Aprendendo a usar o Chemsketch

Prof. Dr. Márcio Marques Martins

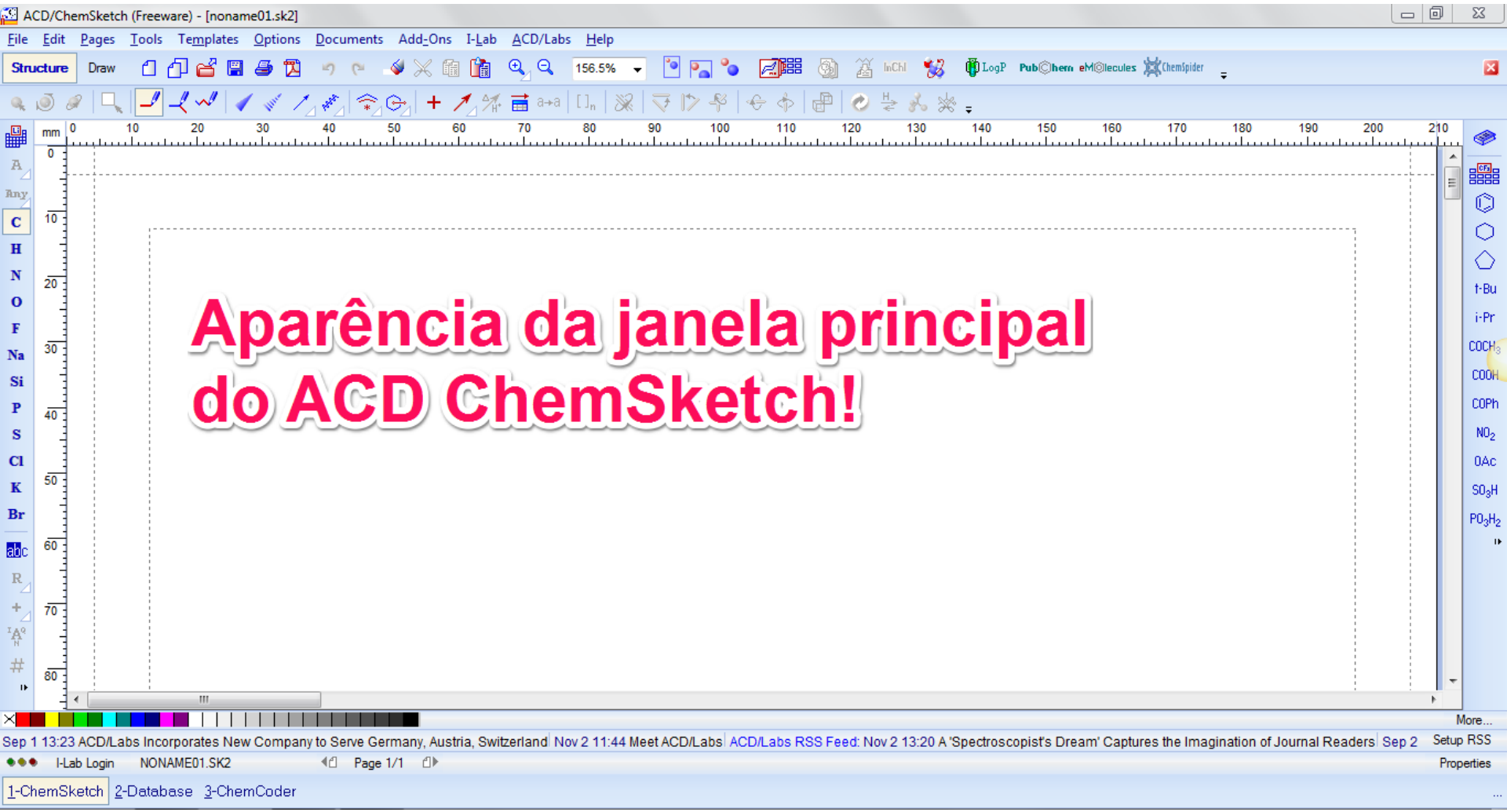
digimarcio

Onde encontrar o software?

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

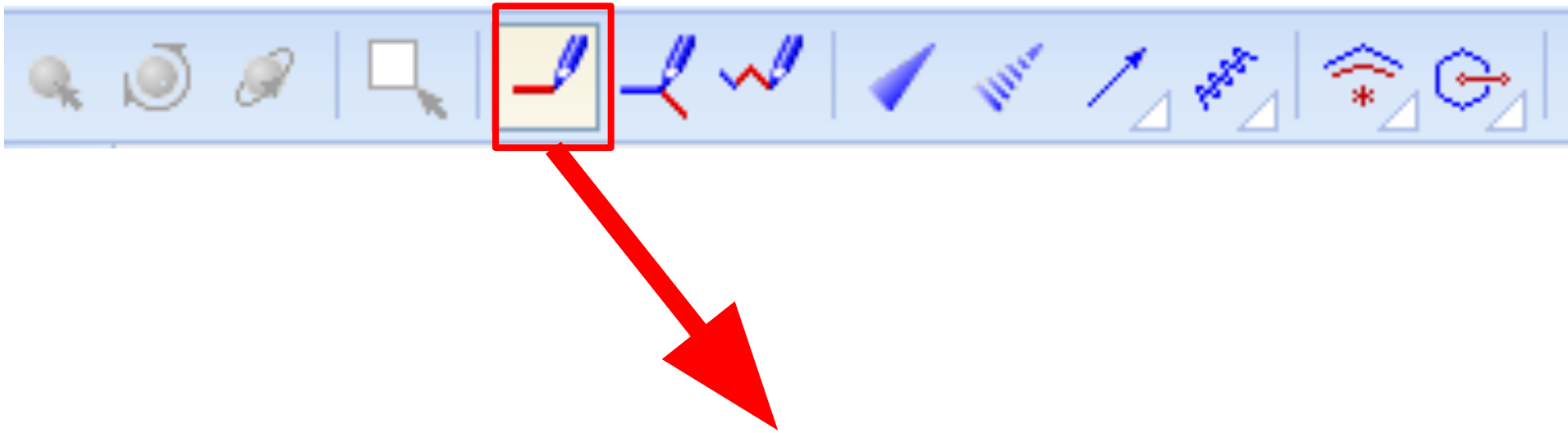
Barra de desenho

SELECIONAR/MOVER/REDIMENSIONAR

Barra de desenho

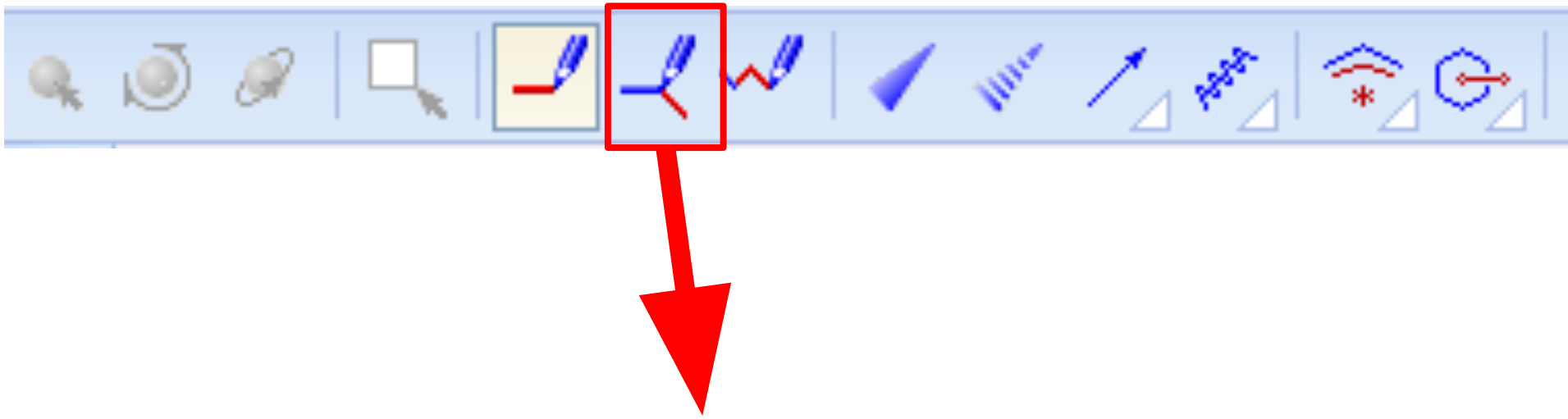
Barra de desenho

Alternando entre modos de desenho



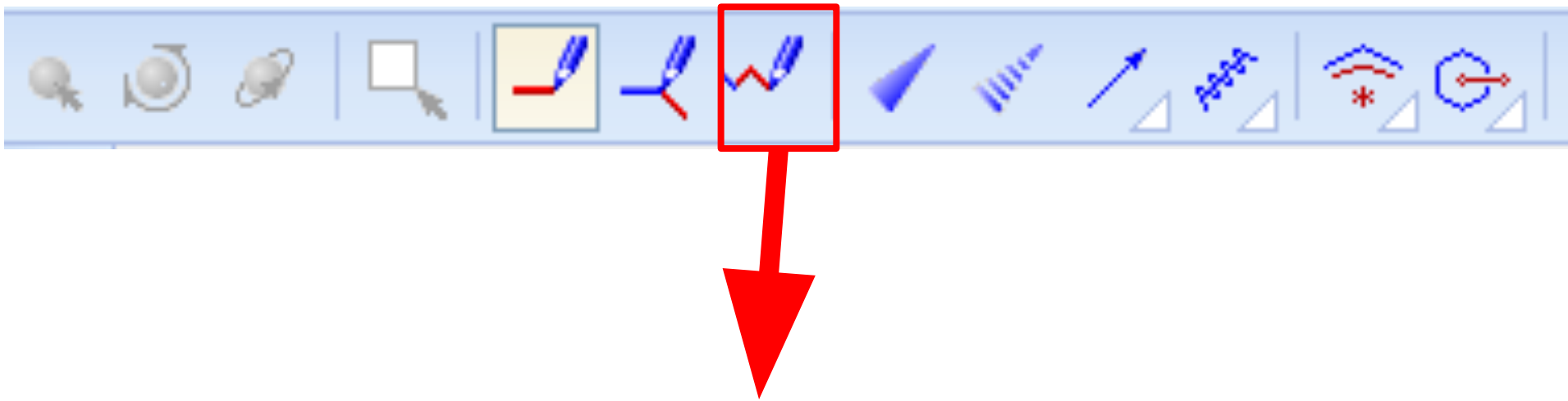
DESENHAR NORMAL - PRODUZ MOLÉCULAS COM BAIXA PRECISÃO ESTRUTURAL

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.

