

Tecnologias no Ensino de Geometria Molecular

Prof. MSc. JOÃO RIBEIRO FRANCO NETO

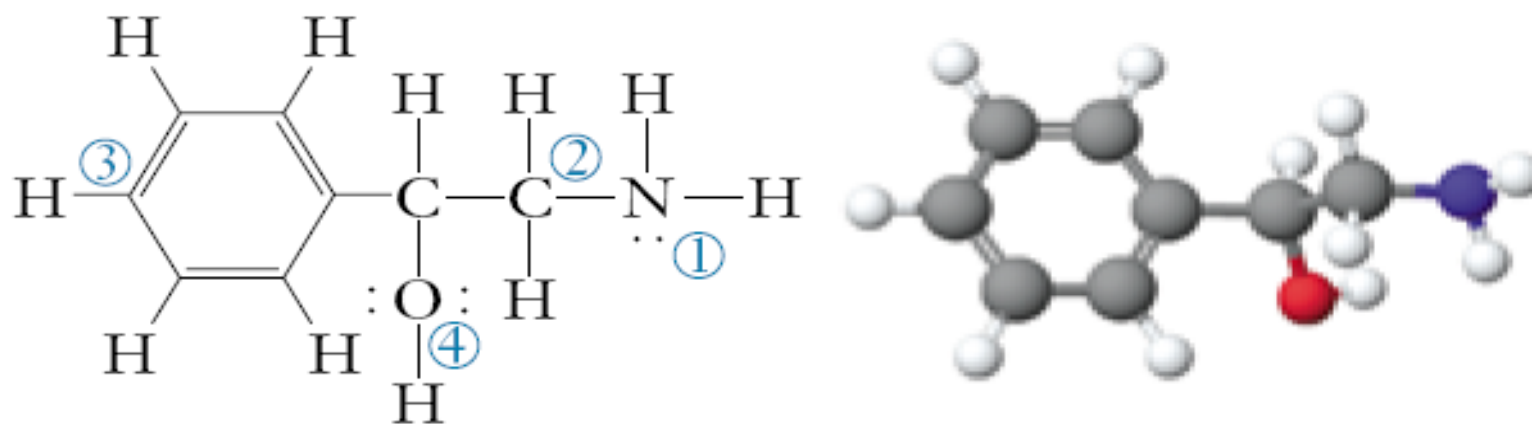
Agosto - 2007

Visualização de objetos moleculares

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

- Objetos moleculares podem ser vistos em livros didáticos e em artigos científicos, servindo de referência para designar uma molécula.

(e) ephedrine, a nasal decongestant¹



¹*In these kinds of structural drawings, each intersection of lines represents a C atom.*

**Abordagens
instrucionais
como apoio
ao ensino de
química**

```
graph LR; A[Abordagens instrucionais como apoio ao ensino de química] --> B[integração de atividades de laboratório na aula em classe]; A --> C[uso de modelos concretos]; A --> D[uso de tecnologias como ferramentas de aprendizado]; A --> E[uso de modelos concretos juntamente com tecnologias como ferramentas de aprendizado];
```

**integração de atividades de
laboratório na aula em classe**

uso de modelos concretos

**uso de tecnologias como
ferramentas de aprendizado**

**uso de modelos concretos
juntamente com tecnologias
como ferramentas de
aprendizado**

Desenhos no quadro de giz

Bolas de isopor e varetas

Massas de modelar

Abordagem didático-pedagógica

Cartazes

Modelos comerciais

Softwares ???

Geometria Molecular

- A geometria molecular é um parâmetro de importância fundamental para a previsão da polaridade de uma molécula. Permite inferir sobre o tipo e intensidade das interações intermoleculares que se podem estabelecer entre moléculas no composto puro, ou com átomos, ou moléculas de outras substâncias.

- A previsão da geometria molecular, até de moléculas simples, representa freqüentemente um problema que muitos alunos do ensino médio e, por vezes do superior, não conseguem superar.
- Estas dificuldades estão usualmente relacionadas com a suposta necessidade de determinar, previamente, a estrutura de Lewis (ou a fórmula estrutural) para as moléculas.

- A geometria tridimensional das moléculas é determinada pela orientação relativa de suas ligações covalentes. A idéia do modelo VSEPR foi primeiro explorado pelos químicos ingleses Nevil Sidgwick e Herbert Powell em 1940.
- Em 1957 o químico Ronald Gillespie, baseando-se em trabalhos prévios de Sidgwick e Powell, criou uma ferramenta muito simples para prever a geometria das moléculas, tendo uma maior exatidão na geometria molecular.

- A teoria recebeu o nome de Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory (VSEPR) ou Teoria de Repulsão dos Pares Eletrônicos de Valência e se baseia em um simples argumento de que os grupos de elétrons se repelem uns com os outros e a forma adotada pela molécula será aquela em que a repulsão dos grupos eletrônicos seja mínima.

Segundo Atkins (2006), podemos descrever o VSEPR:

- Regiões de alta concentração de elétrons ocupam posições que as afastam o máximo possível;
- Todas as ligações se repelem da mesma maneira, independentemente de serem simples, duplas ou triplas;
- A ligação em torno de um átomo central não depende do número de “átomos centrais” da molécula;

Baixando e instalando o software ChemSketch[®]

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

- Fazendo o download no site www.acdlabs.com

Advanced Chemistry Development (ACD/Labs)

Products Solutions Support Online Services Resources Downloads Events About ACD/Labs

Freeware
Samples & Databases
User's Guides
Miscellaneous
Software for Palm OS
Demo Movies

Visionary Software for Scientists

Latest News & Press Releases

September 7, 2006 - New ACD/ChemSketch Freeware—Chemical Structures at Your Fingertips

August 28, 2006 - Bristol University to Deploy ACD/2D NMR Processor Site-Wide for Advanced Processing and Data Analysis

June 13, 2006 - ACD/Labs Announces Another Free Add-on for Searching the PubChem Online Database

Featured Products

For the new academic year, download **NEW** freeware version 10 of our chemistry drawing software, [ACD/ChemSketch](#)

[Check out](#) our other free software programs and resources for chemistry students and teachers

- Clique no nome do software.

Download ACD/Labs Freeware - Microsoft Internet Explorer

Arquivo Editar Exibir Favoritos Ferramentas Ajuda

Endereço <http://www.acdlabs.com/download/> Ir Links

Advanced Chemistry Development

Products Solutions Support Online Services Resources Downloads Events About ACD/Labs

Free Stuff ▶

Free Stuff

[Freeware](#) | [Samples & Databases](#) | [User's Guides](#) | [Miscellaneous](#) | [Software for Palm OS](#) | [Demo Movies](#)

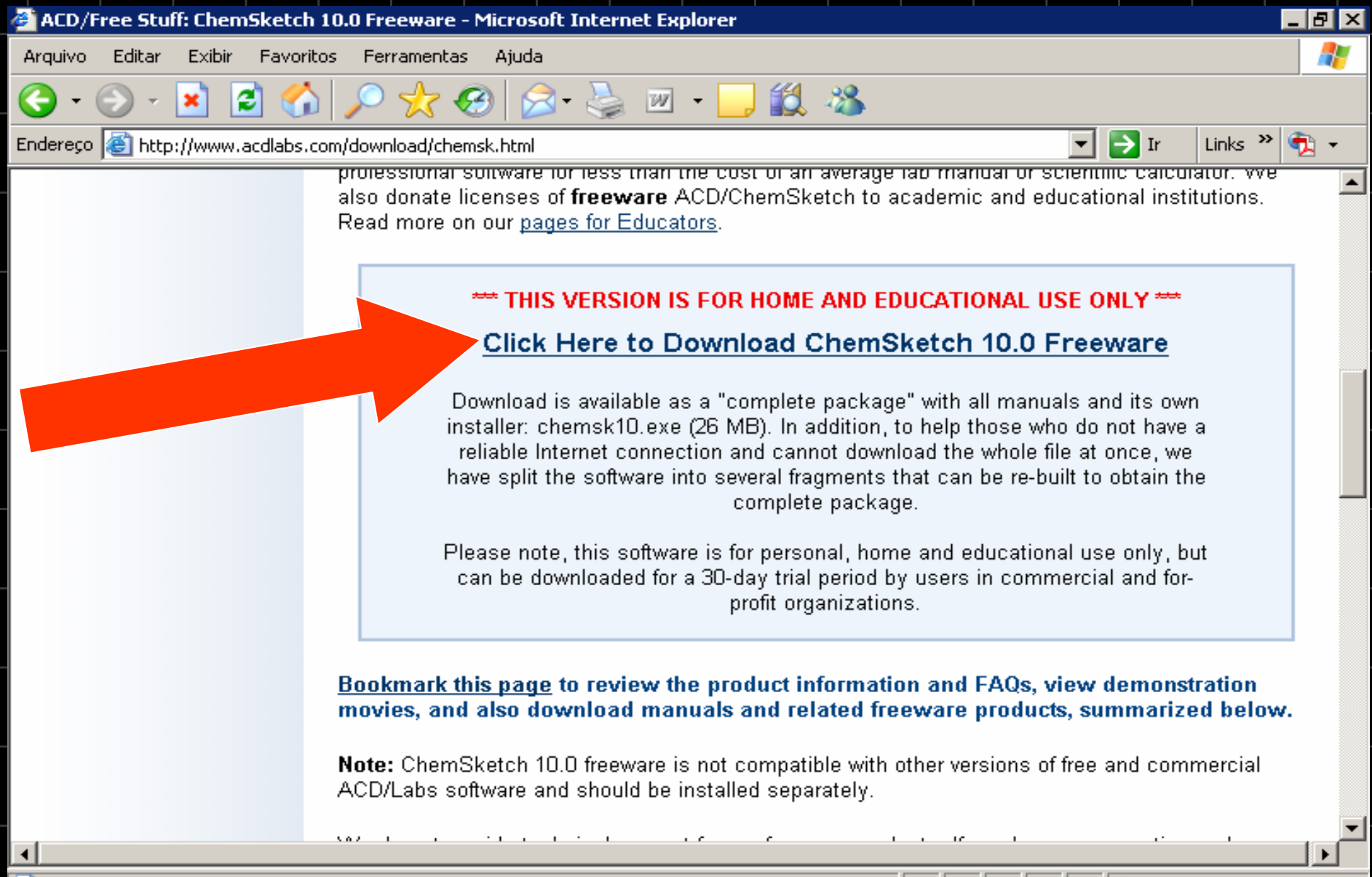
NEW—September 2006: [ChemSketch 10.0 Freeware](#) is now available for download

Freeware* (available for personal home and educational usage only)

	ChemSketch 10.0 Freeware	Windows	05-Sep-06
<input type="radio"/>	ChemBasic for ChemSketch 10.0 (includes updated GOODIES package)	Windows	05-Sep-06
<input type="radio"/>	Column Selector for ACD/ChemSketch	Windows	08-June-06
	InChI ChemBasic Add-in (for ACD/ChemSketch version 7.0 and earlier)	Windows	06-May-05
	TLC Plate Tool for ChemSketch	Windows	15-Jun-05

Professors & Webmasters:
Let your web visitors
know about
[ACD/ChemSketch freeware!](#)

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



ACD/Free Stuff: ChemSketch 10.0 Freeware - Microsoft Internet Explorer

Arquivo Editar Exibir Favoritos Ferramentas Ajuda

Endereço <http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html> Ir Links

professional software for less than the cost of an average lab manual or scientific calculator. We also donate licenses of **freeware** ACD/ChemSketch to academic and educational institutions. Read more on our [pages for Educators](#).

***** THIS VERSION IS FOR HOME AND EDUCATIONAL USE ONLY *****

[Click Here to Download ChemSketch 10.0 Freeware](#)

Download is available as a "complete package" with all manuals and its own installer: chemsk10.exe (26 MB). In addition, to help those who do not have a reliable Internet connection and cannot download the whole file at once, we have split the software into several fragments that can be re-built to obtain the complete package.

