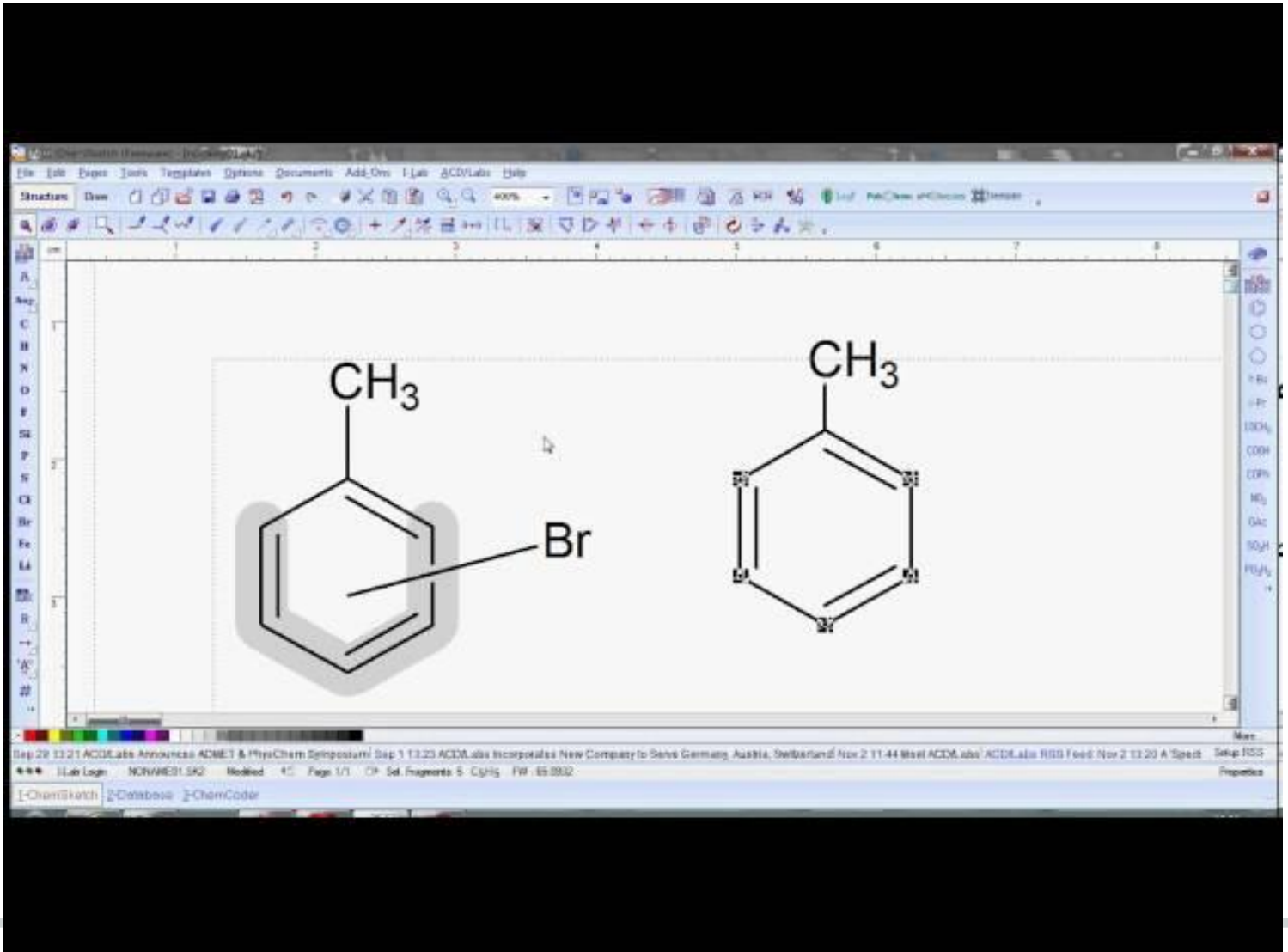
6.ligações coordenadas



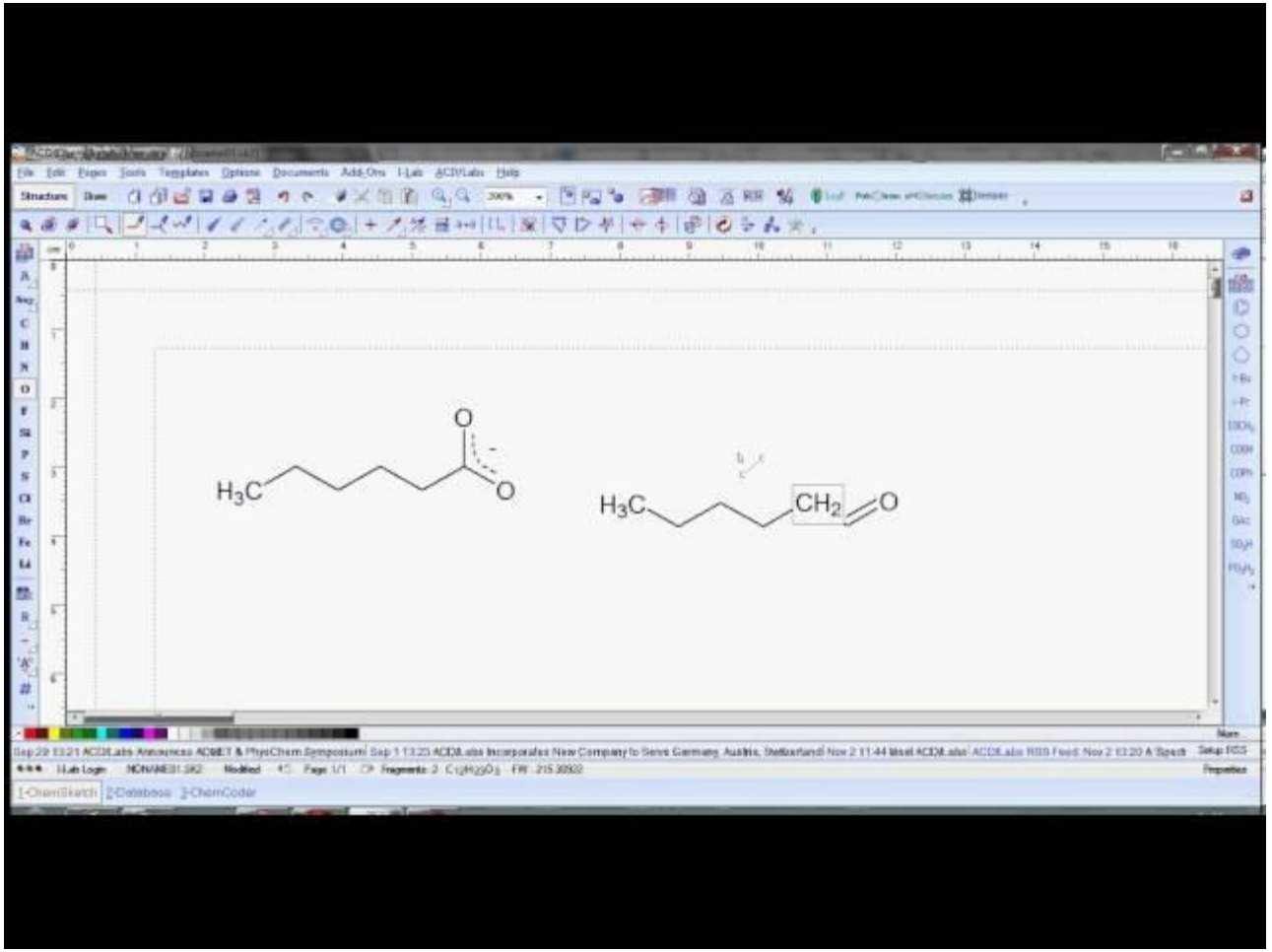
7.desenhando um radical alila