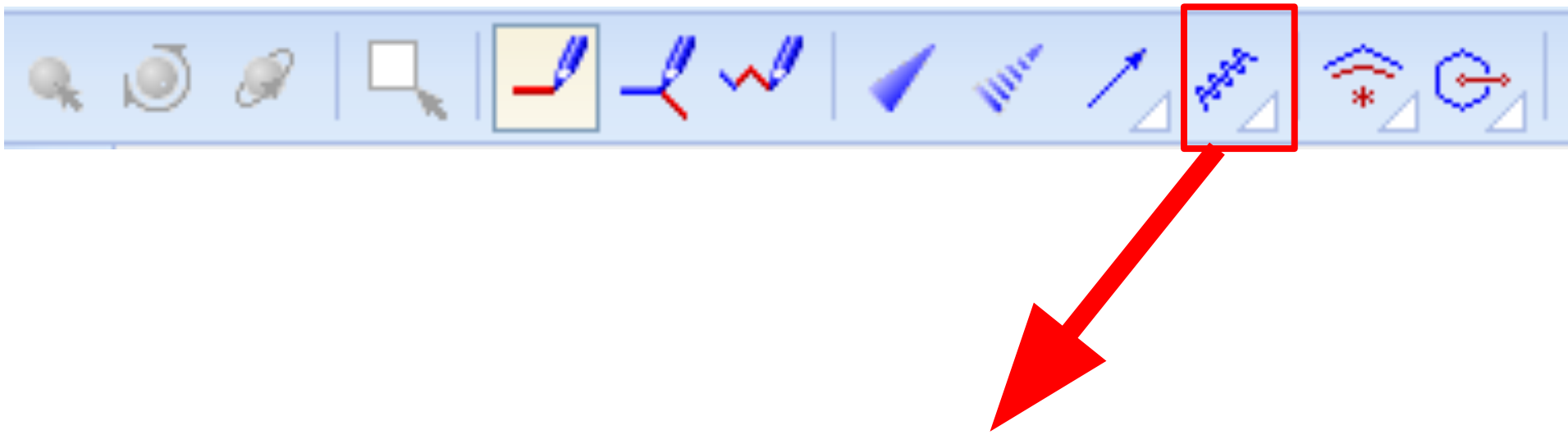
Tipos de ligações químicas

LIGAÇÕES ESTEREOQUÍMICAS

Tipos de ligações químicas

VÁRIOS TIPOS DE LIGAÇÕES
COORDENADAS

Tipos de ligações químicas

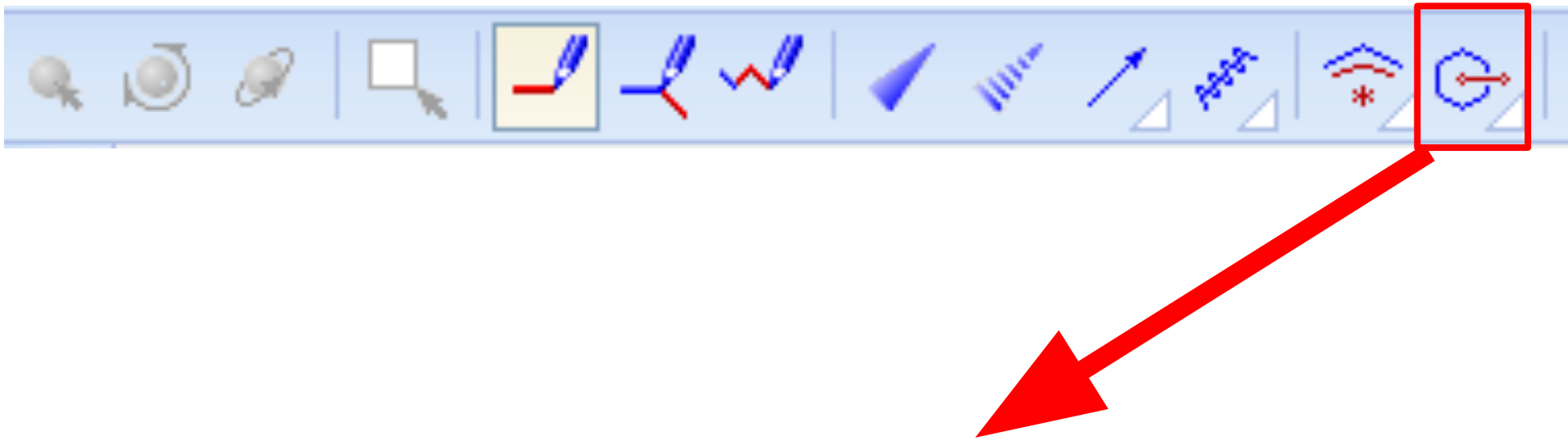


LIGAÇÕES ESTÉREO INDEFINIDAS

Tipos de ligações químicas