Please note, this software is for personal, home and educational use only, but can be downloaded for a 30-day trial period by users in commercial and for-profit organizations.

Bookmark this page to review the product information and FAQs, view demonstration movies, and also download manuals and related freeware products, summarized below.

Note: ChemSketch 10.0 freeware is not compatible with other versions of free and commercial ACD/Labs software and should be installed separately.

■ Fazendo o registro e submetendo o formulário.

The ACD/Labs Mailing List - Microsoft Internet Explorer

Arquivo Editar Exibir Favoritos Ferramentas Ajuda

Endereço <http://www.acdlabs.com/servlets/User?pr=chsk100&retdoc=/servlets/UserAuth&action=download> Ir Links

Advanced Chemistry Development

[Products](#) [Solutions](#) [Support](#) [Online Services](#) [Resources](#) [Downloads](#) [Events](#) [About ACD/Labs](#)

Web User Registration

Welcome to the ACD/Labs Web User Registration Page. Please take a few moments to complete the form below. As a registered user, you will be entitled to download free software and subscribe to the electronic newsletters according to your professional interests.

Fields marked by * are mandatory.

Your e-mail address: *

Enter a password: *

Please note: Your e-mail address becomes your unique username that is easy to remember. Please double check that it is entered correctly - one typo and we will not be able to communicate with you. Also, if you happen to forget your password, we can have it

■ Criando um registro para baixar o software.

ACD/Labs Download Request - Microsoft Internet Explorer

Arquivo Editar Exibir Favoritos Ferramentas Ajuda

Endereço <http://www.acdlabs.com/servlets/UserAuth?pr=chsk100> Ir Links

[Free Stuff](#)

Download ChemSketch 10.0 Freeware

Thank you for your interest in ChemSketch 10.0 Freeware. If this is not the product you want to download, you can return to the [main download area](#).

Please complete the following three steps to download ChemSketch 10.0 Freeware:

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 only your password and we will remember you.
2. Accept the license agreement.
3. Download the software.

E-mail Address:

Password:

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

download page.' A large red arrow points to the 'download page' link. At the bottom, there is a search bar, a footer with navigation links, and a copyright notice: 'Copyright © 1996 - 2006 Advanced Chemistry Development. All rights reserved.' The date 'This page was last updated 8 June 2004' is also visible."/>

ACD/Labs Home Page Successful Operation - Microsoft Internet Explorer

Arquivo Editar Exibir Favoritos Ferramentas Ajuda

Endereço <http://www.acdlabs.com/users/regsuccess.jsp/NSID-www.acdlabs.com-7f5a55b1%3A10df50b3041%3A-7c74> Ir Links

Advanced Chemistry Development
Products Solutions Support Online Services Resources Downloads Events About ACD/Labs

Welcome to the Club!

You have successfully registered yourself as a member of ACD/Labs Online Club. As a club member, you are entitled to free software downloads and newsletter subscriptions.

You can now proceed to [download page](#).

Search

Products | Solutions | Support
Online Services | Resources
About Us | Downloads | Events
Site Map | Contact Us

This page was last updated 8 June 2004

Copyright © 1996 - 2006 Advanced Chemistry Development. All rights reserved.

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

ACD/ChemSketch 10.0 Freeware - Microsoft Internet Explorer

Arquivo Editar Exibir Favoritos Ferramentas Ajuda

Endereço <http://www.acdlabs.com/servlets/Download> Ir Links

- part 1 - **chemsk10.part1.exe** of 7,000,000 bytes
- part 2 - **chemsk10.part2.rar** of 7,000,000 bytes
- part 3 - **chemsk10.part3.rar** of 7,000,000 bytes, and
- part 4 - **chemsk10.part4.rar** of 4,946,315 bytes

To unpack multipart self-extracting archive, download 4 split package files to the same folder and then run **chemsk10.part1.exe**. Specify your destination folder. After unpacking, open this folder and double-click **chemsk10.exe** to install ChemSketch.

Download site	Comments
Site 1	
chemsk10.exe	All-in-one 26 MB file
chemsk10.part1.exe	Part 1 of the split package (6.67 MB)
chemsk10.part2.rar	Part 2 of the split package (6.67 MB)
chemsk10.part3.rar	Part 3 of the split package (6.67 MB)
chemsk10.part4.rar	Part 4 of the split package (4.71 MB)

Note: ChemSketch 10.0 Freeware is not compatible with any commercial ACD/Labs software or earlier versions of ACD/Labs freeware, and should be installed separately to a different folder on your computer.

■ Aceite para efetuar o download.

condition of this Agreement is held by a court of competent jurisdiction to be invalid, void, or unenforceable, the remainder of the provisions shall remain in full force and effect, and in no way shall be affected, impaired or invalidated. This Agreement will not be governed by the United Nations Convention on Contracts for the International Sale of Goods, the application of which is expressly excluded. This Agreement is the complete contract between the parties and supersedes any prior or contemporaneous agreement whether written or oral, and its terms shall not be varied, supplemented, qualified, or interpreted by any prior course of dealing between the Licensee and ACD/LABS. Any subsequent agreement which modifies any part of this Agreement must be in writing and signed by both parties. Upon any termination or expiry of this Agreement, provisions relating to ACD/LABS' intellectual property rights, limitations of liability and any other provisions which, by their nature, are intended to survive, shall survive any such termination or expiry.

Advanced Chemistry Development Inc., www.acdlabs.com.

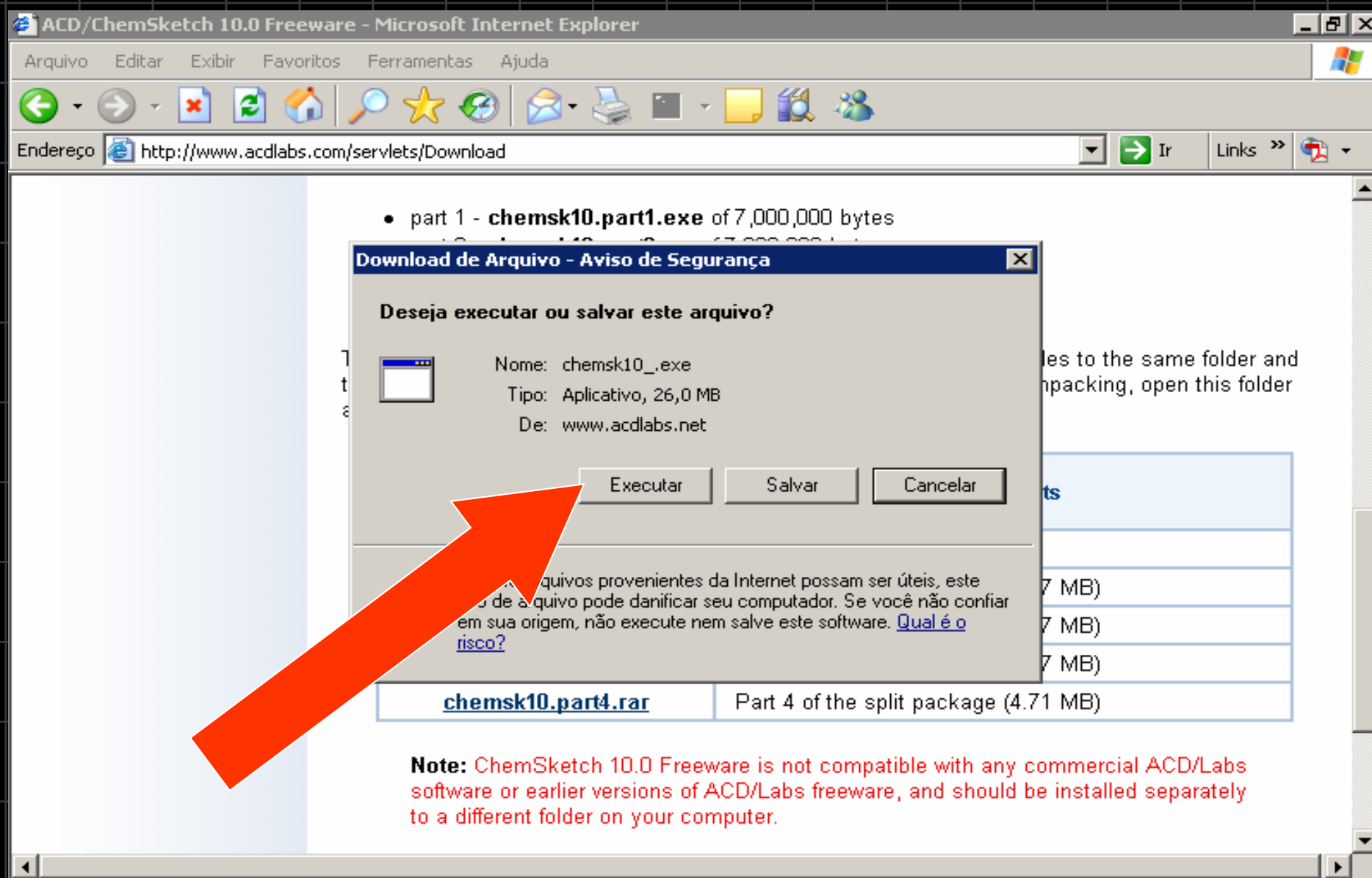
Products | Support
Online resources
Abstracts | Events
Contact Us

[TOP](#)

This page was last updated 26 May 2004

Copyright © 1996 - 2006 Advanced Chemistry Development All rights reserved

■ Salvando o arquivo.



ACD/ChemSketch 10.0 Freeware - Microsoft Internet Explorer

Arquivo Editar Exibir Favoritos Ferramentas Ajuda

Endereço <http://www.acdlabs.com/servlets/Download> Ir Links

- part 1 - **chemsk10.part1.exe** of 7,000,000 bytes

Download de Arquivo - Aviso de Segurança

Deseja executar ou salvar este arquivo?

Nome: chemsk10_.exe
Tipo: Aplicativo, 26,0 MB
De: www.acdlabs.net

Executar Salvar Cancelar

Arquivos provenientes da Internet podem ser úteis, este arquivo pode danificar seu computador. Se você não confiar em sua origem, não execute nem salve este software. [Qual é o risco?](#)

chemsk10.part4.rar	Part 4 of the split package (4.71 MB)
------------------------------------	---------------------------------------