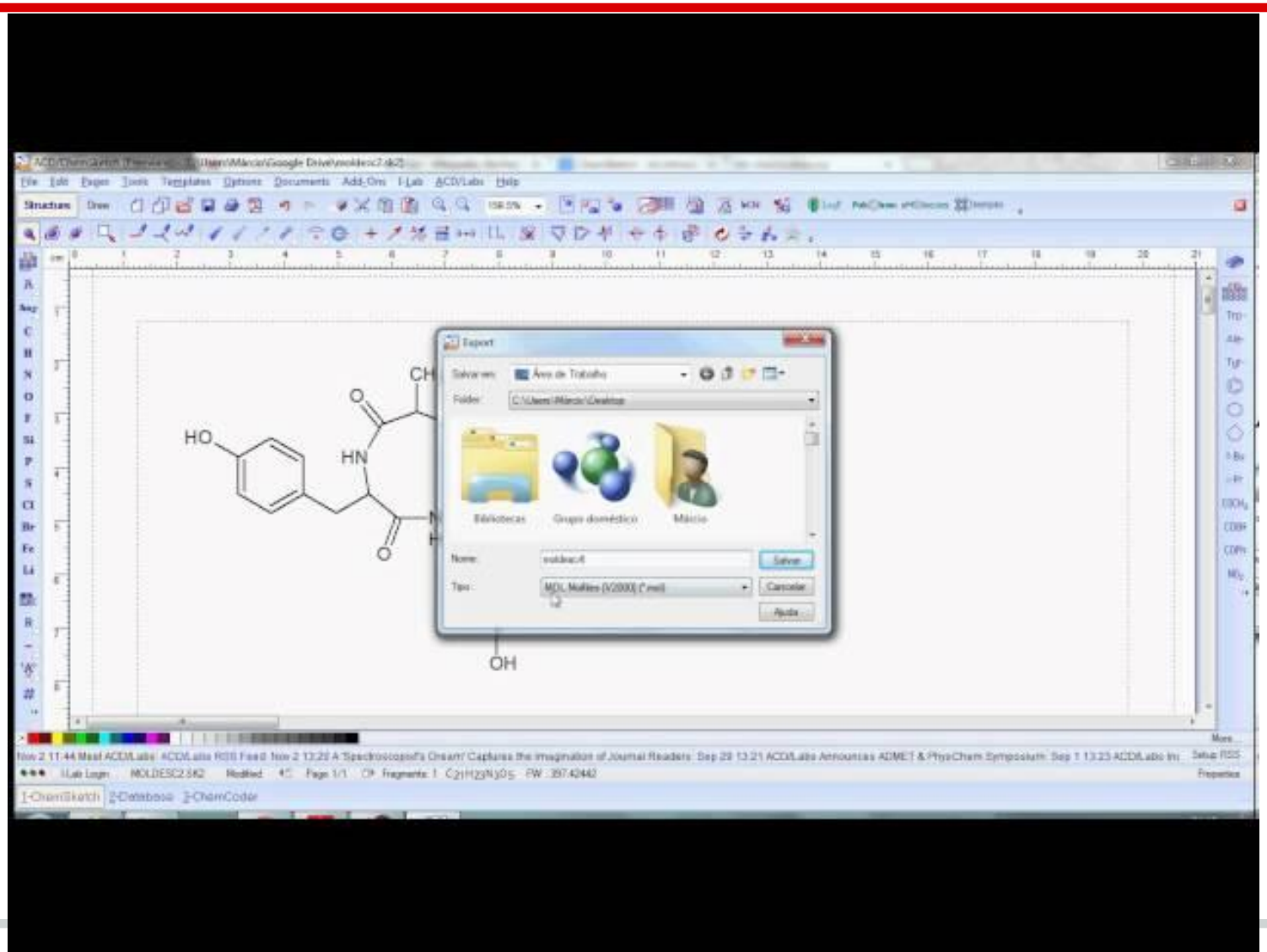
8.ligações de Markush



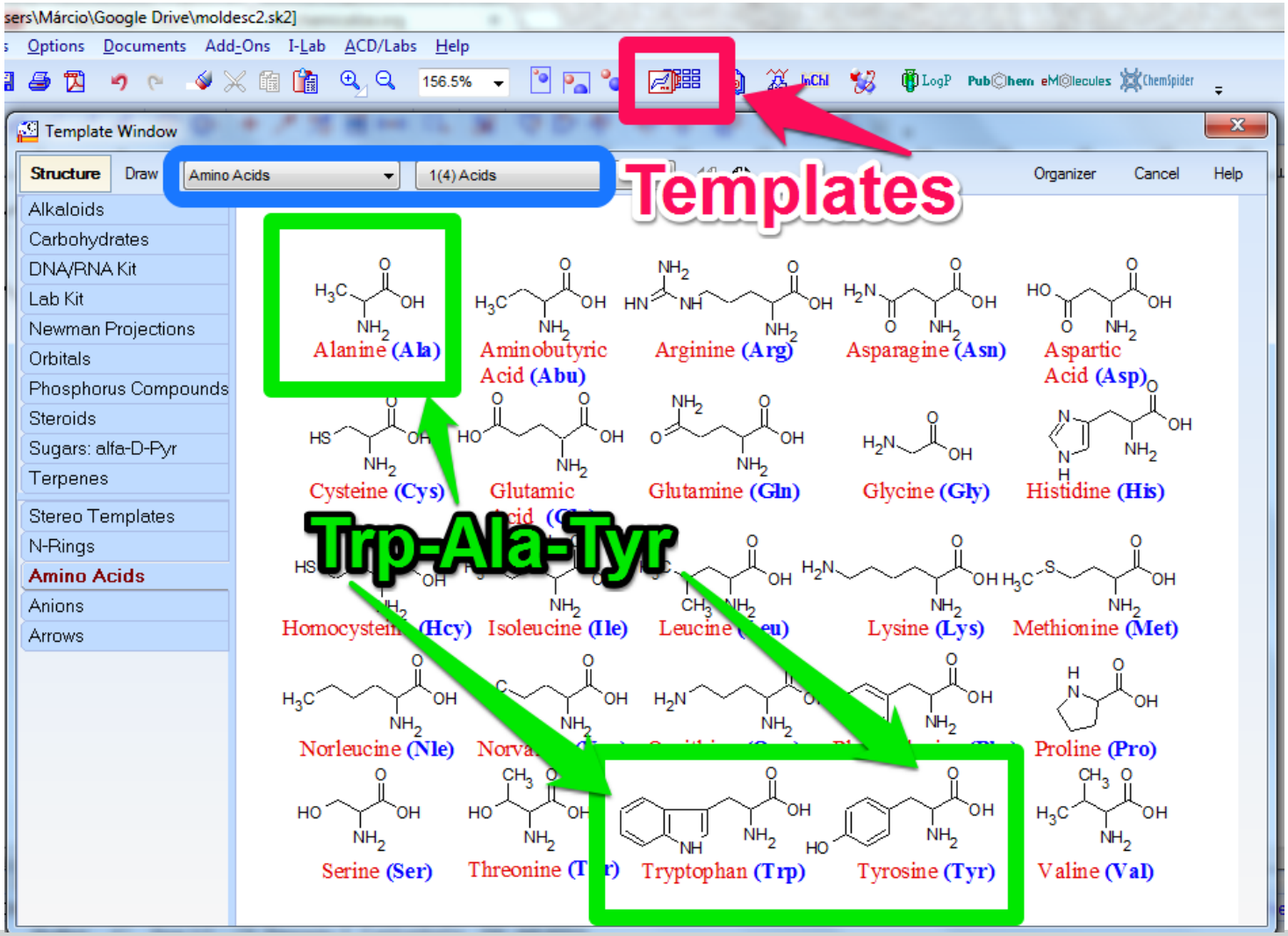
9.ligações deslocalizadas - íon hexanoato