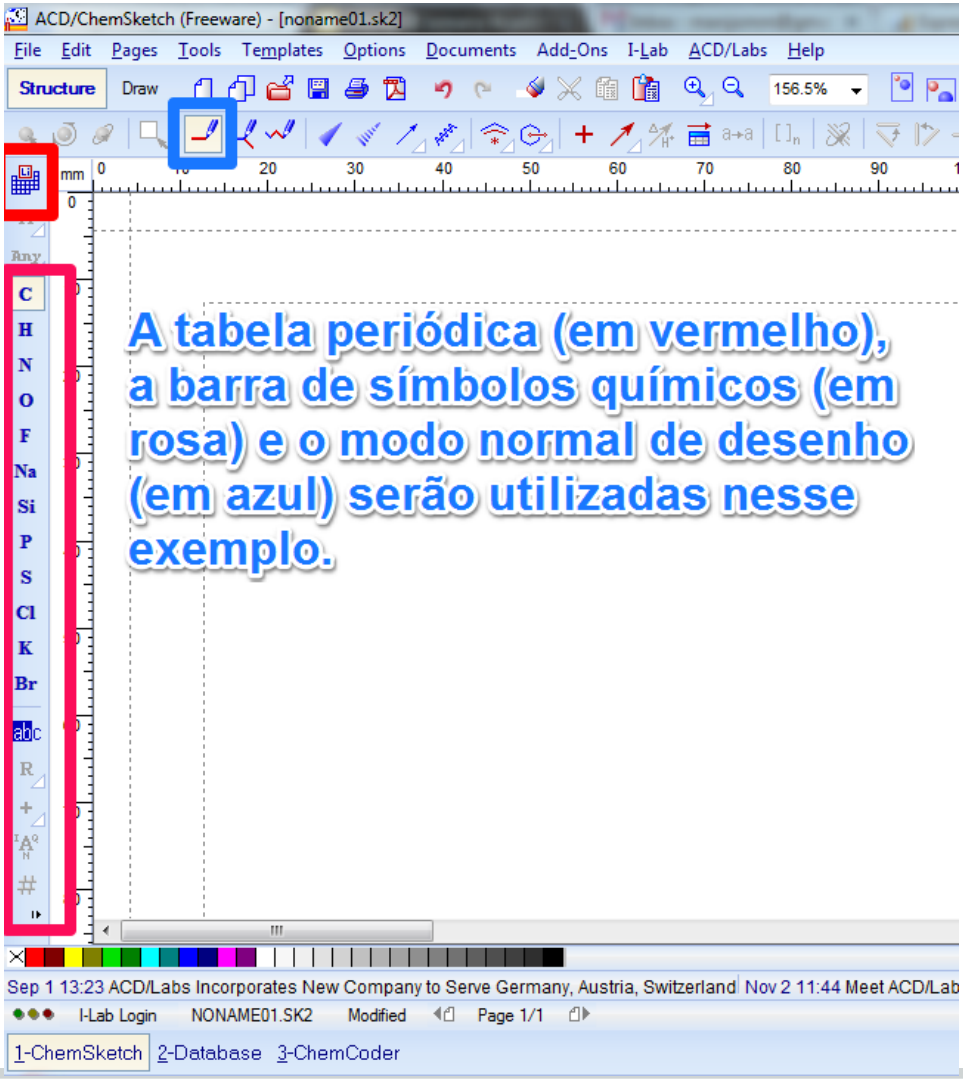
LIGAÇÕES DESLOCALIZADAS

Tipos de ligações químicas

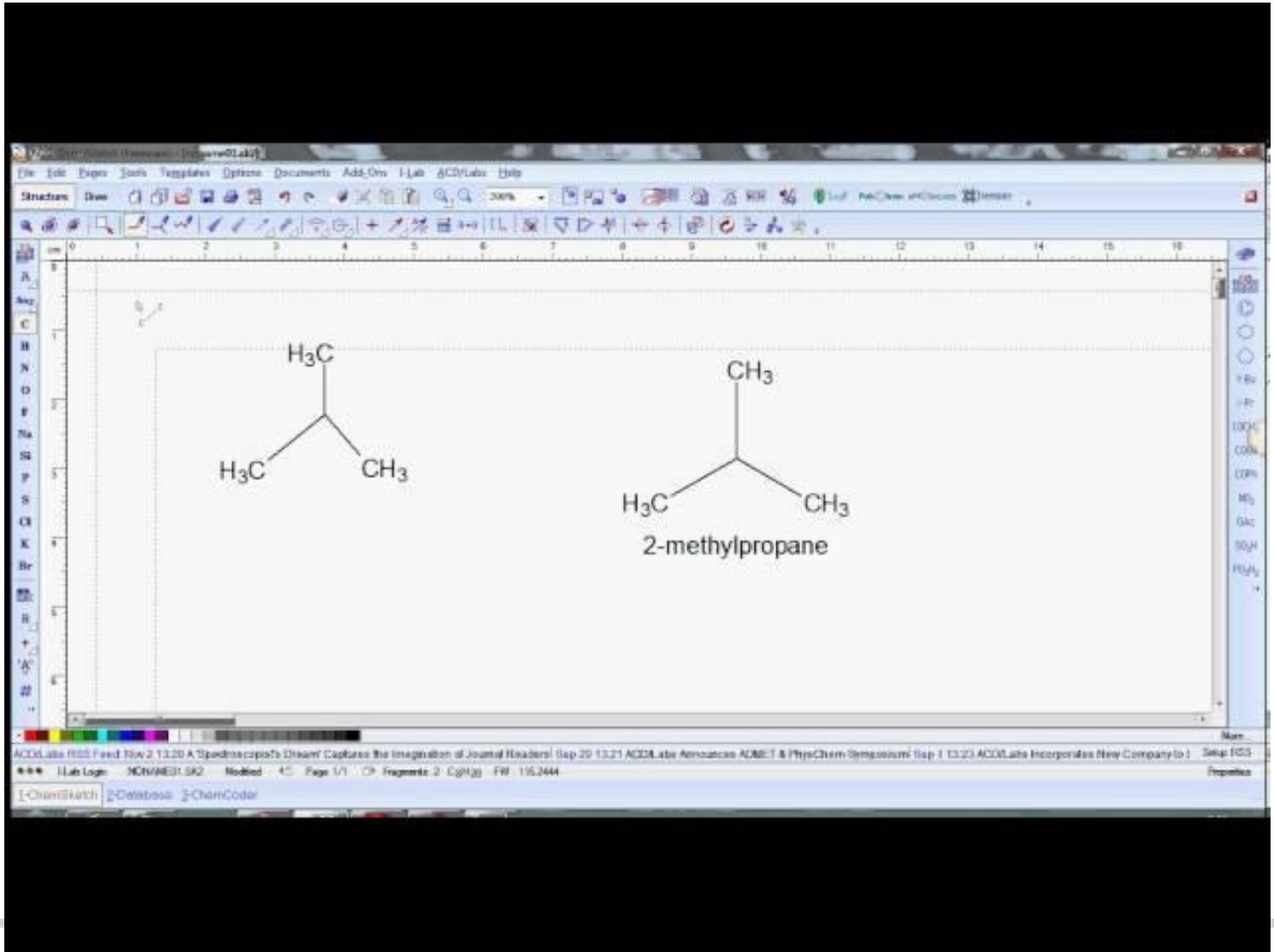


LIGAÇÕES DE MARKUSH
LIGANTES EM POSIÇÕES INDEFINIDAS

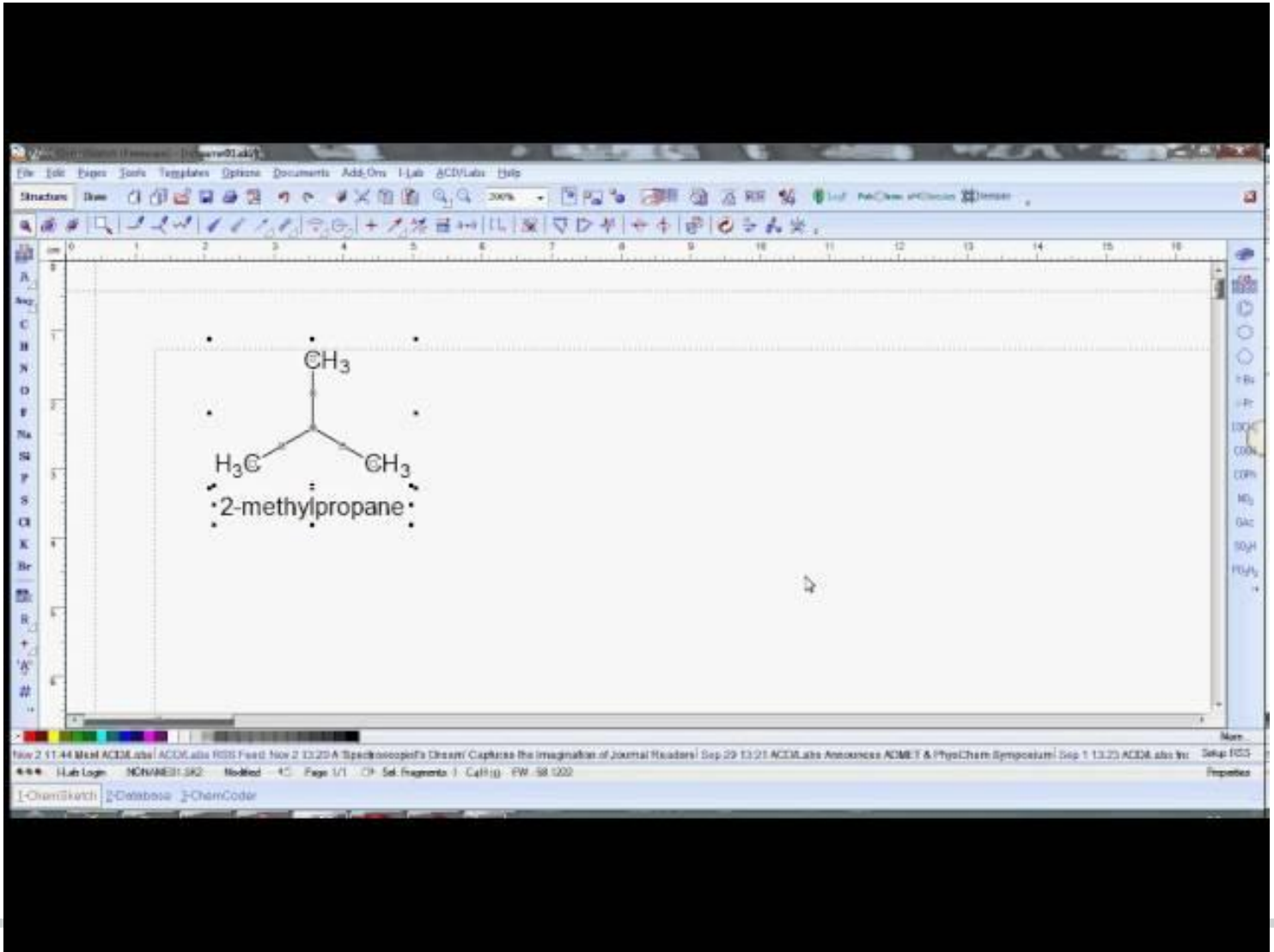
1º exemplo: desenho modo normal



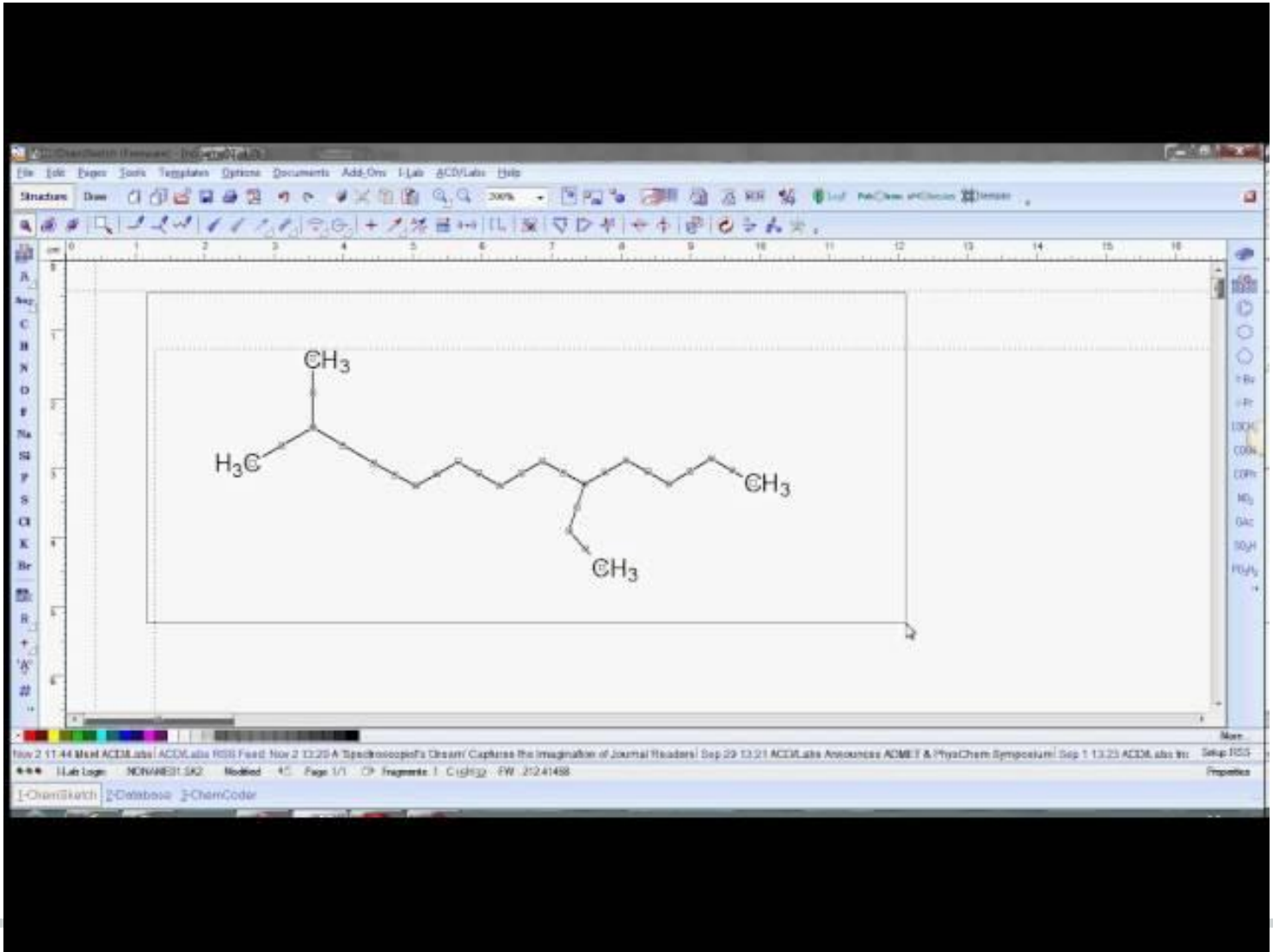