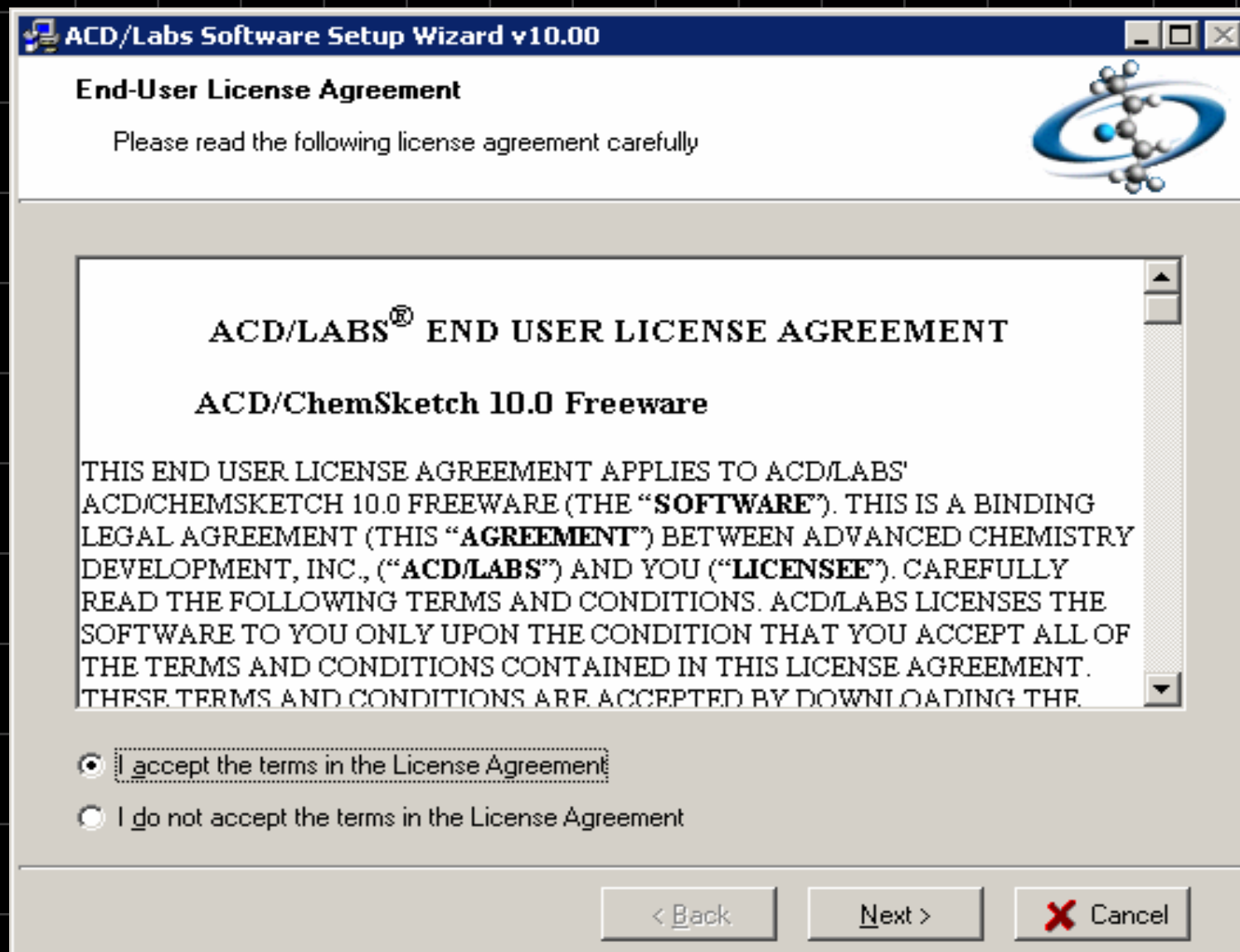
Note: ChemSketch 10.0 Freeware is not compatible with any commercial ACD/Labs software or earlier versions of ACD/Labs freeware, and should be installed separately to a different folder on your computer.

Executando a instalação.

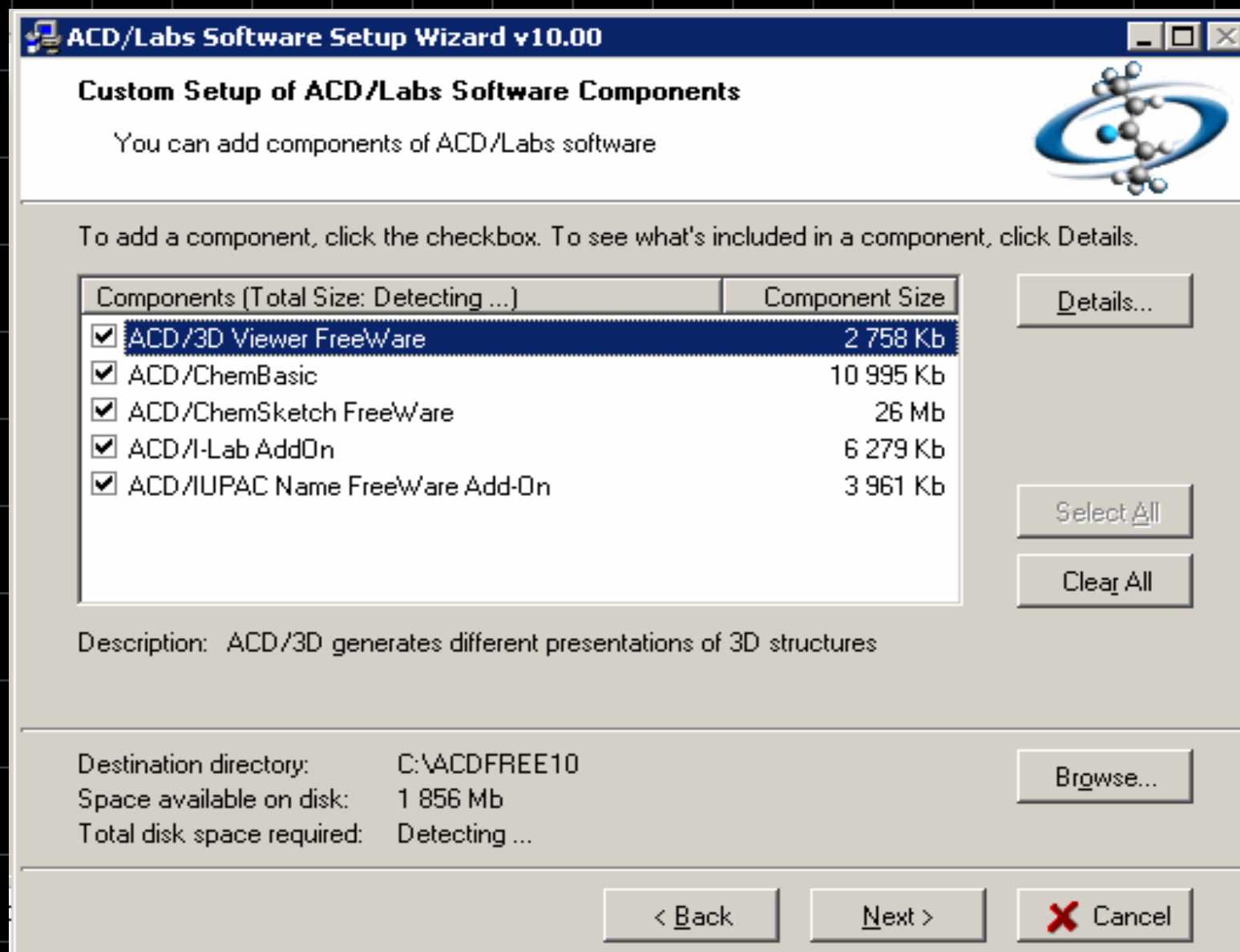
- Execute o instalador chemsk10.exe no diretório em que foi gravado.



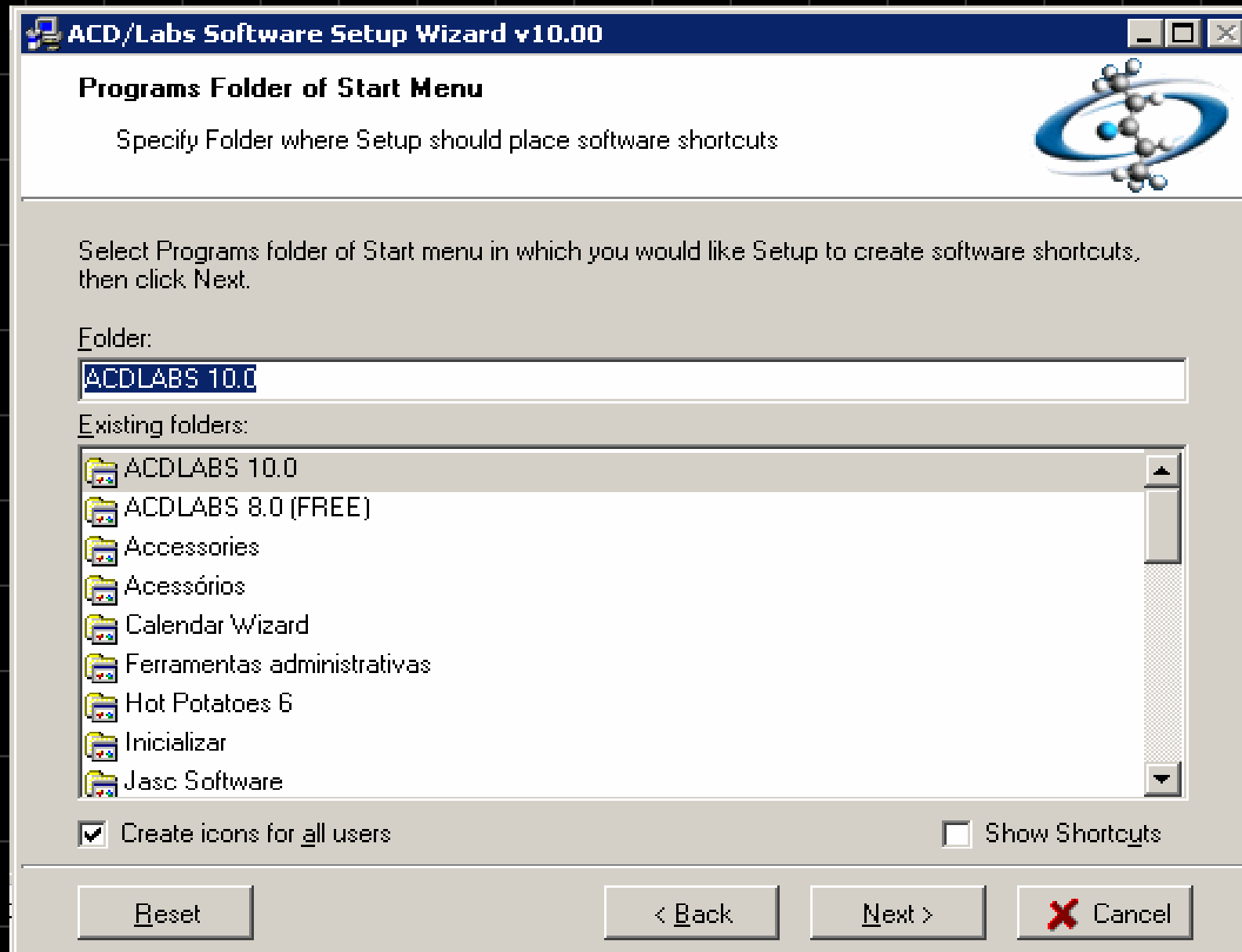
- Aceite para que a instalação seja realizada.



- Veja se todos estão escolhidos e clique para continuar.

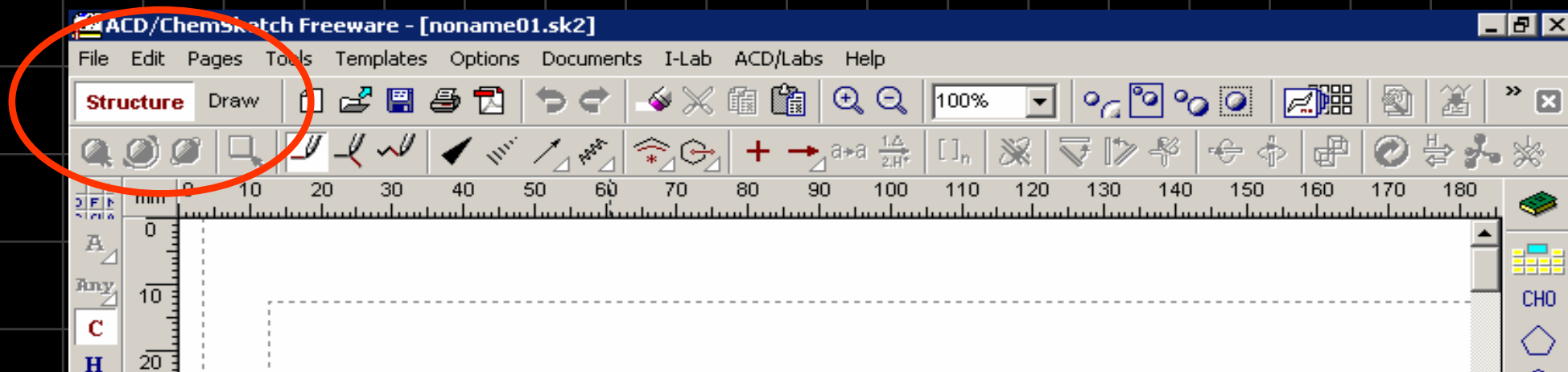


■ Definindo o local da instalação.