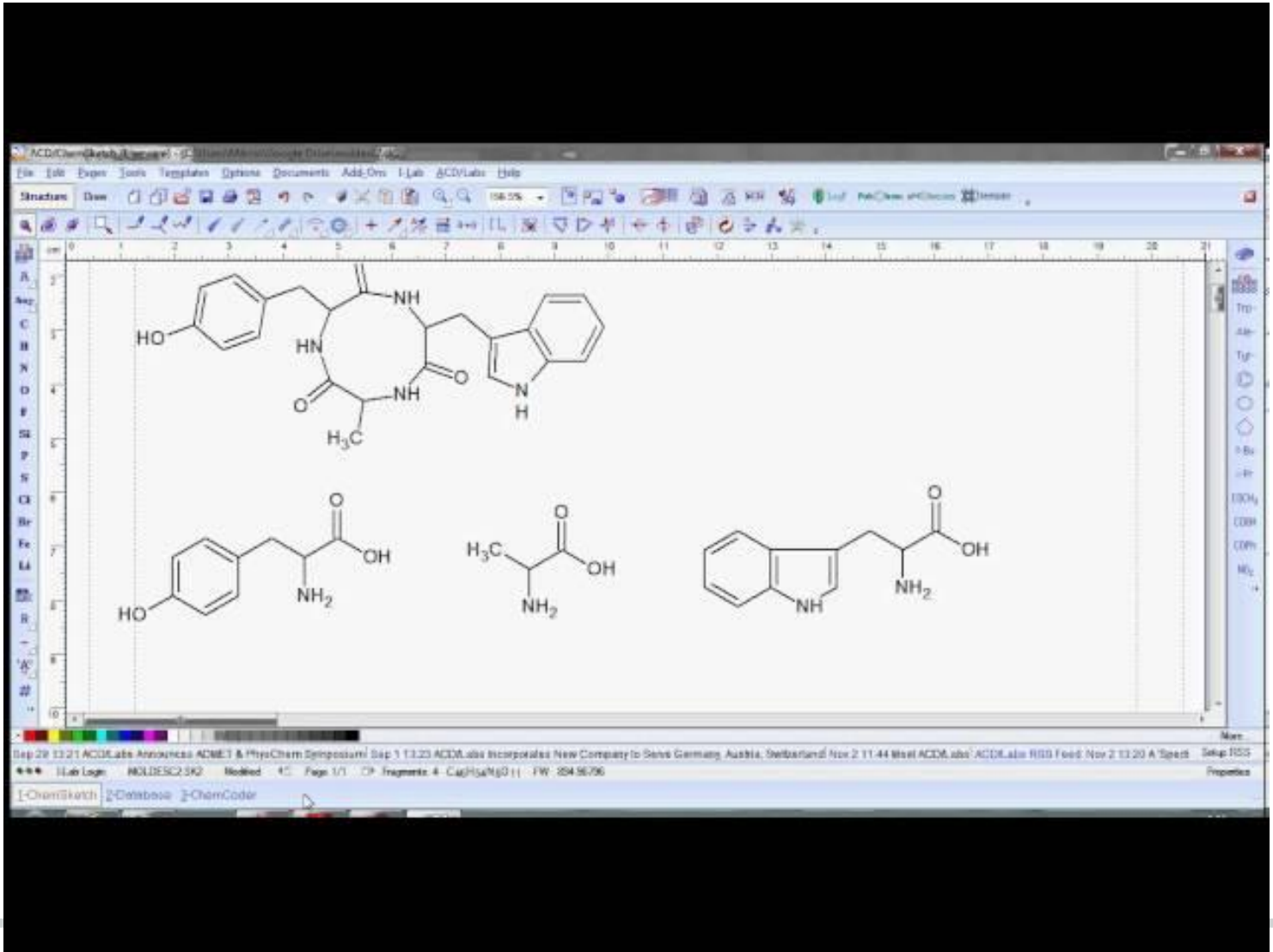
10.desenhando um peptídeo



Utilizando templates



11.desenhando peptídeo a partir de templates



Exercitando técnicas de pesquisa online com o auxílio do ChemSketch

Vamos apresentar algumas moléculas encontradas na internet e vocês terão que desenhá-las.

Com o desenho pronto, vamos salvar e pesquisar dados físico-químicos online.

Molécula misteriosa 1

Que molécula é essa?