1.desenhando o 2-metilpropano



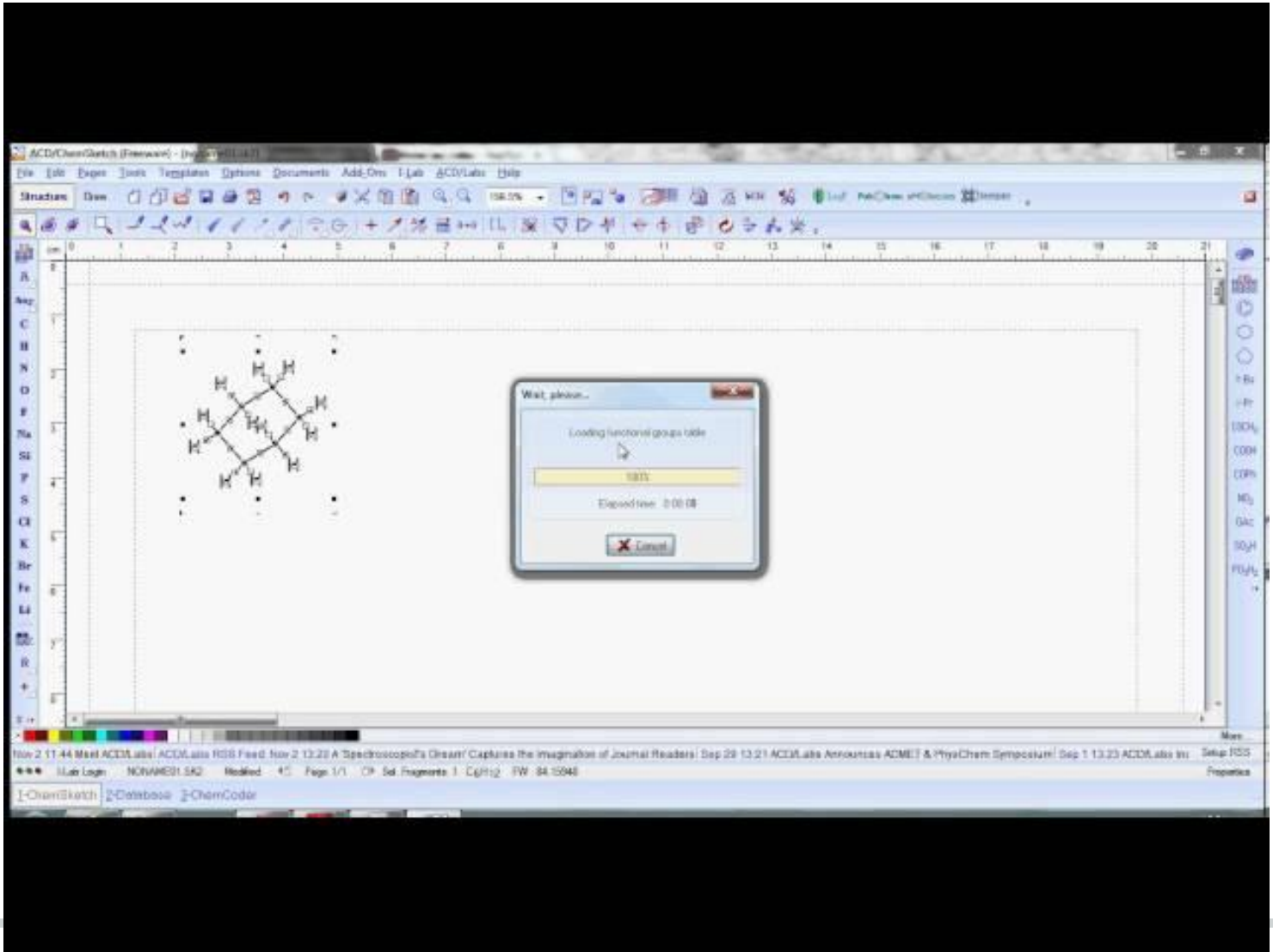
2-obtendo info sobre o 2- metilpropano



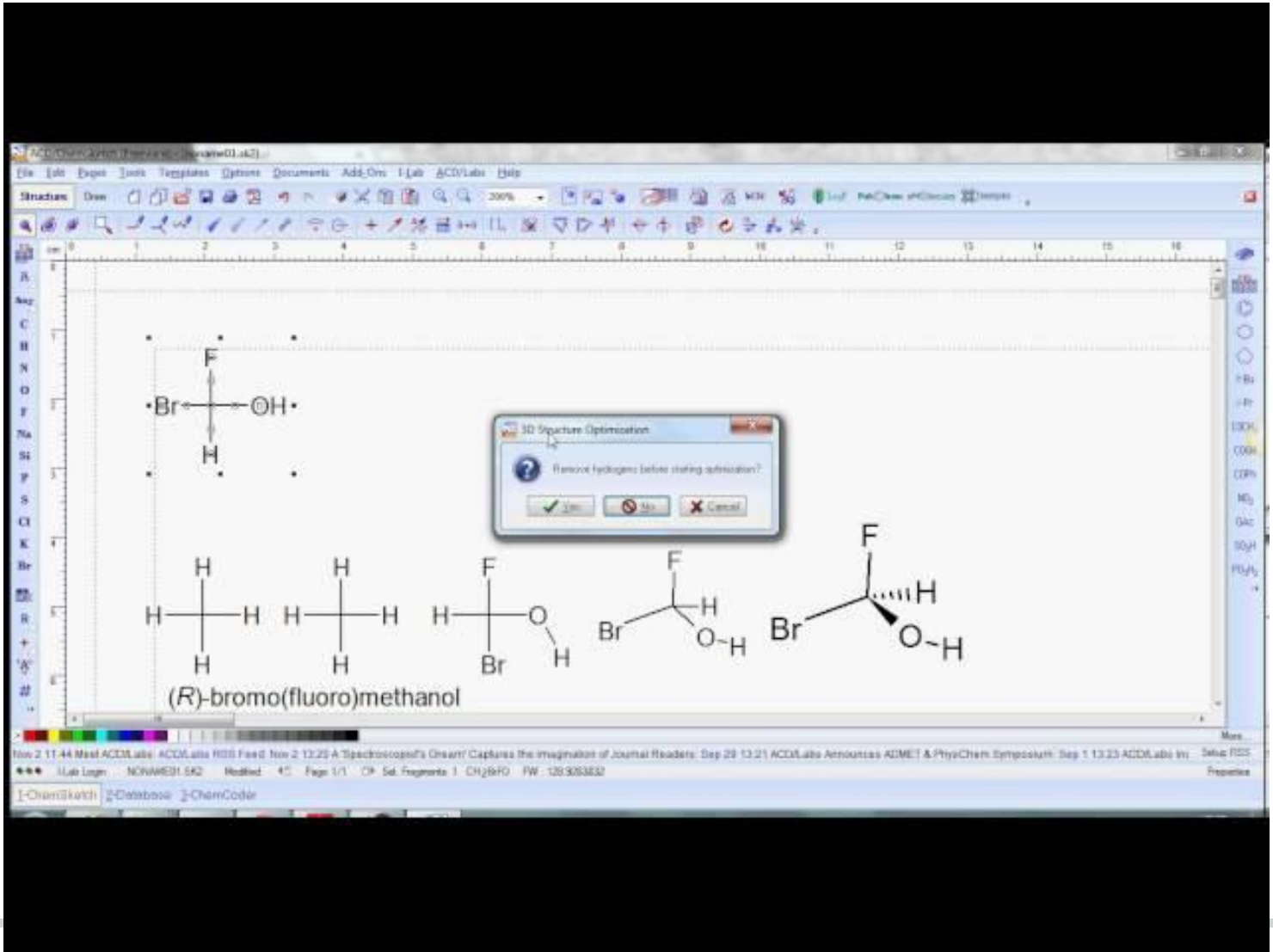
3.desenhando no modo cadeias



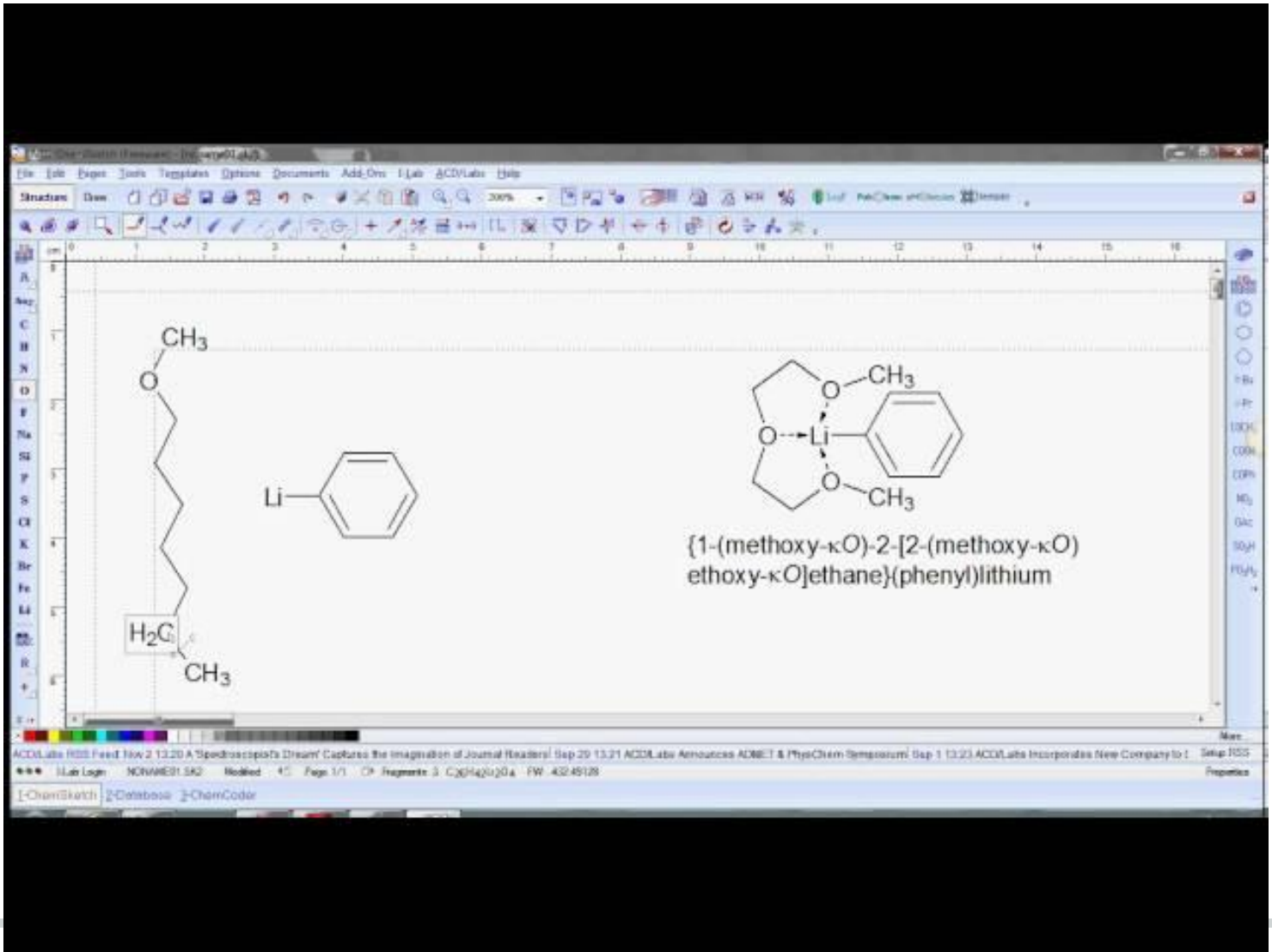
4.desenhando ciclohexano (modo contínuo)