Utilizando o software ChemSketch®

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



ACD/ChemSketch Freeware - [noname01.sk2]

File Edit Pages Tools Templates Options Documents I-Lab ACD/Labs Help

Structure Draw

100%

10 20 30 40 50 60 70 80 90 100 110 120 130 140 150 160 170 180

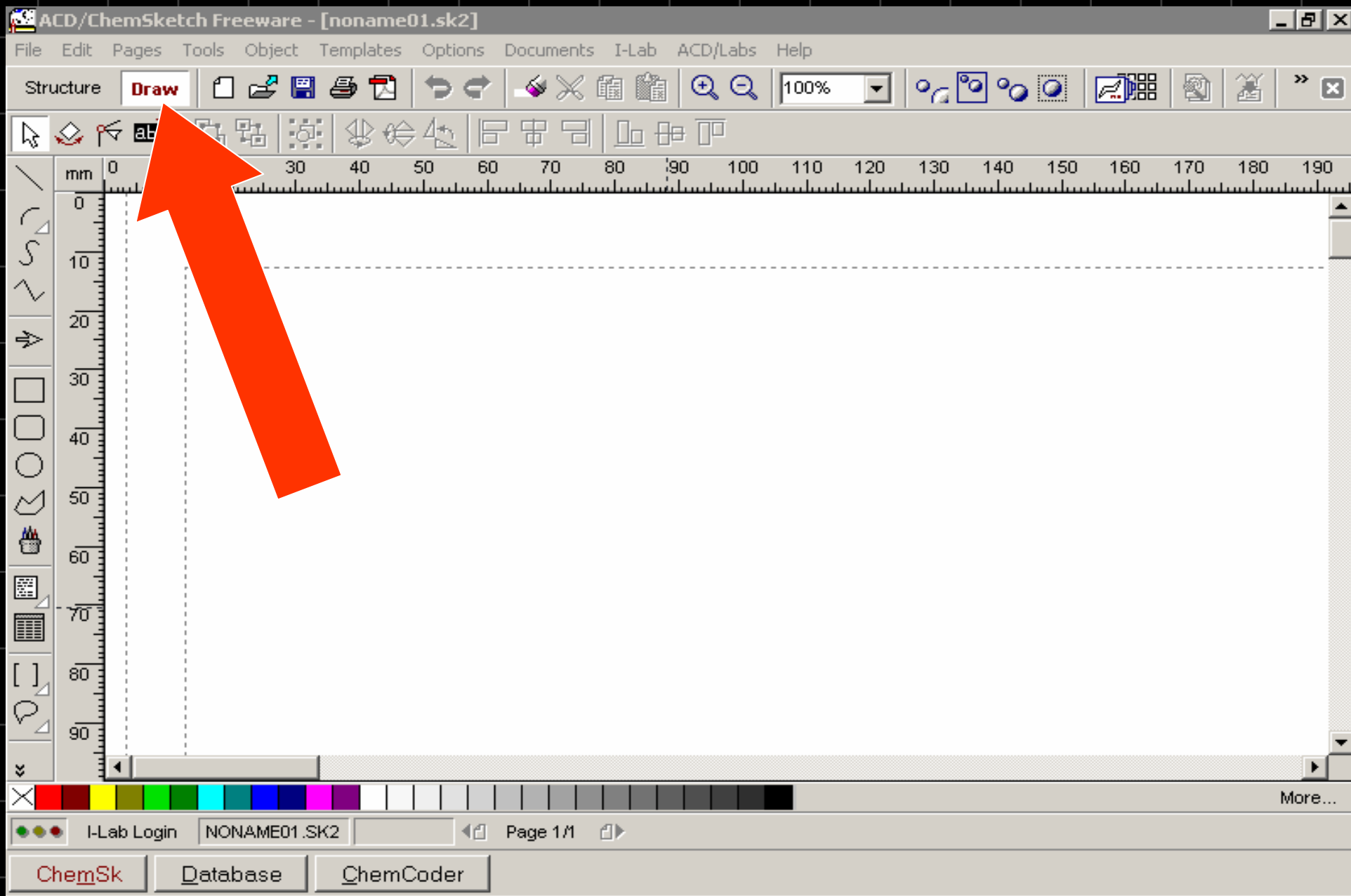
A
Any
C
H
N
O
P
S
Cl
Br
Na
K
abc
pl
+

CHO
pentagon
hexagon
benzene
square
COOH

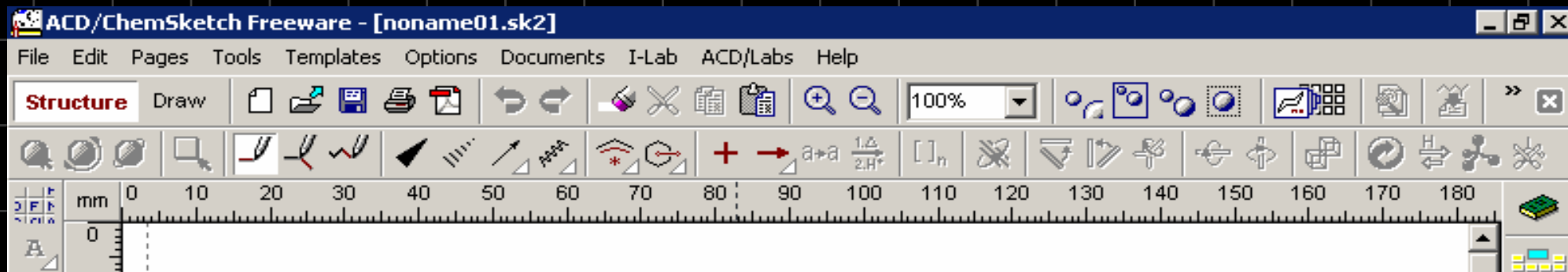
More...

I-Lab Login NONAME01.SK2 Page 1/1 Formula Weight

ChemSk Database ChemCoder



- 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.



The image shows the ACD/ChemSketch software interface with several components labeled:

- Title bar:** ACD/ChemSketch [Untitled-1.sk2]
- Menu bar:** File Edit Pages Tools Templates Options I-Lab ACD/Labs Help
- General toolbar:** Structure Draw [File icons] [Undo/Redo] [Zoom 100%]
- ChemBasic toolbar:** [Clipboard icons] [SDF] [H+F] [C-H] [IM]
- Structure toolbar:** [Selection tools] [Bonding tools] [Reaction tools]
- Atoms toolbar:** [C] [H] [N] [O]
- Reference toolbar:** [Cyclopentane] [COOH] [n-C₄] [n-C₃]
- Workspace:** Contains a chemical structure of a five-membered ring with an oxygen atom and three hydroxyl groups (HO, OH, OH).
- Color Palette:** [Color selection tools] [Color palette]
- Status bar:** I-Lab Login Modified Page 1/1 Fragments: 1 Formula Weight

- **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 Chems sketch no modo Estrutura.
- **Barra Geral:** Localizada abaixo da barra de menu, inclui ferramentas que estão presente em ambos modos de trabalho e o ajudará com tarefas pertinente para ambos os modos como: abrindo e fechando arquivos, operações de recortar e colar, aumentando e diminuindo zoom, dente outros diversos comandos.

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

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

ACD/ChemSketch 2] File Edit Pages Tools Object Templates I-Lab ACD/Labs Help

Structure Draw General toolbar ChemBasic to

Editing toolbar

mm 0 10 20 30 40 50 60 70 80 90 100 110 120 130

Energy ΔG^\ddagger ΔG p.22

Reaction Coordinate
Reaction Mechanism Diagram

Workspace

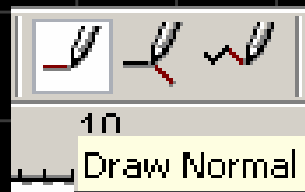
Color Palette

I-Lab Login Status bar Modified Page 1/1

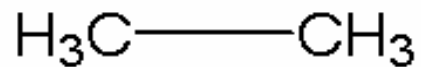
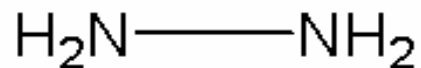
- **Barra de Desenhos:** Localizada a esquerda da tela, possui diversas ferramentas para desenho, desde ciclos, quadrados, setas além de inúmeras outras possibilidades.
- **Barra de Edição:** A barra de Edição permite manipular e alterar os desenhos no que diz respeito à posição, tamanho, ordem, etc.

Construindo uma estrutura

■ Draw Normal

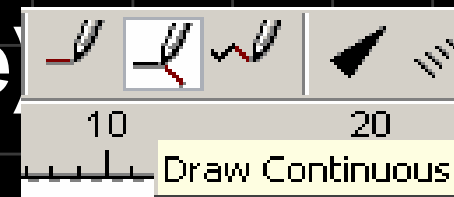


selecione o átomo na barra de átomos e construa o desenho de uma estrutura simples. Para produzir uma ligação dupla, clique mais uma vez em cima da ligação e a tripla, duas vezes.

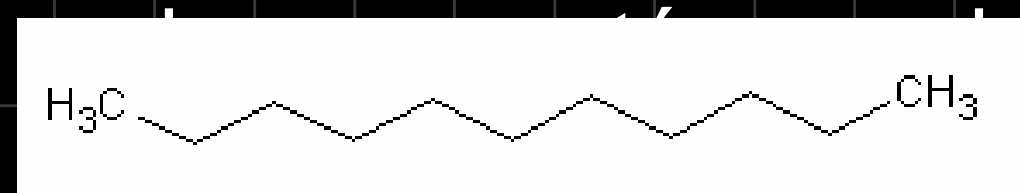
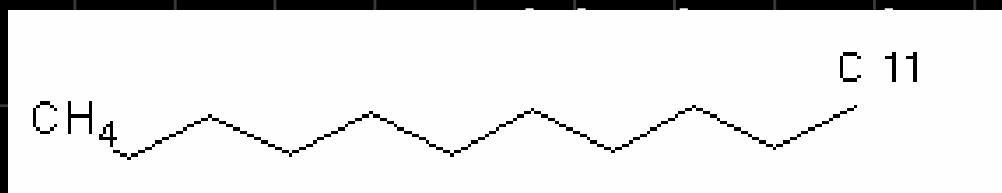


Para copiar um composto produzido no software: Menu Edit → Select all → Edit → copy (está na área de transferência).