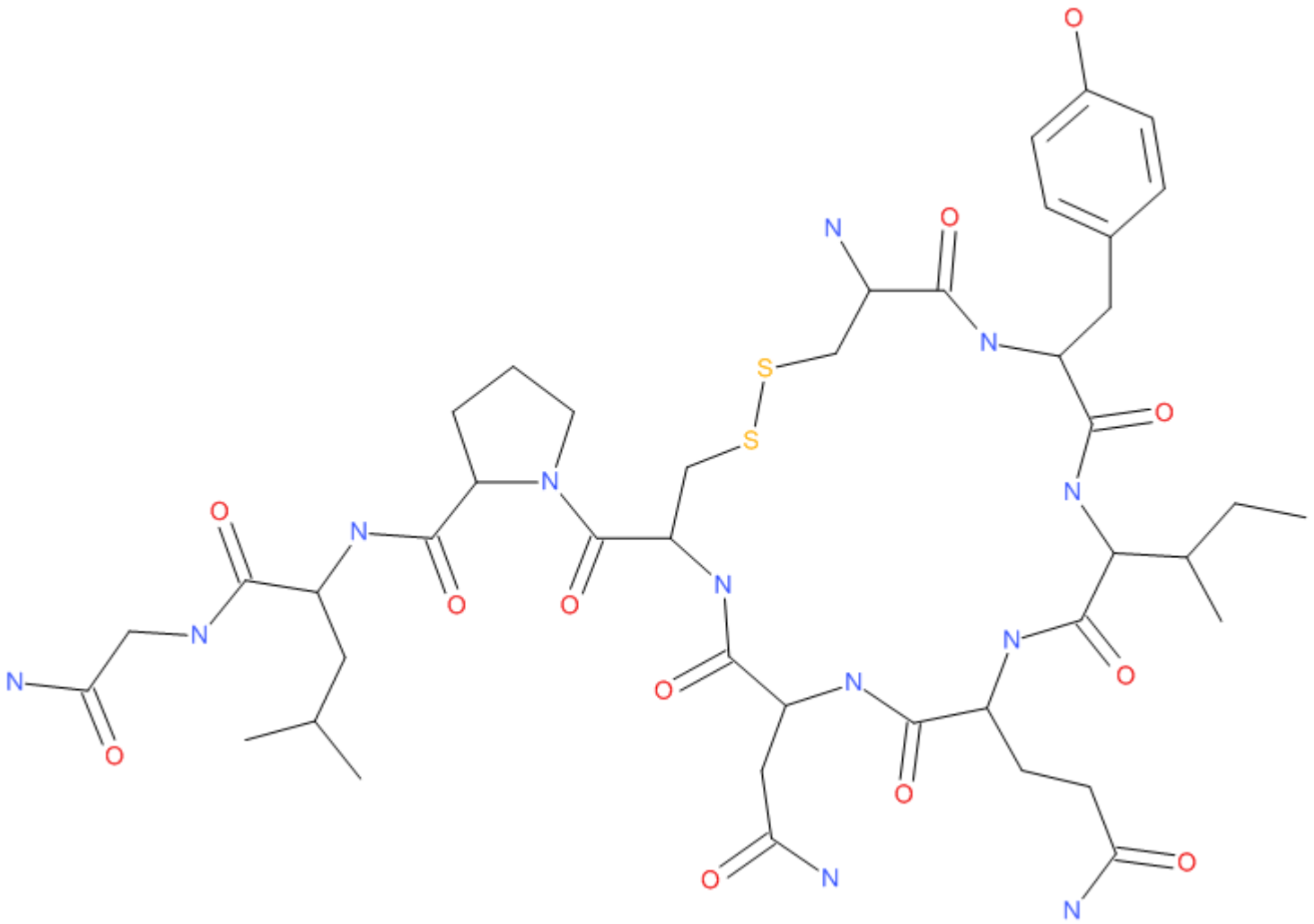
Dica

Desenhe a molécula no ChemSketch e salve-a em formato .MOL

Se você quiser facilitar as coisas, o link abaixo contém a estrutura já desenhada.

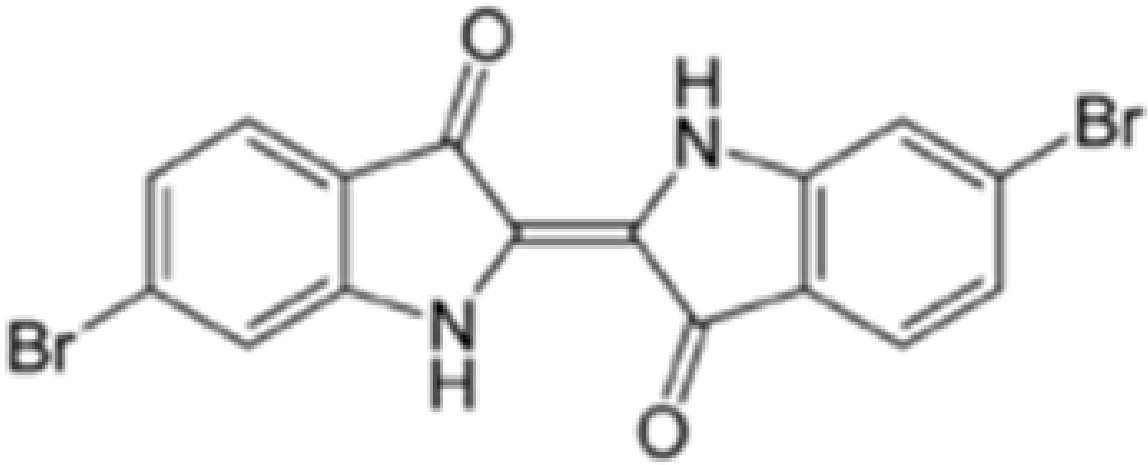
http://goo.gl/4Twcw6 (formato mol)
http://goo.gl/nxapqo (formato ChemSketch)

Molécula misteriosa 1



Molécula misteriosa 2

Que molécula é essa?

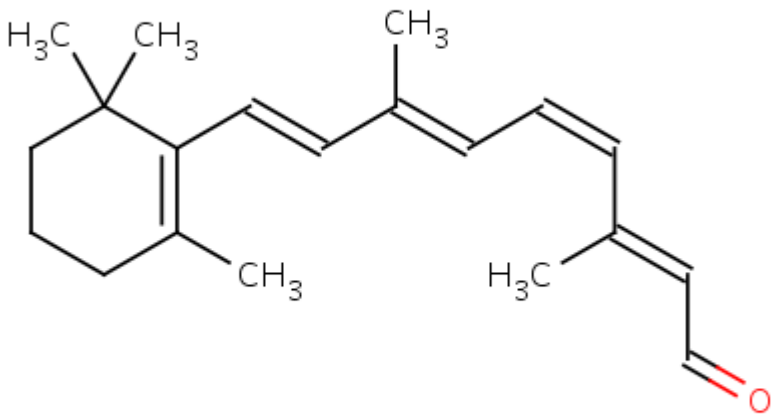


Molécula misteriosa 3

Que molécula é essa?

Molécula misteriosa 4

Que molécula é essa?