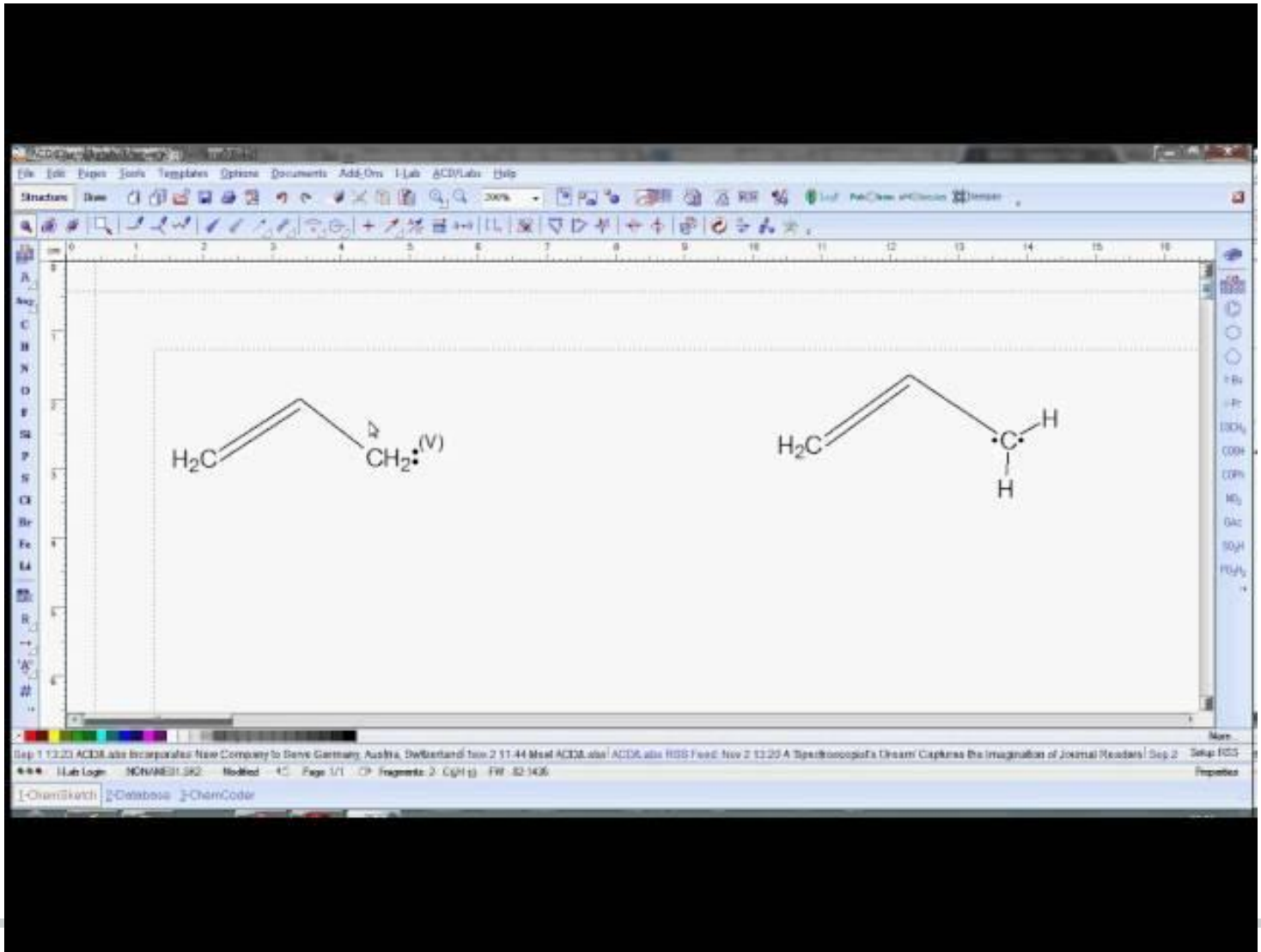
5.desenhando isômeros



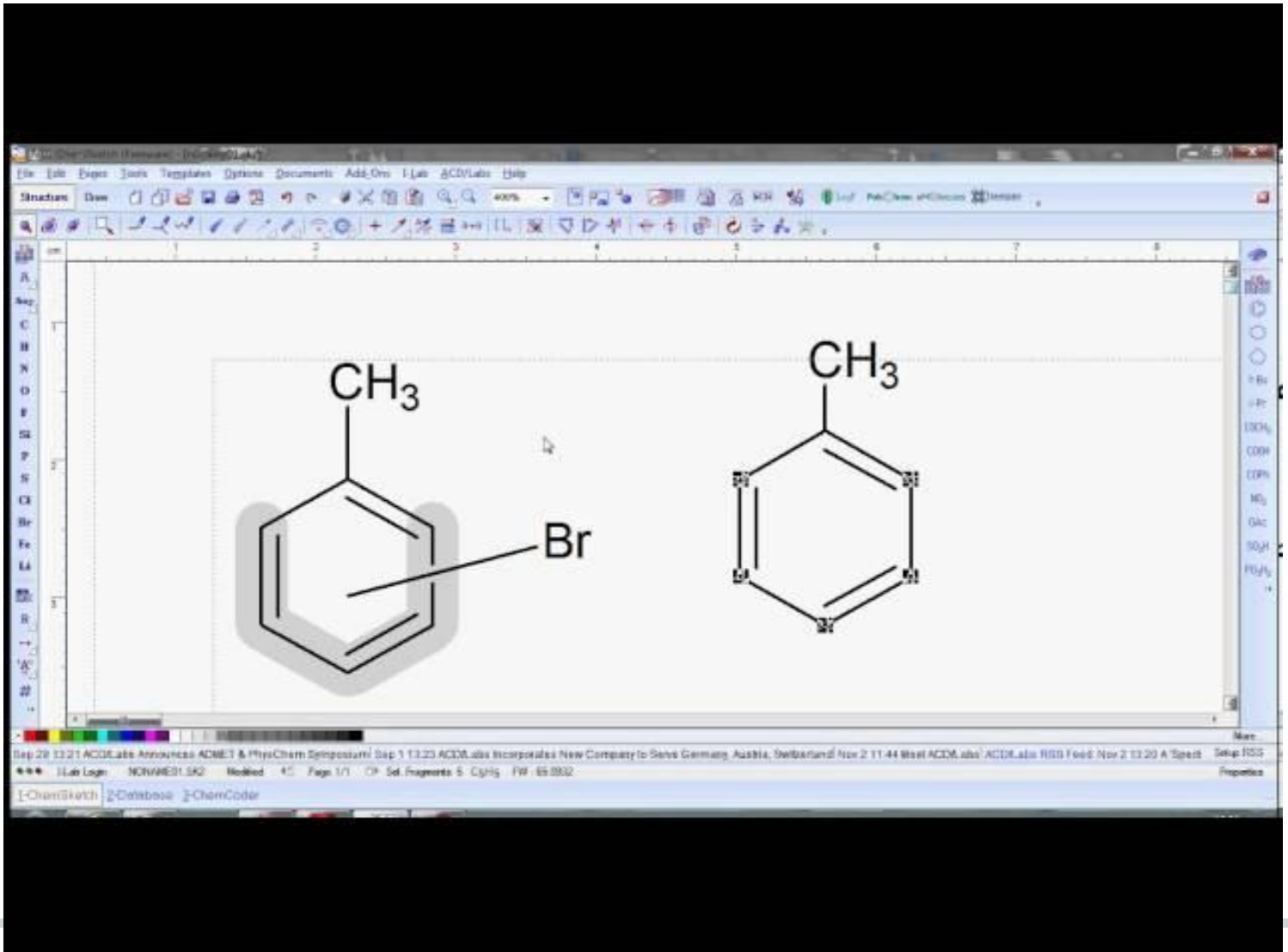
6.ligações coordenadas



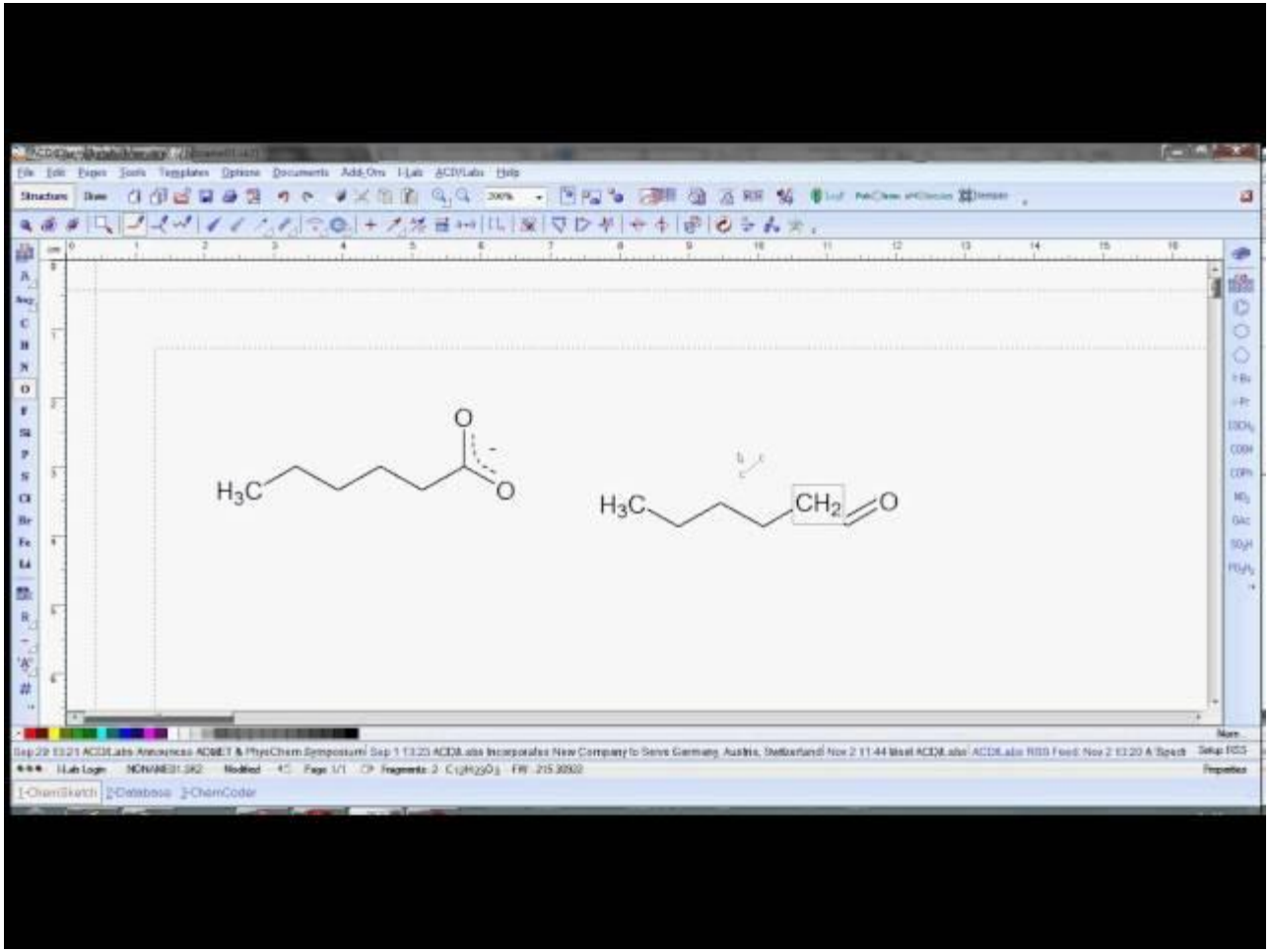