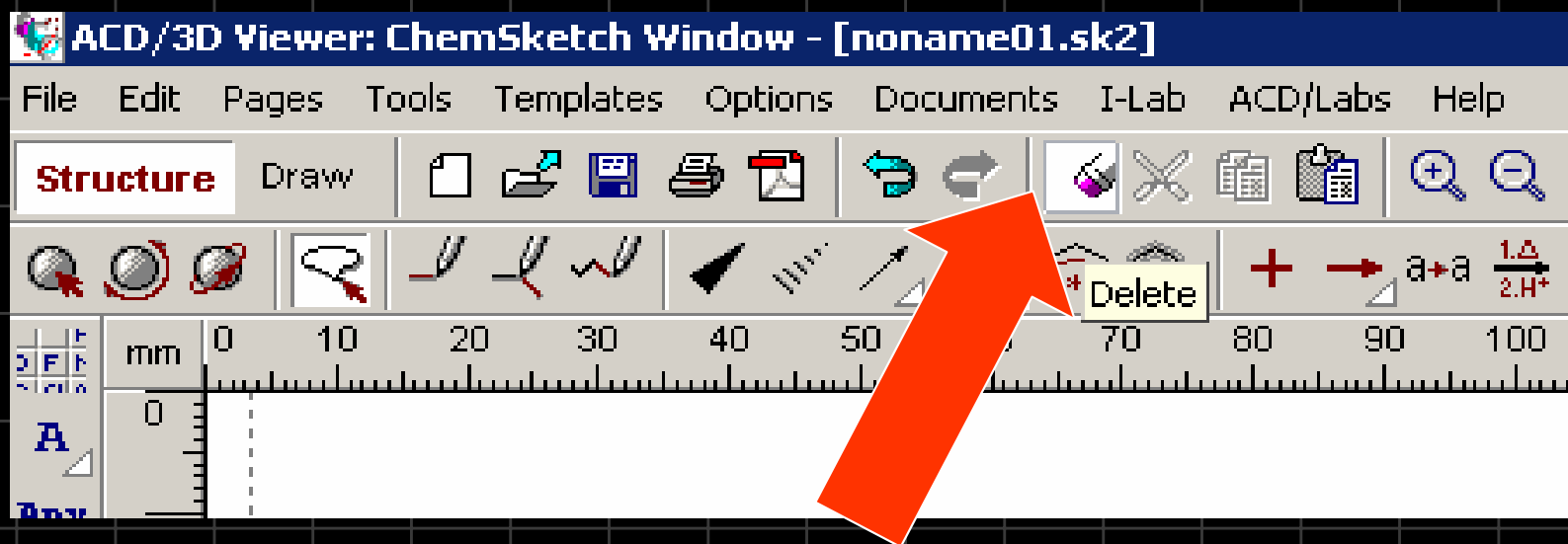
■ Draw Continuous (Zigue-Zague)



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

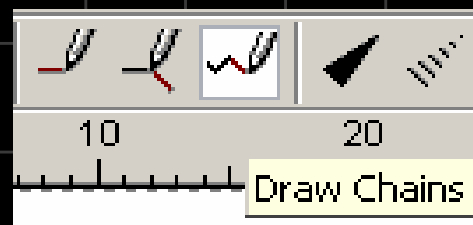


Clique na primeira figura e apague dois átomos de carbono, utilizando a ferramenta delete (figura abaixo). Basta selecionar a ferramenta e clicar nos carbonos que deseja apagar.

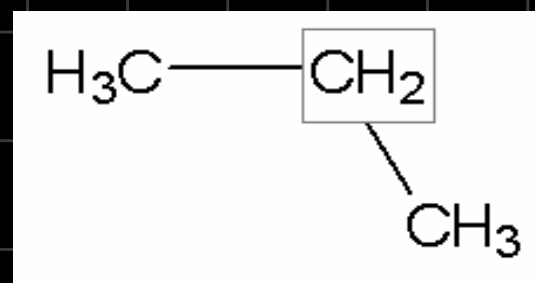


File → Close and Return to Microsoft Word.
Selecione Yes, Salvando o documento novamente.

■ Draw Chains

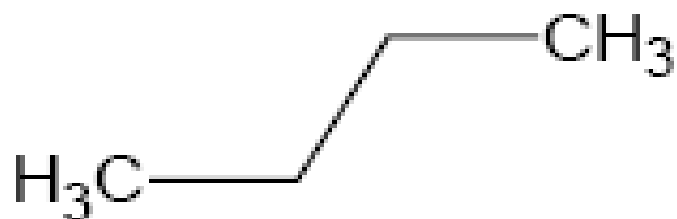


permite o desenho de uma estrutura orgânica contínua de modo que se determinam os pontos e a molécula vai se completando automaticamente

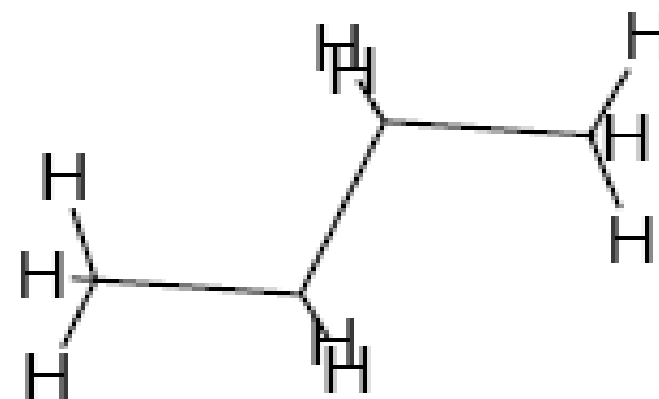


■ 3D Optimization

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



antes



depois

Visualização em 3D

■ Moléculas em 3D

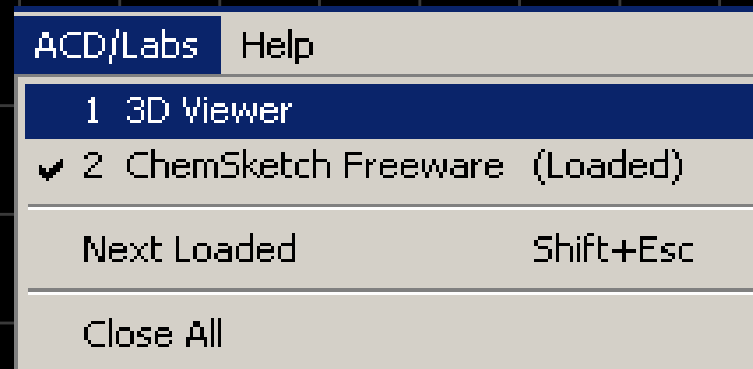
Além da estrutura plana, o ChemSketch possui um módulo de geração e visualização de moléculas em 3D.

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

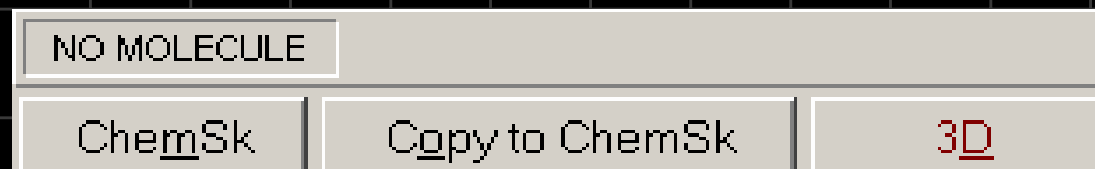
- 1-Desenhe a estrutura plana da molécula a qual deseja-se obter a visualização 3D.

2-Otimize as ligações na conformação 3D.

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

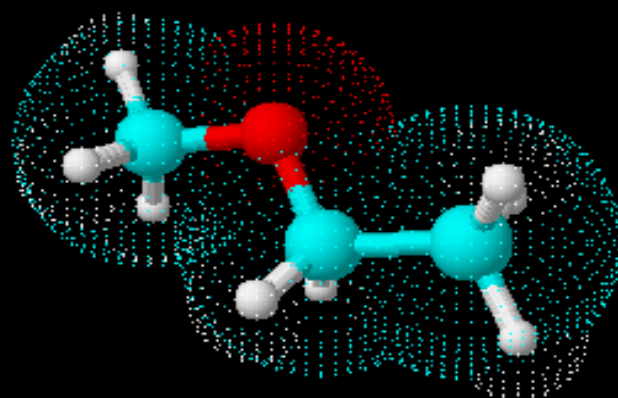



Para alternar entre o modo 3D e a tela principal do ChemSketch, utilize os botões localizados na parte inferior da tela.



ACD/3D Viewer - [noname02.s3d]

File Edit View Tools Options ACD/Labs Help



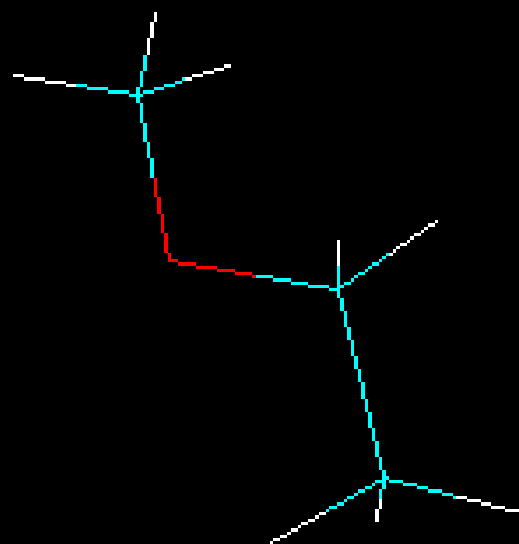
NONAME02.S3D C₃H₈O

ChemSk Copy to ChemSk 3D

Tipos de representação.



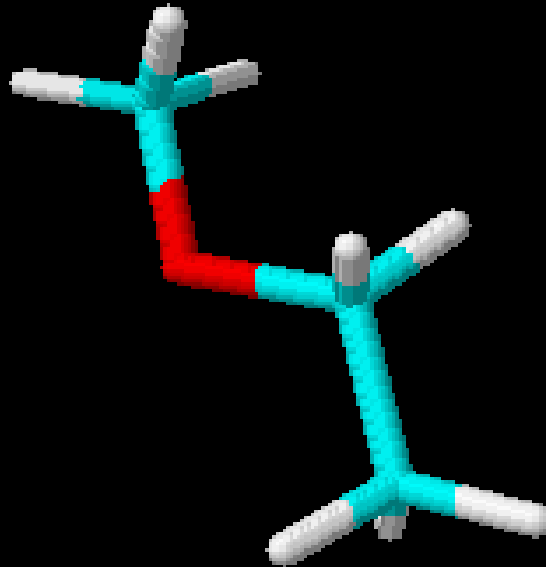
- **Wireframe:** Tipo de representação 3D que mostra a molécula na forma de “linhas”.



Tipos de representação.



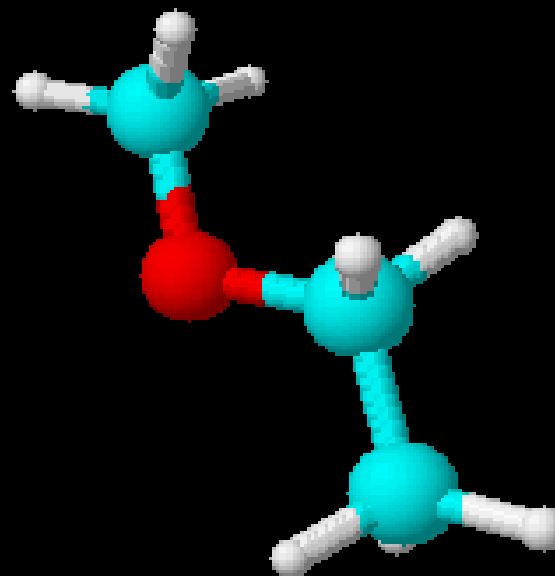
- **Sticks:** Tipo de representação 3D que mostra a molécula na forma de “varas”.



Tipos de representação.



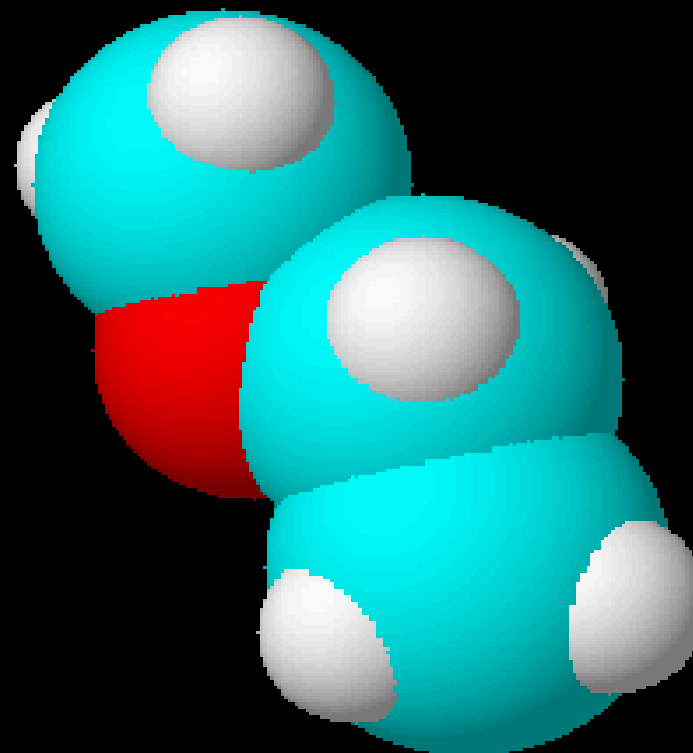
- **Balls & Sticks:** Tipo de representação 3D que mostra a molécula na forma “bolas e varas”.