RESPONDA

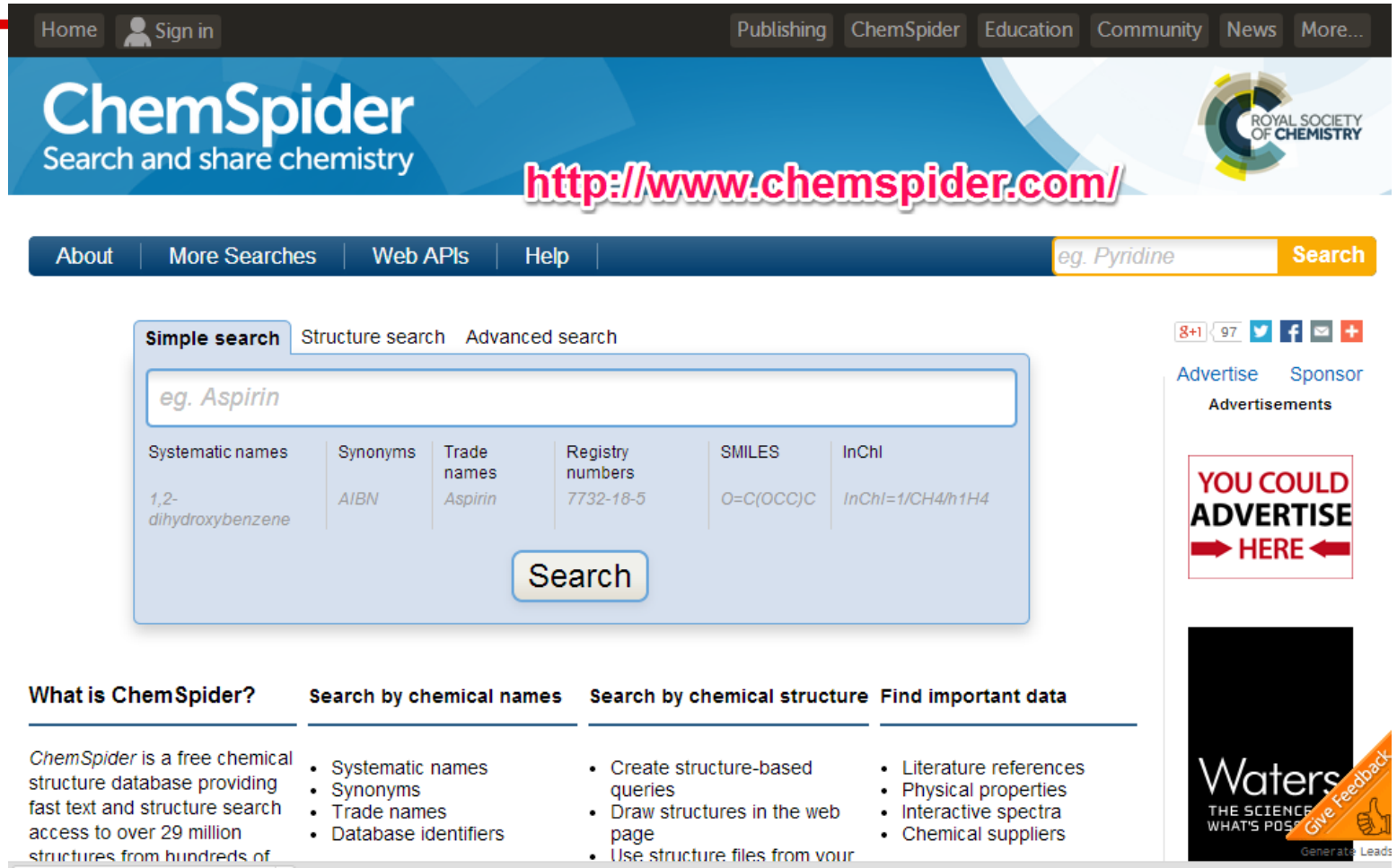
1) Qual das moléculas misteriosas é a preferida do Bob Marley?

2) Qual das moléculas misteriosas é chamada “droga do amor”?

3) Qual é a molécula da visão?

4) Qual é a molécula preferida de reis e imperadores?

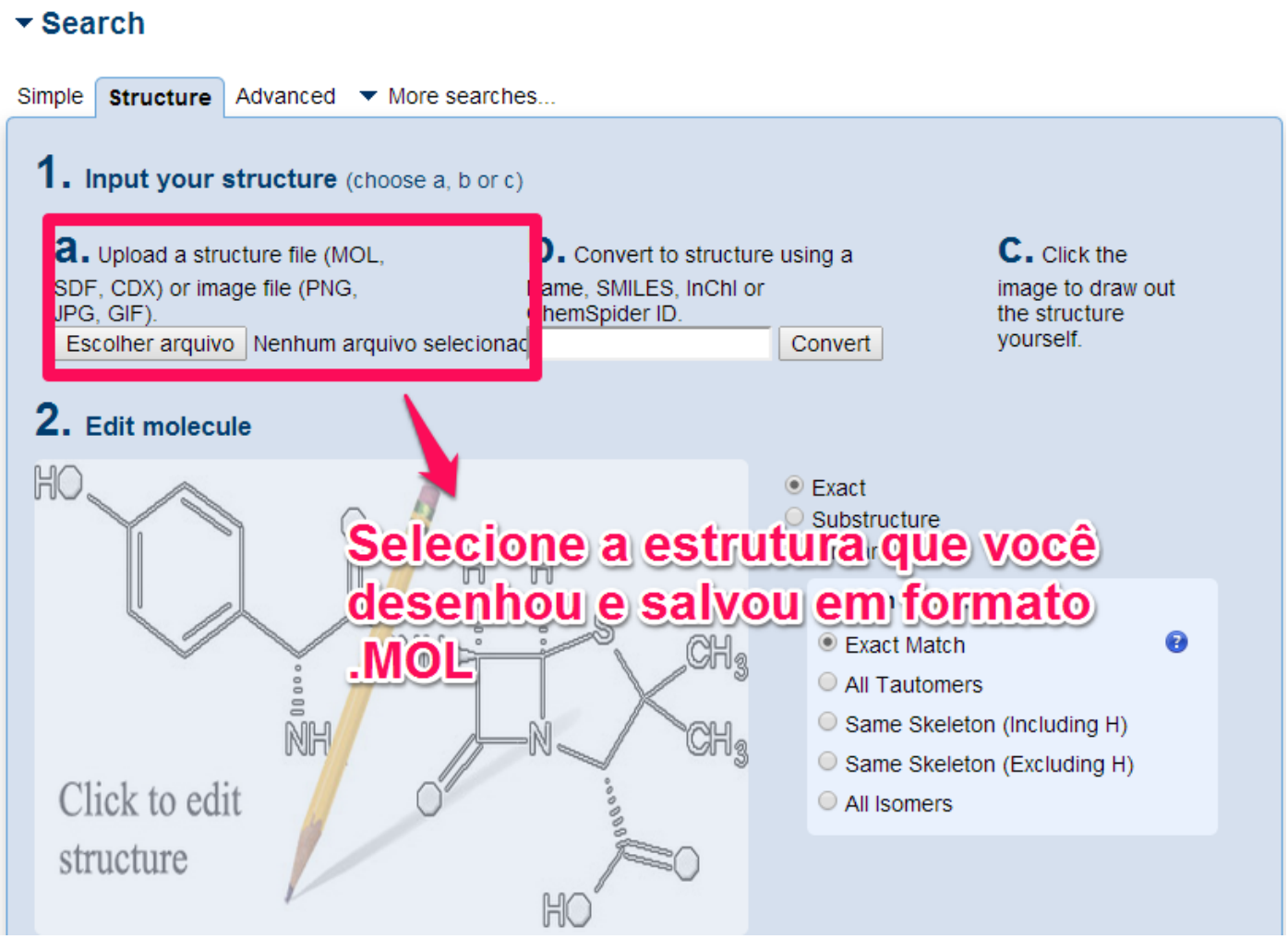
Como fazer para descobrir o nome?