7.desenhando um radical alila



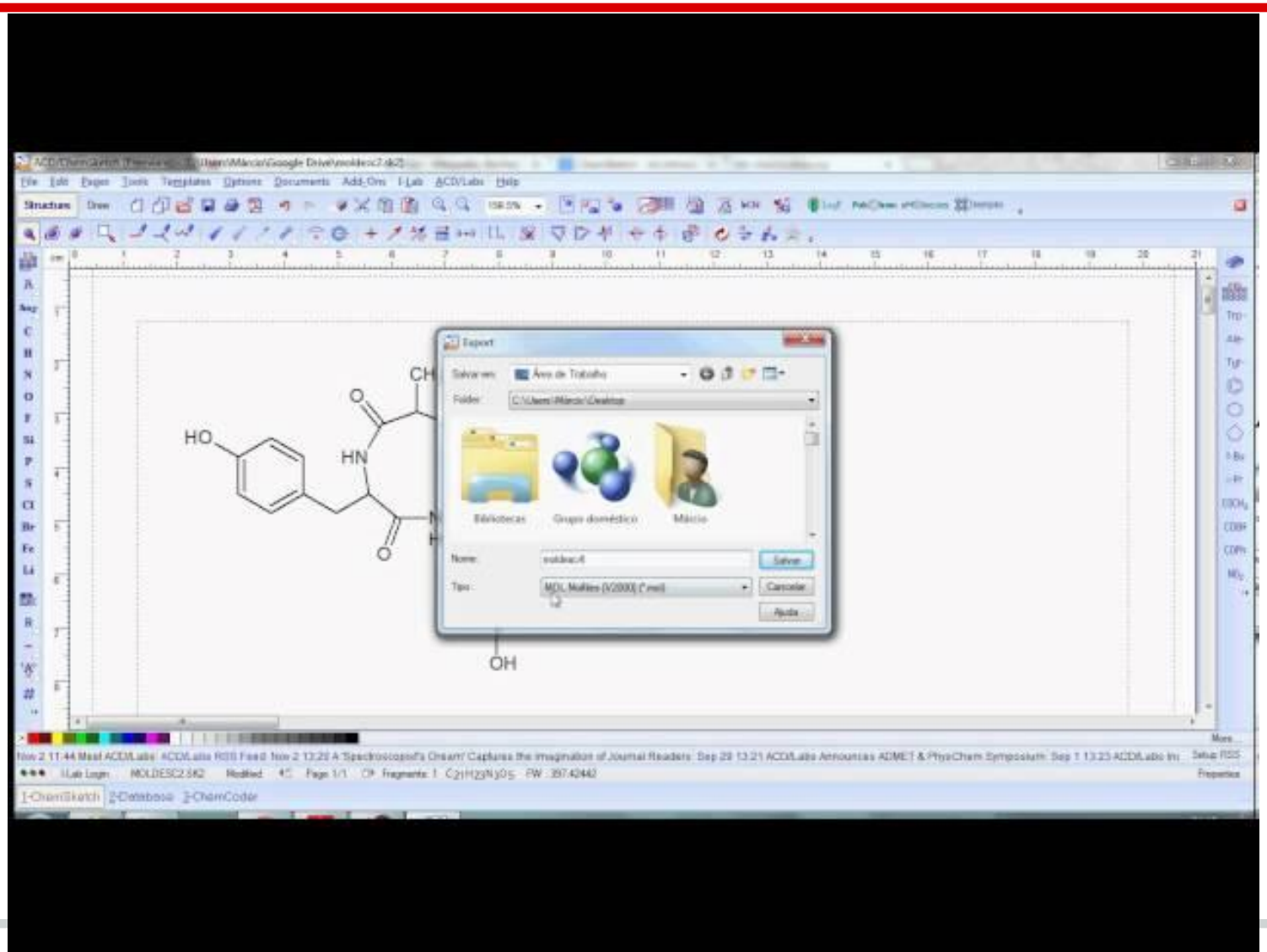
8.ligações de Markush



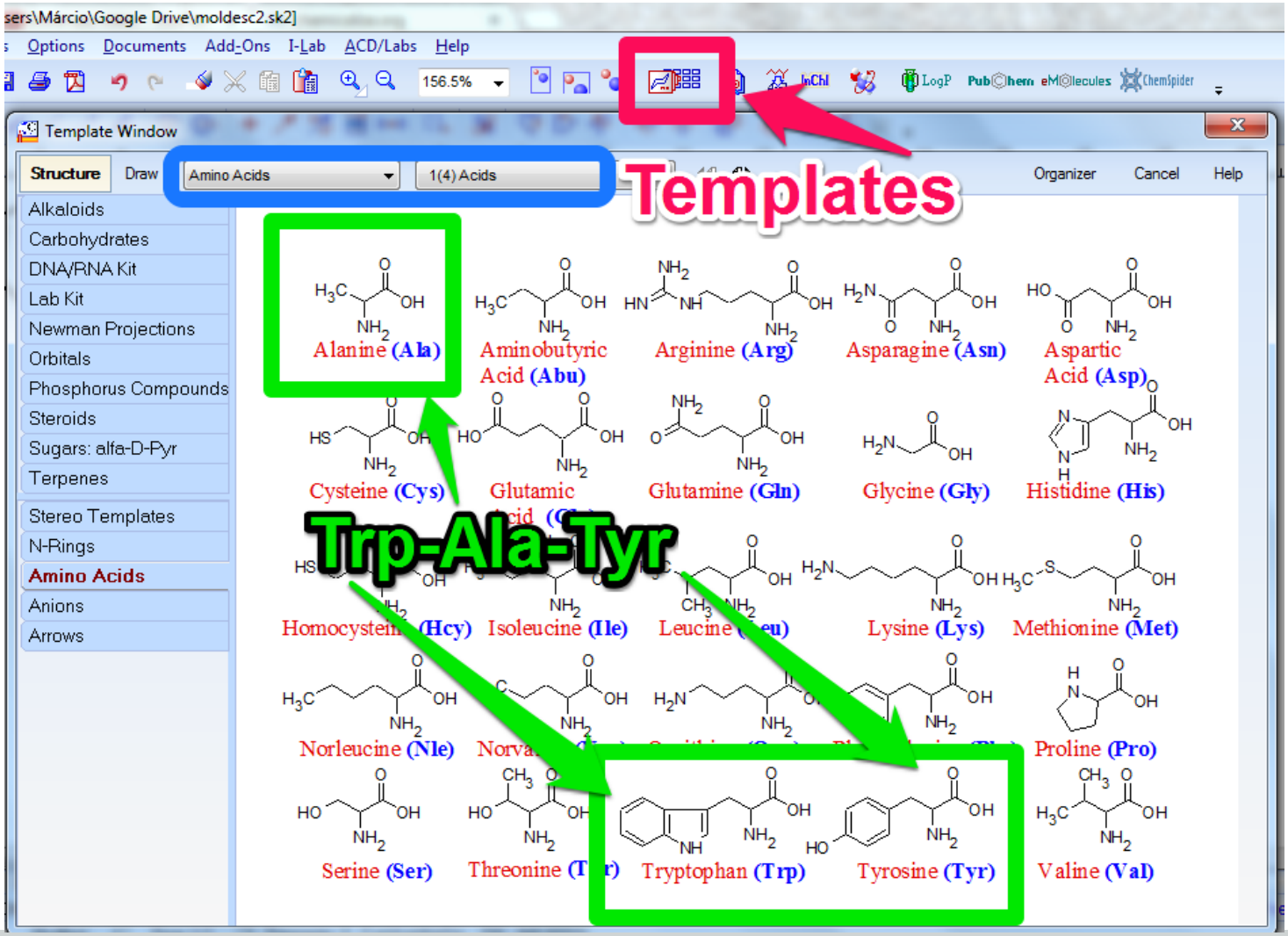
9.ligações deslocalizadas - íon hexanoato