Tipos de representação.



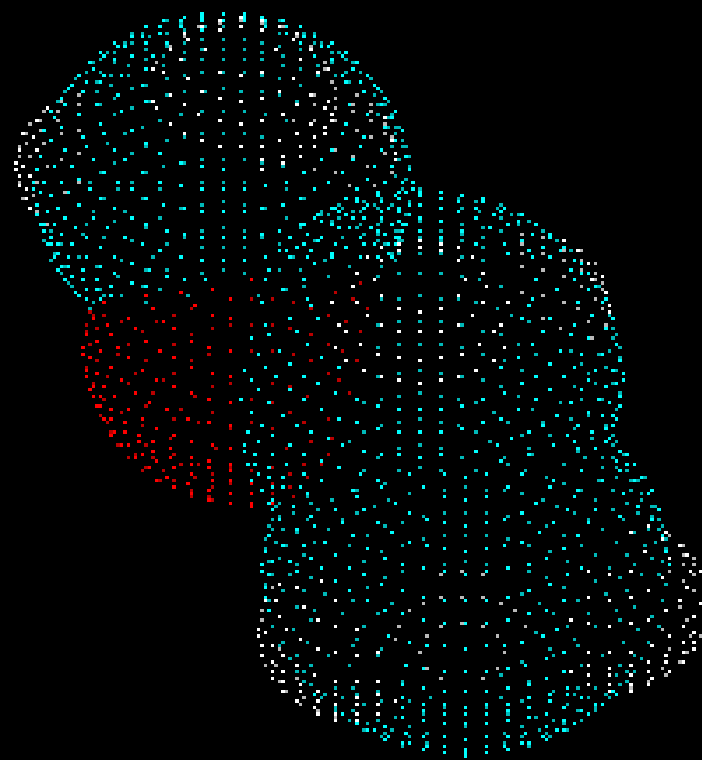
- **Spacefill:** Tipo de representação 3D que mostra a os espaços vazios da molécula “preenchidos” (semelhante ao modelo Stuart).



Tipos de representação.



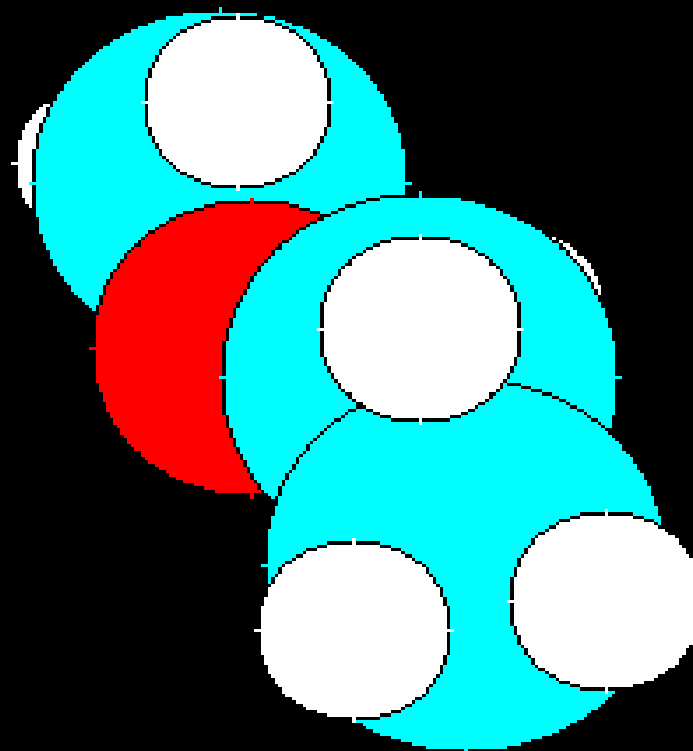
- **Dots only:** Tipo de representação 3D que mostra “somente pontos” representando os átomos e ligações da molécula.



Tipos de representação.



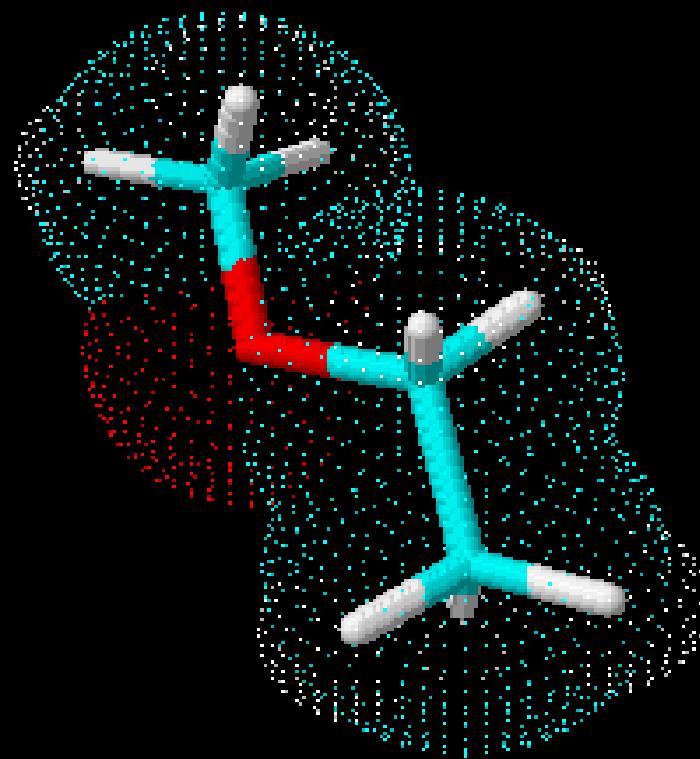
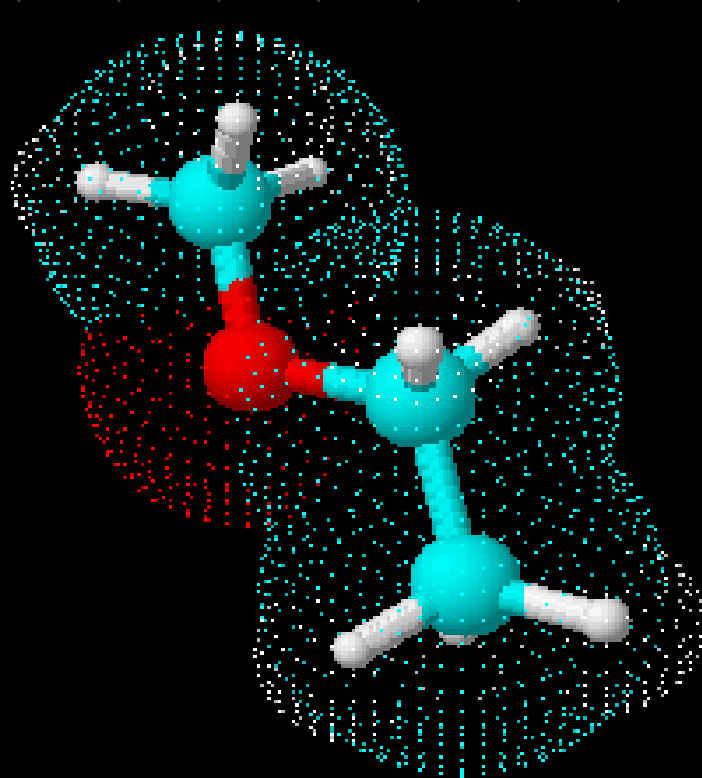
- **Disks:** Tipo de representação 3D que mostra os átomos na forma de discos, muito semelhante a forma Spacefill, porém sem o efeito 3D.



Tipos de representação.

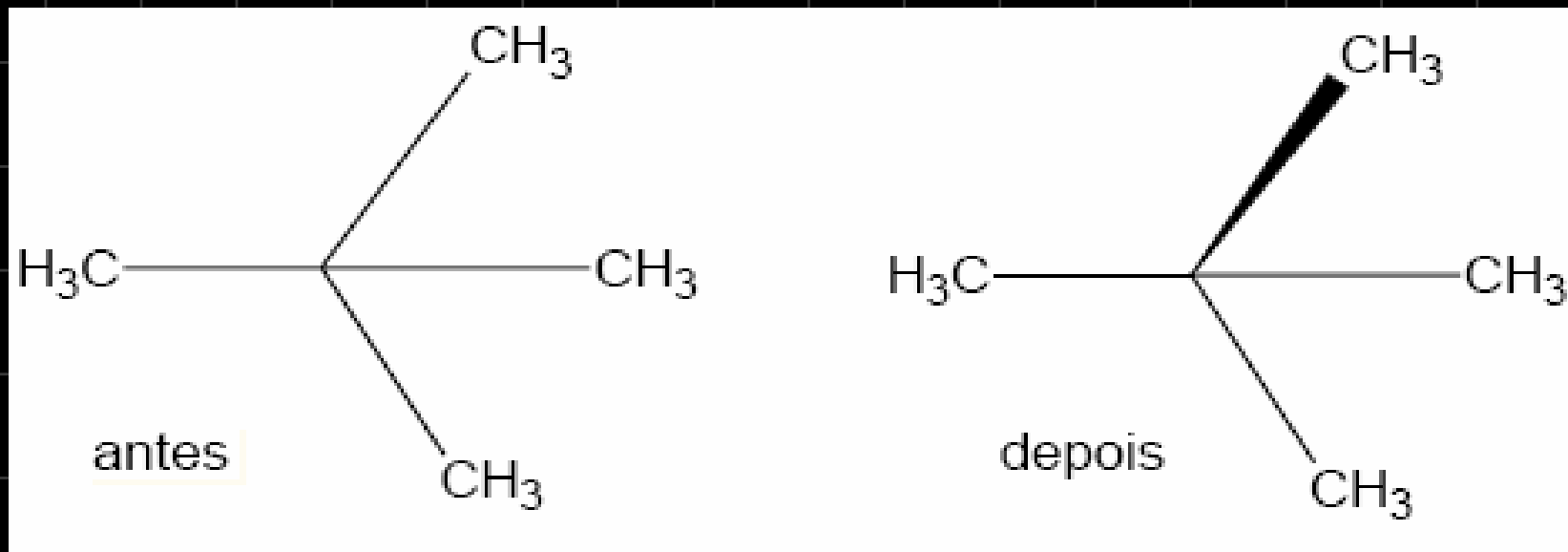


- **With Dots:** Marcado mostra os “pontos” da representação 3D em qualquer forma de visualização.