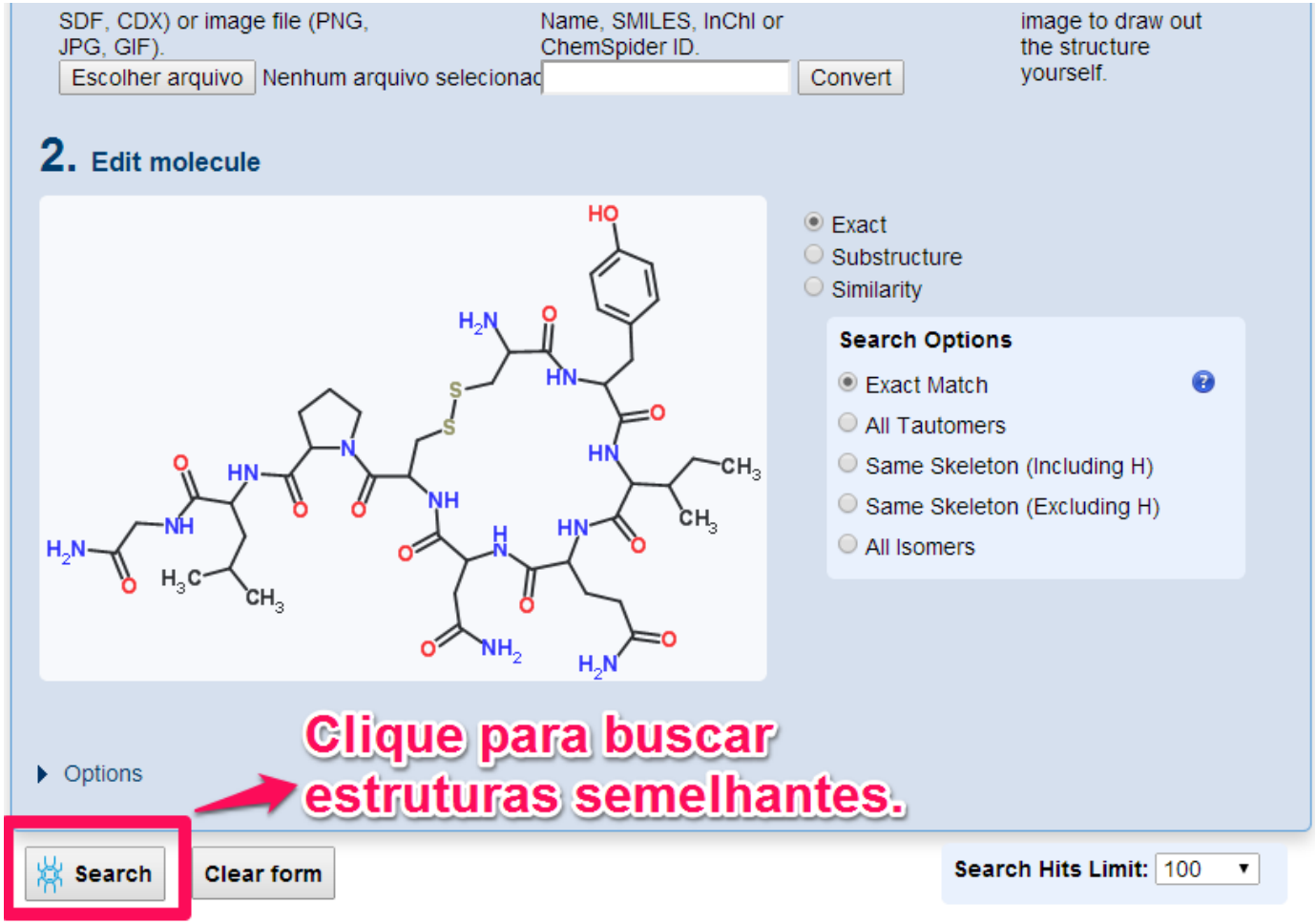
http://digichem.org/2011/10/24/dica-de-site-chemspider/

Como fazer para descobrir o nome?

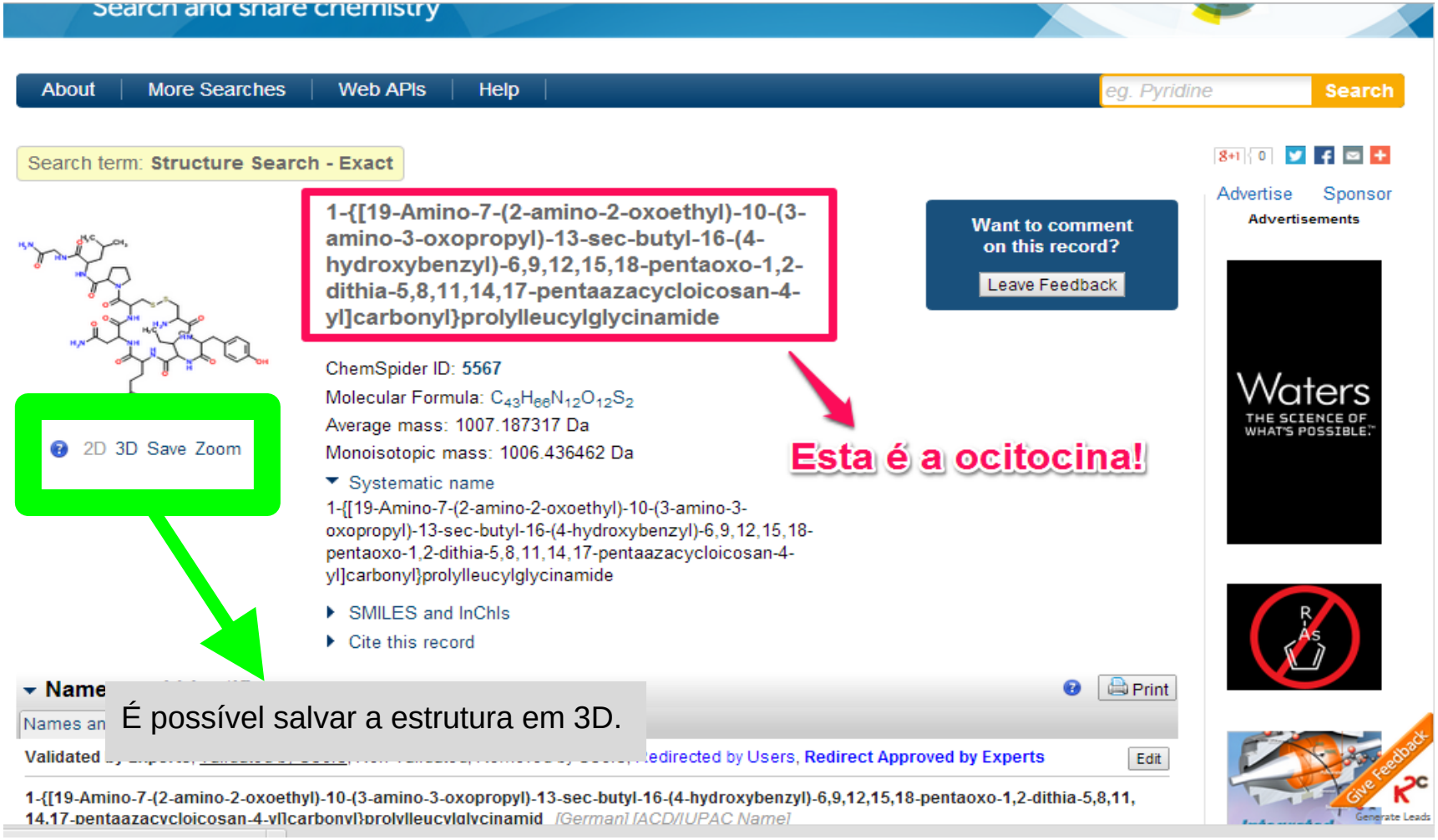
Usando a estrutura montada com ajuda do ChemSketch