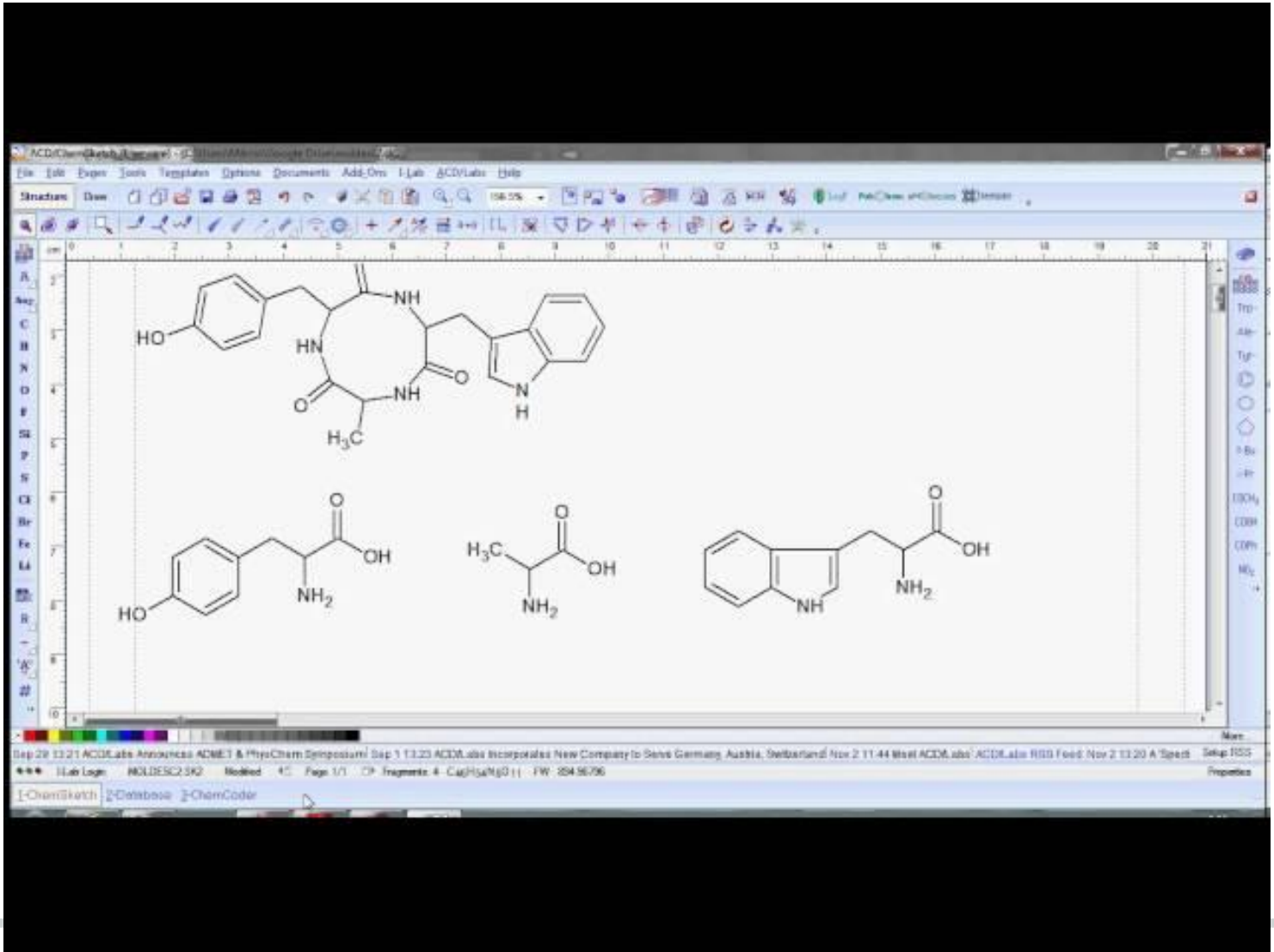
10.desenhando um peptídeo



Utilizando templates



11.desenhando peptídeo a partir de templates



Exercício do detetive químico

Que molécula é essa?

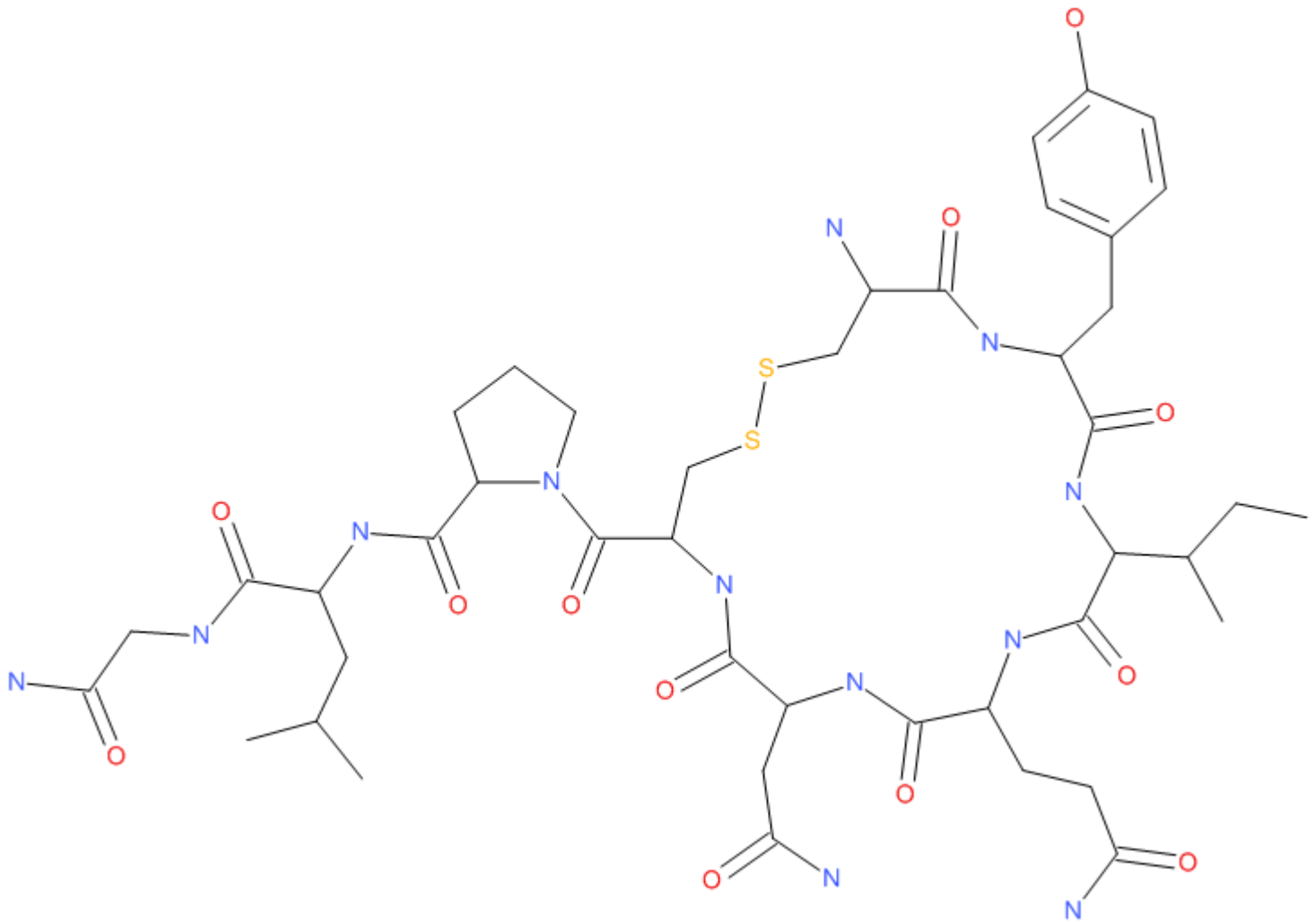
Dica

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

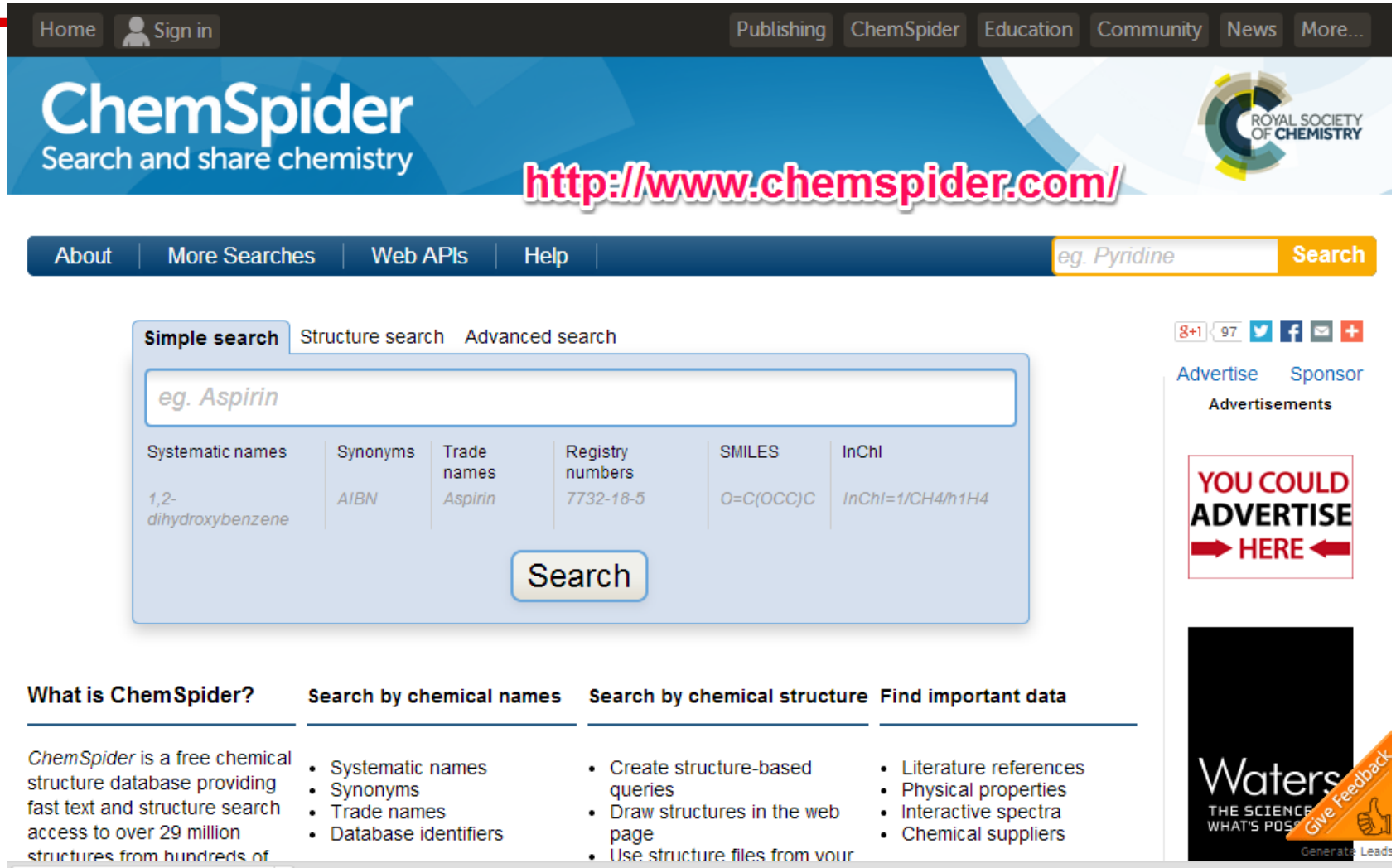
Se você quiser facilitar as coisas, o link abaixo contém a estrutura já desenhada.