■ Up Stereo Bonds

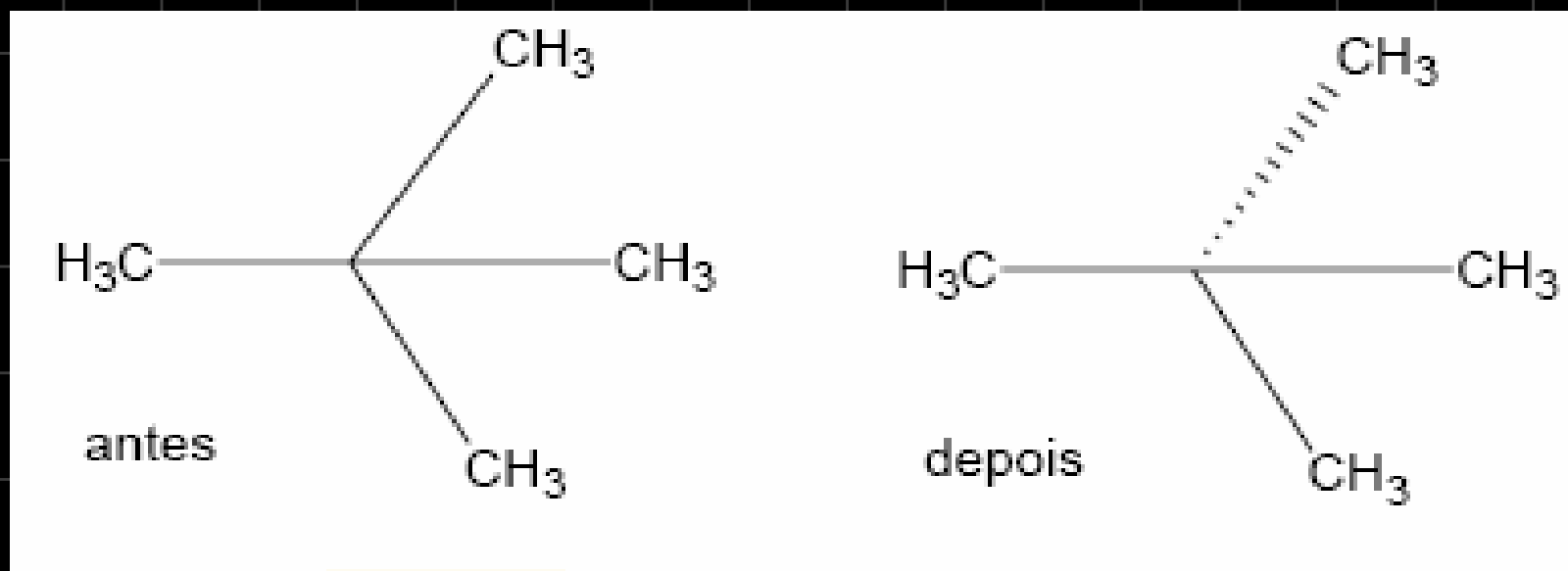
permite que seja aplicada a ligação entre átomos uma representação que significa que o átomo que possui a ponta mais grossa está para fora do plano da área de trabalho.

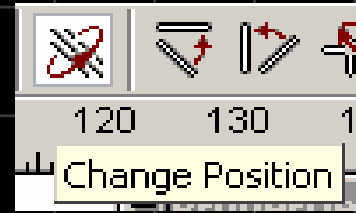


■ Dow Stereo Bonds



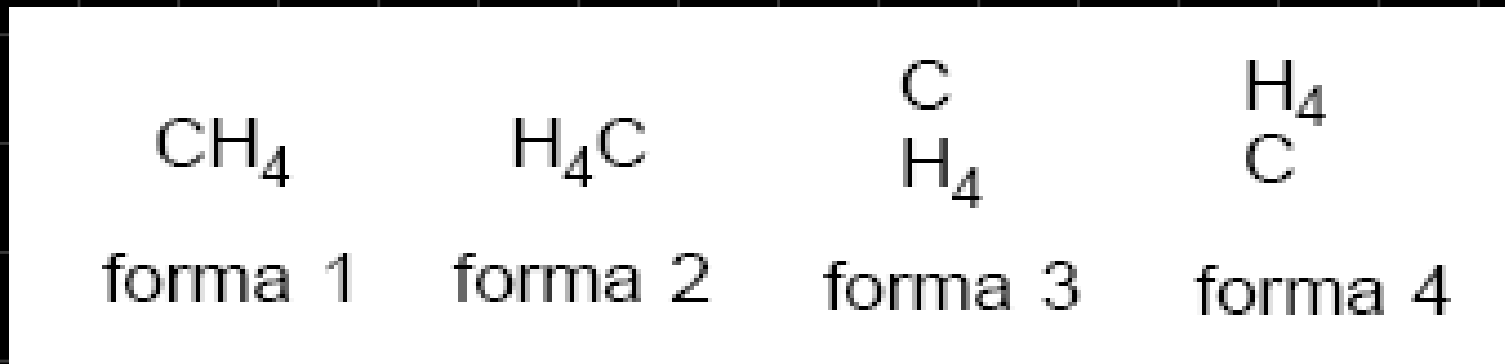
permite que seja aplicada a ligação entre átomos uma representação que o átomo que possui a ponta mais grossa estaria para dentro do plano da área de trabalho.





■ Chance Position

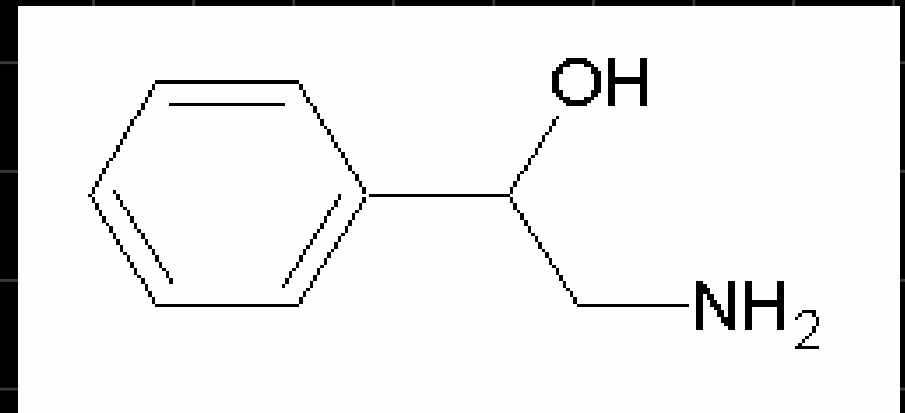
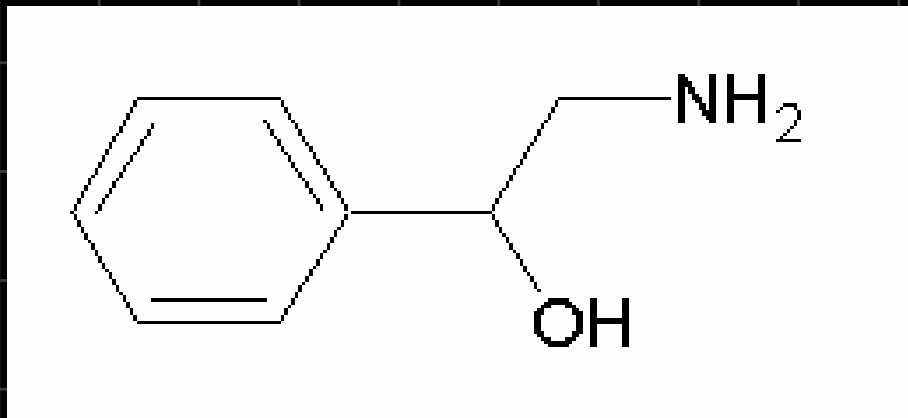
permite mudar a posição dos átomos ligados ao átomo principal. Basta selecionar a ferramenta e clique em cima para alterar.





■ Flip on bond:

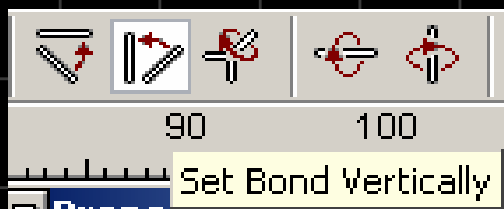
permite que giramos a molécula a partir de um referencial ou ligação. Para isso basta selecionar a ferramenta e clicar no composto.



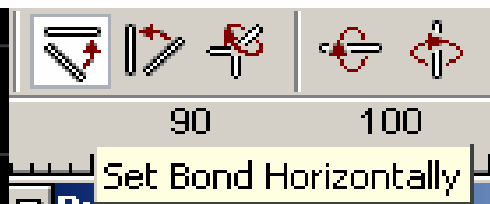
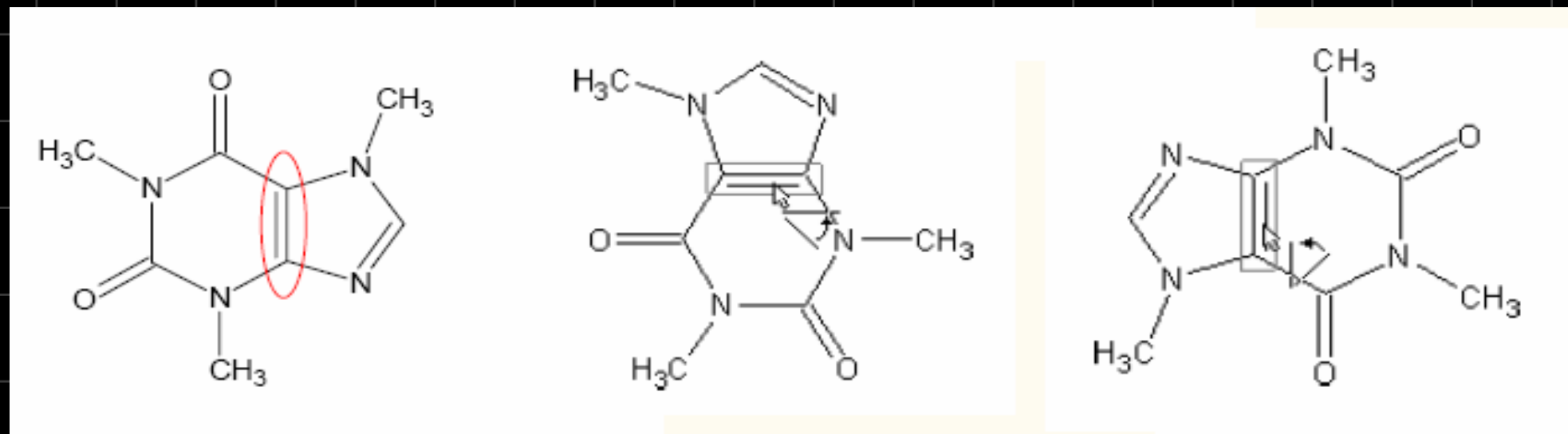
Efedrina



- Set Bond Horizontally permite alinhar a molécula na horizontal.

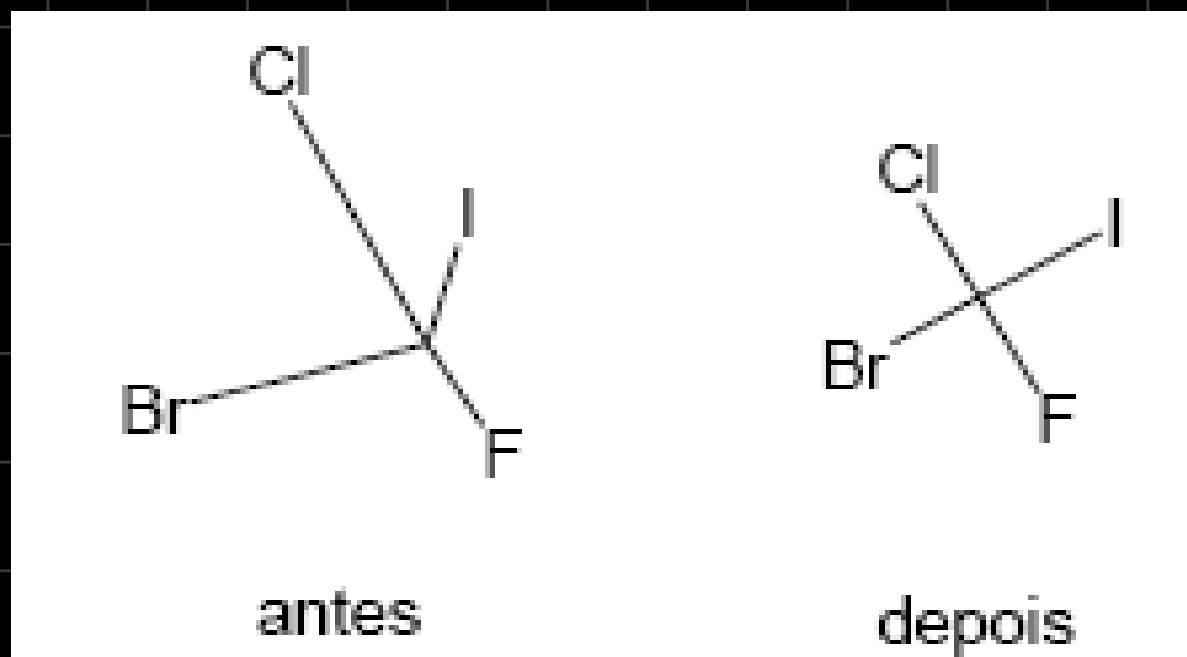


- Set Bond Vertically permite alinhar a molécula na vertical.