Buscando estruturas semelhantes



Mistério 1 resolvido: ocitocina



Dados biológicos de moléculas

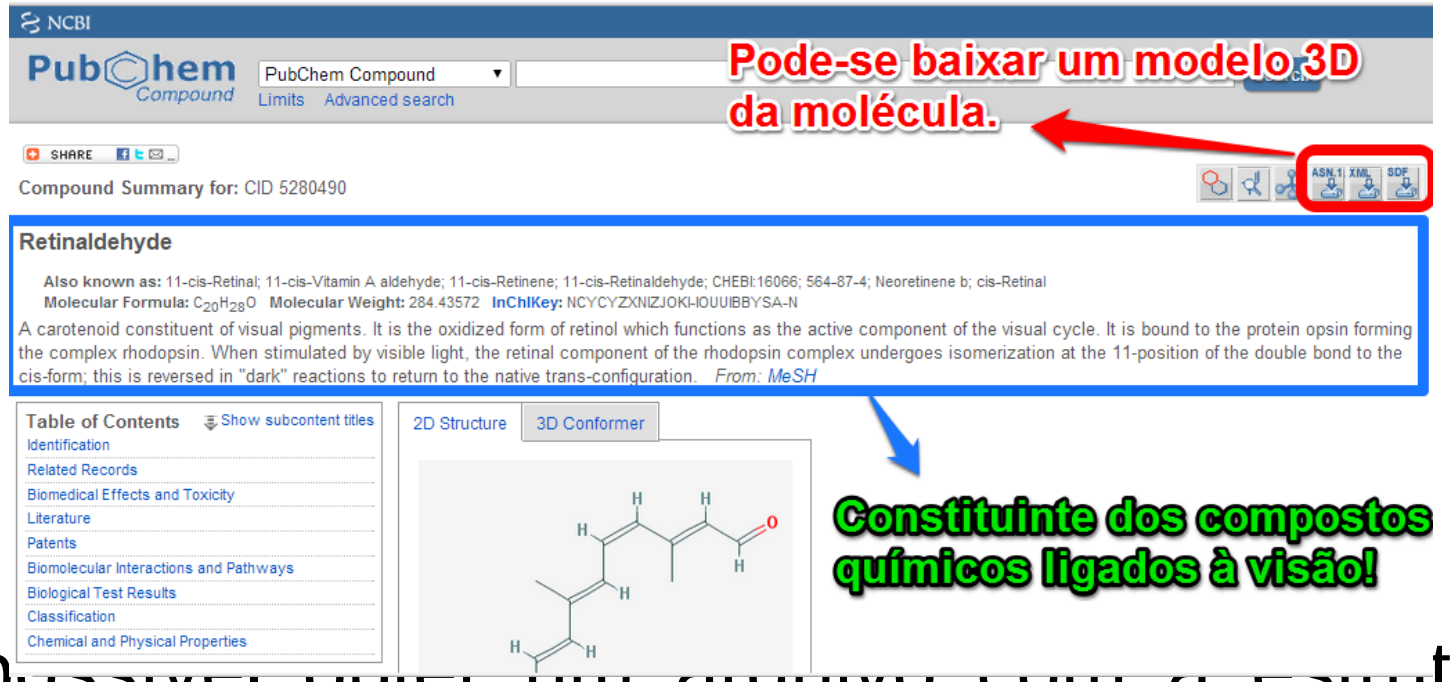
Se você quer encontrar artigos sobre estudos químicos e bioquímicos das moléculas em questão, entre no site PubChem.
http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/

Dados biológicos de moléculas

No exemplo, procurei por informações sobre o 11-cis-retinal.

Dados biológicos de moléculas

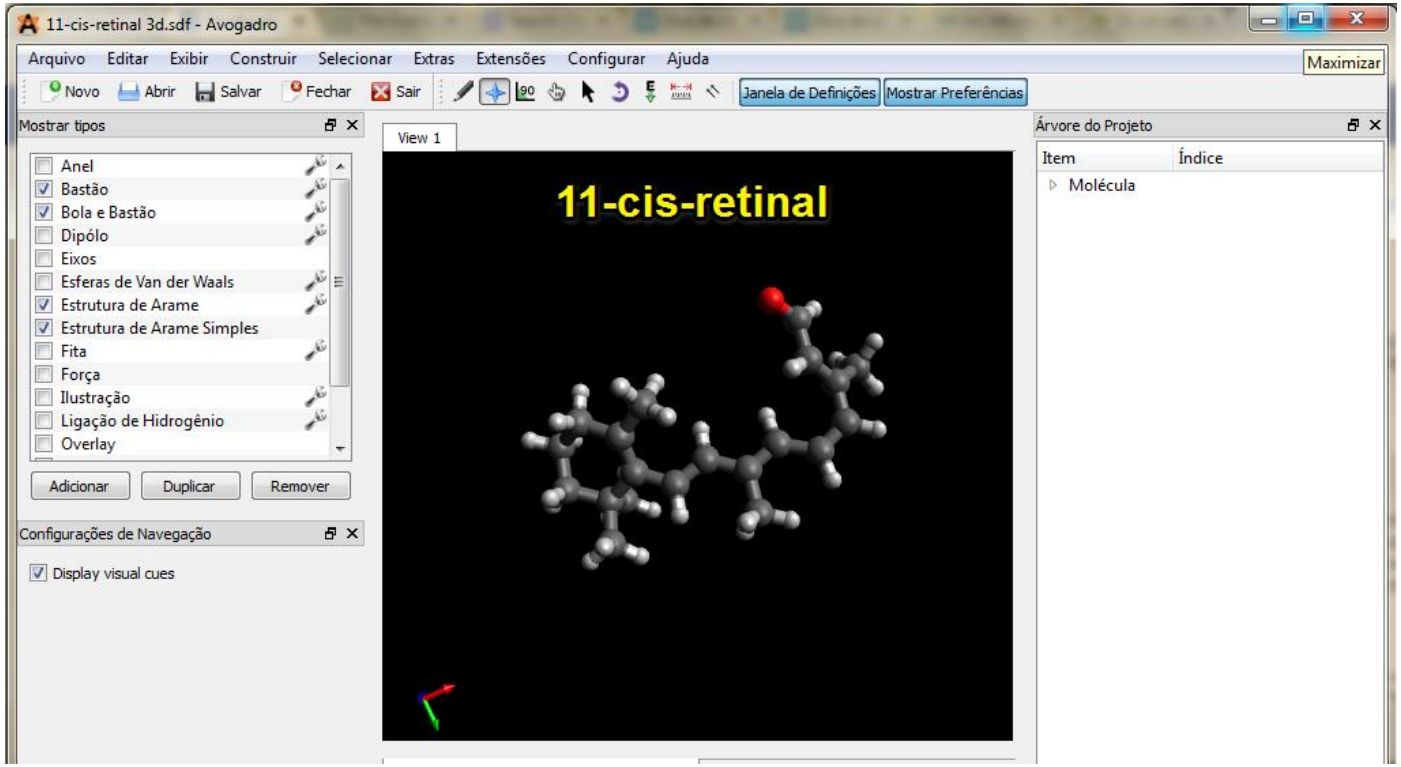
Clicando em *summary*, descobre-se a ficha completa da molécula.