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

Molécula misteriosa

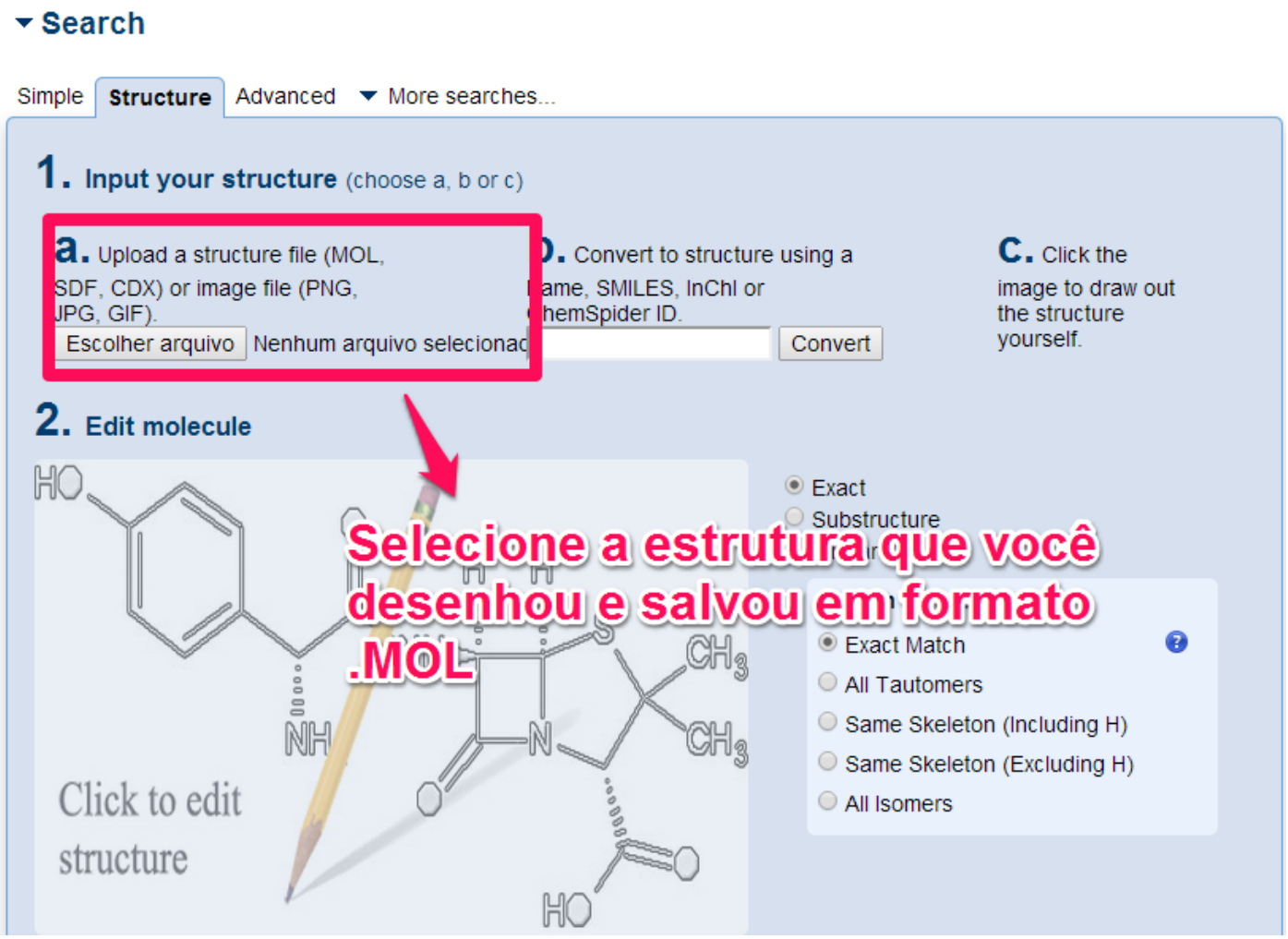


Como fazer para descobrir o nome?

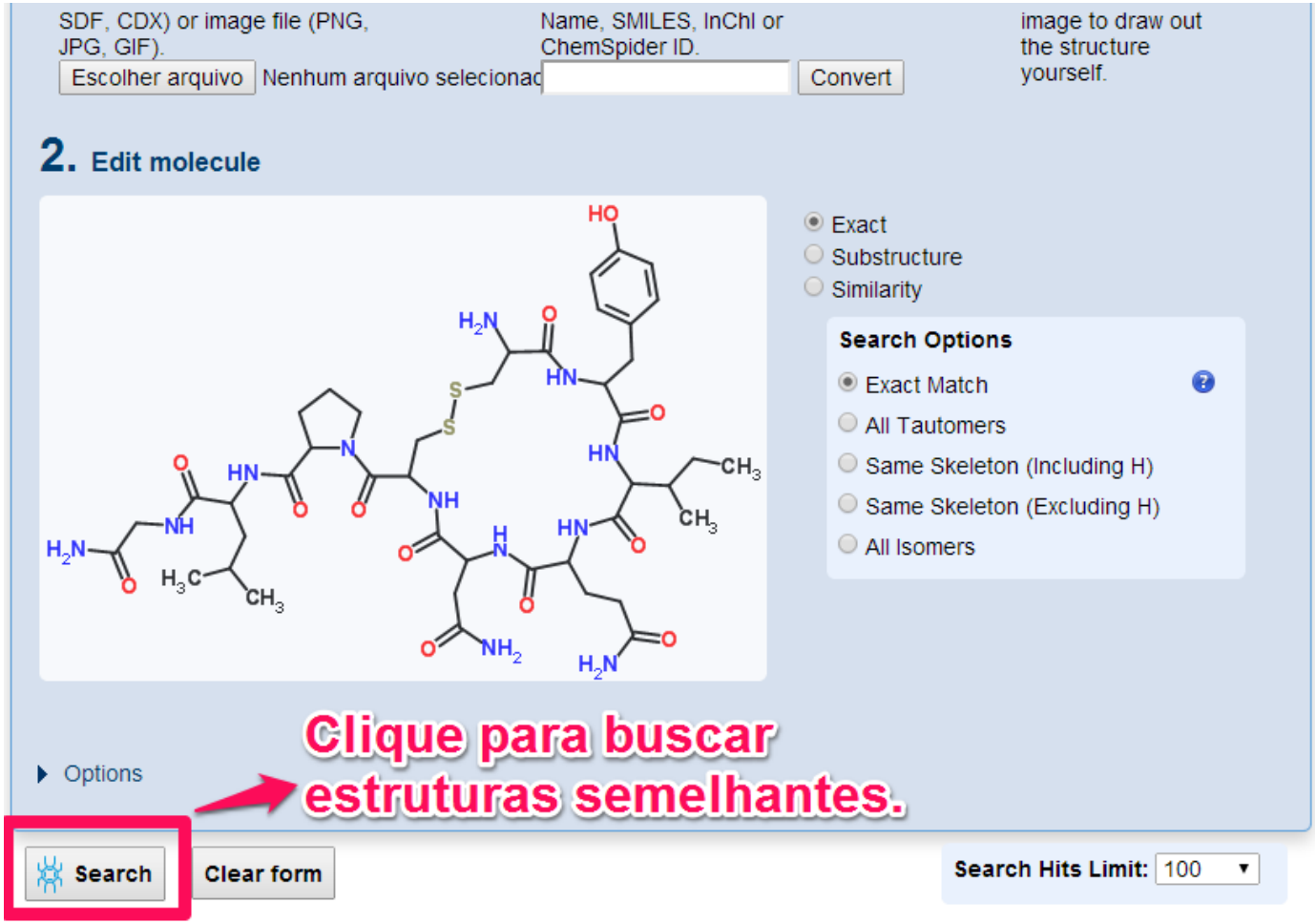


Como fazer para descobrir o nome?

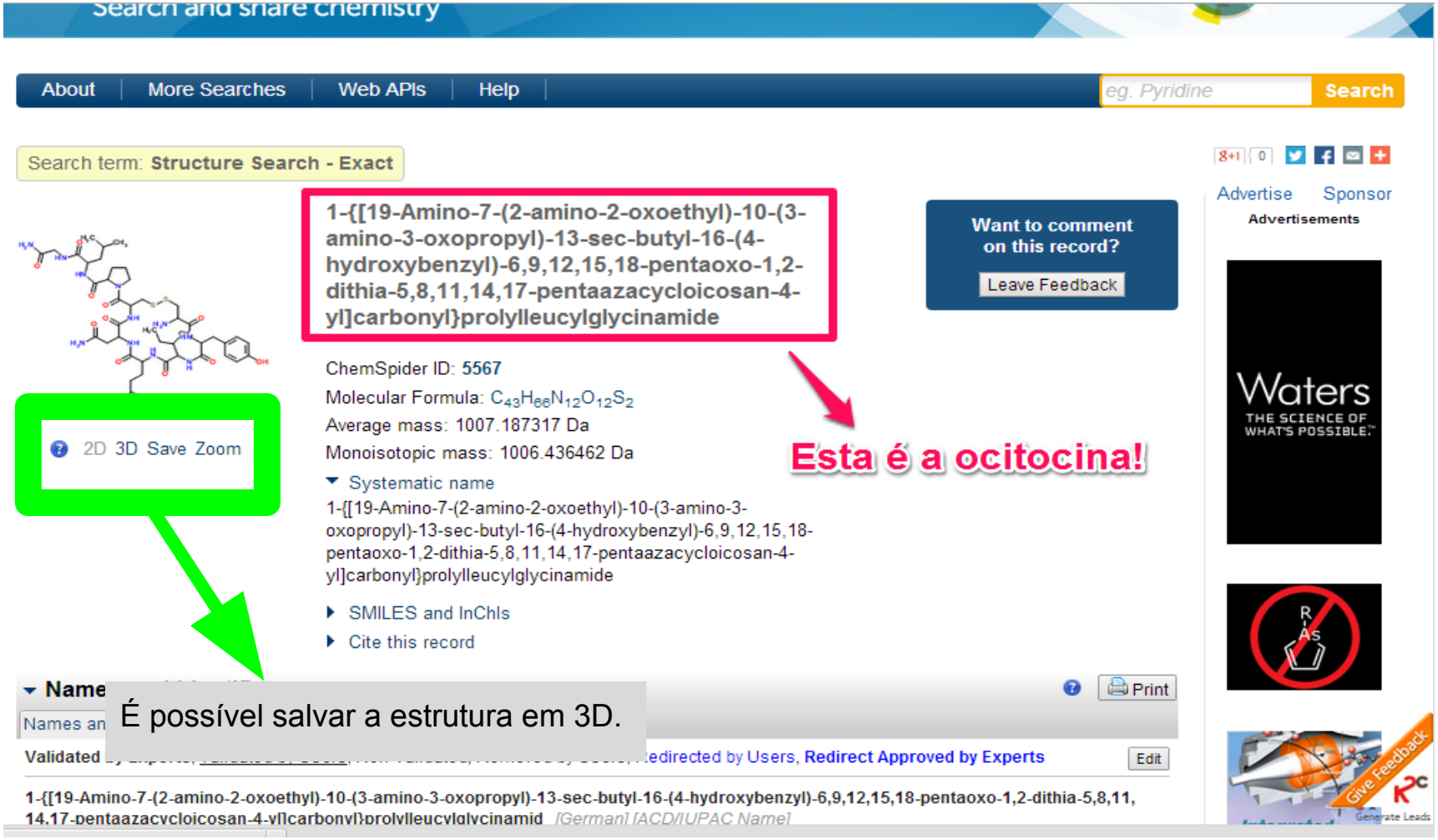
Usando a estrutura montada com ajuda do ChemSketch



Buscando estruturas semelhantes



Mistério resolvido: ocitocina



E isso encerra nosso curso...