É possível obter um arquivo com a estrutura 3D da molécula.

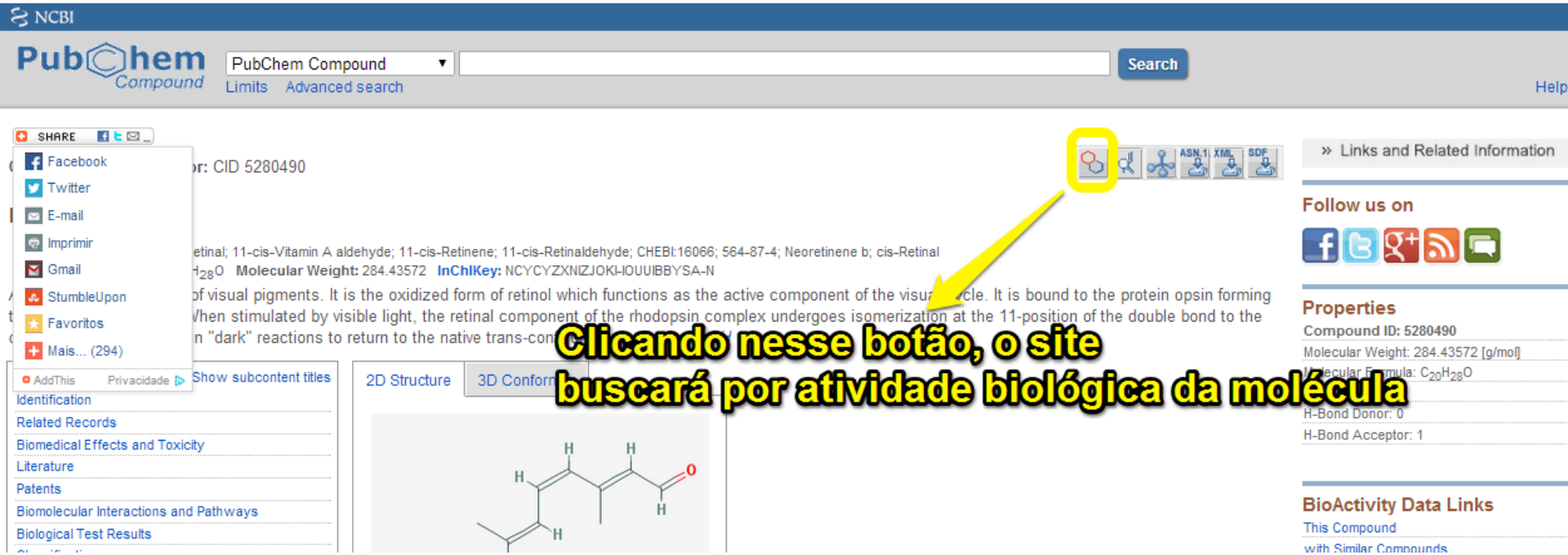
Dados biológicos de moléculas

O formato é SDF, e pode ser aberto com o software Avogadro.



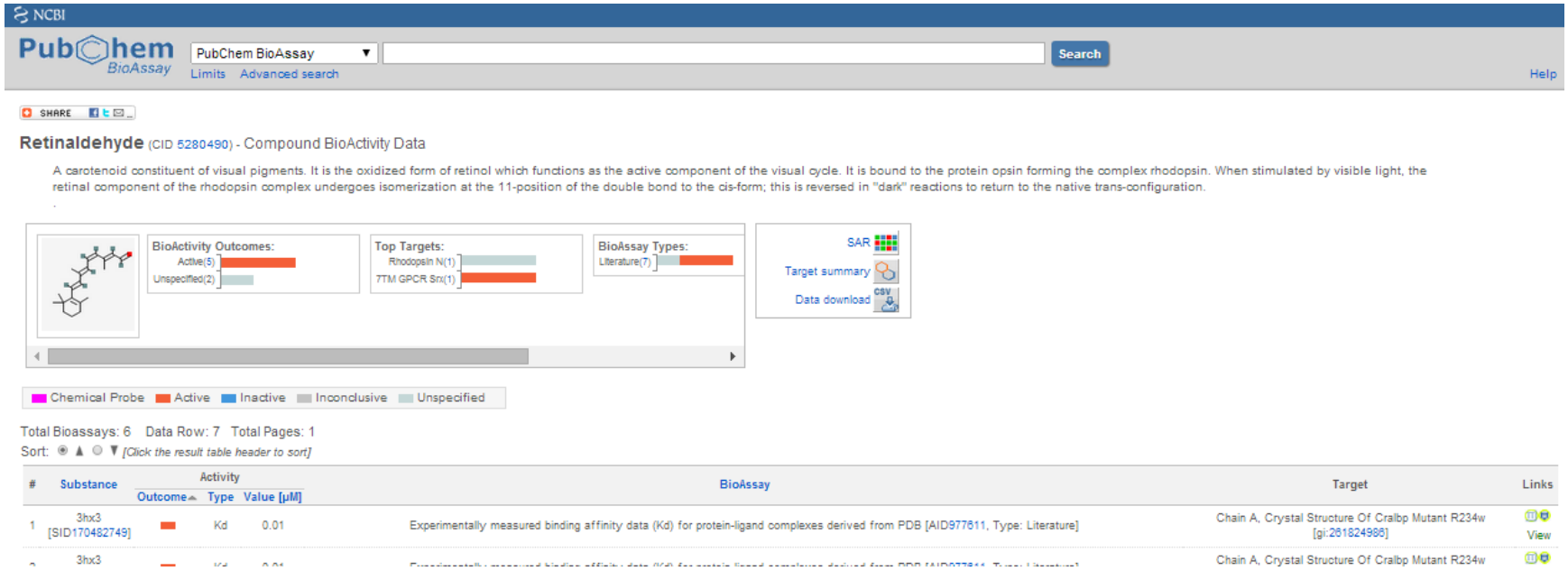
Dados biológicos de moléculas

Clicando no botão BioActivity summary, uma nova página com os dados biológicos surge.



Dados biológicos de moléculas

Clicando no botão BioActivity summary, uma nova página com os dados biológicos surge.



Respostas para os desafios

1) Ocitocina, também conhecida como droga do amor.

2) Púrpura de Tyrian, usada para tingir de púrpura as vestes de reis.

3) Tetrahidrocanabinol (THC), componente principal da maconha.

4) 11-cis-retinal, molécula envolvida na visão

E isso encerra nossa oficina...

http://www.myfunstudio.com/designs/pt/