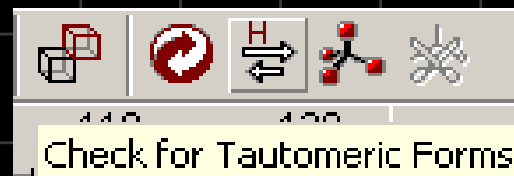


■ Clean Structure:

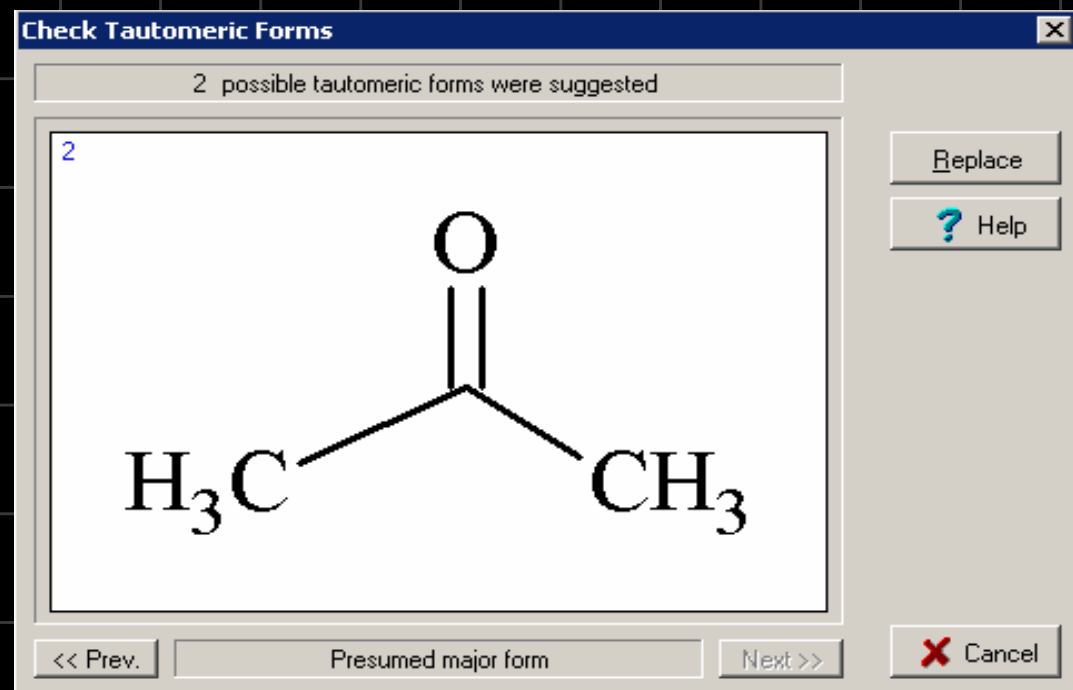
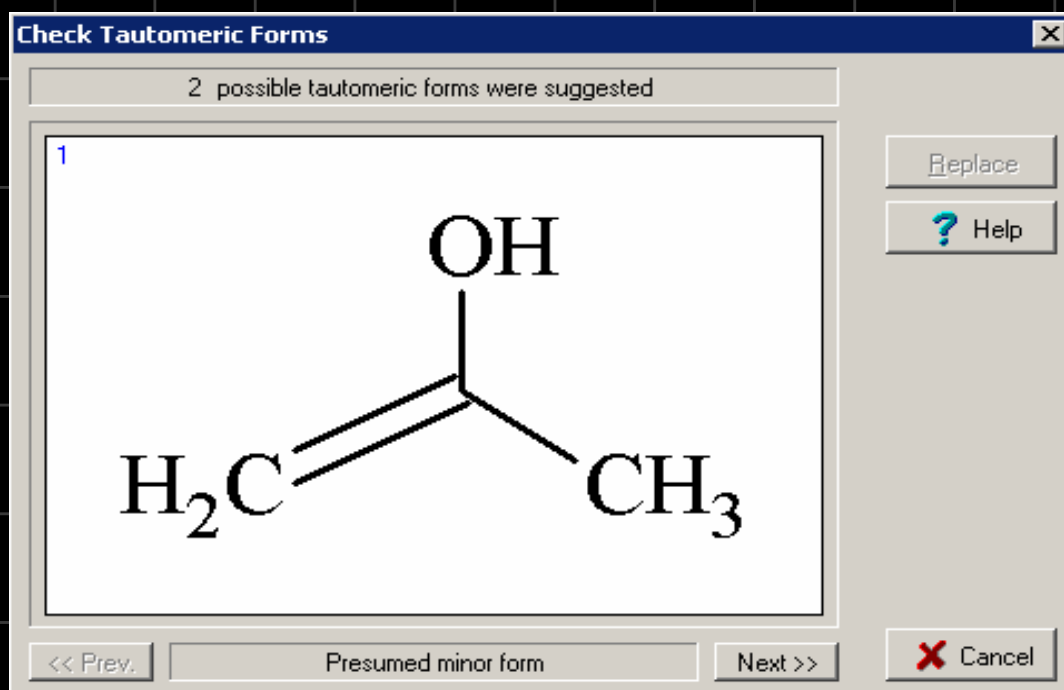
permite que a estrutura desenhada possua uma melhor proporcionalidade entre as ligações.



■ Check for Tautomeric Forms

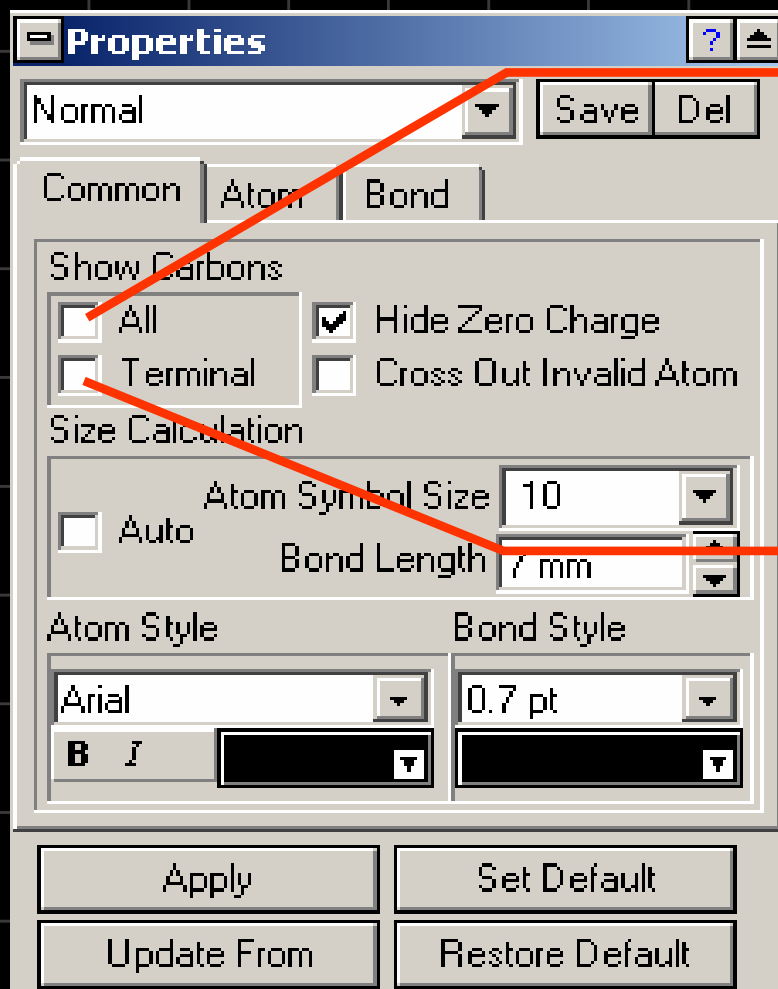


permite visualizar as formas tautoméricas (provenientes da isomeria de tautomeria) do composto



Alterando formatação dos Átomos e Moléculas

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

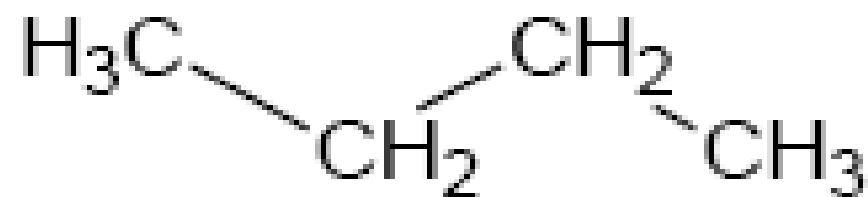


quando marcada, faz com que sejam mostrados os carbonos na molécula.

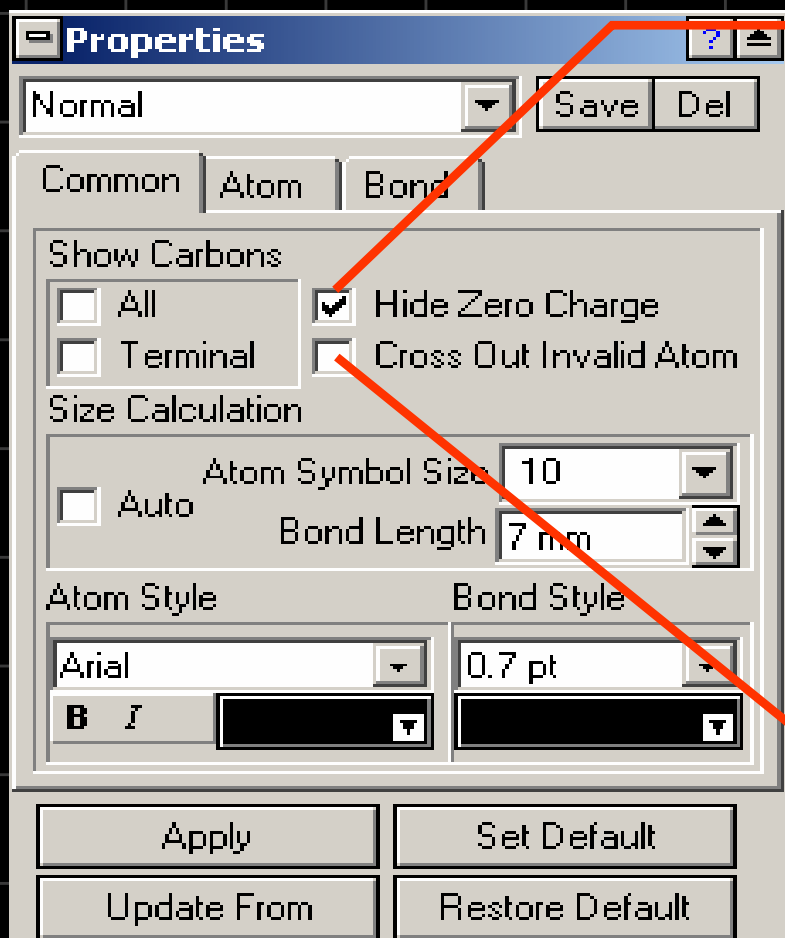
quando marcada, faz com que somente os átomos dos vértices da molécula são mostrados.



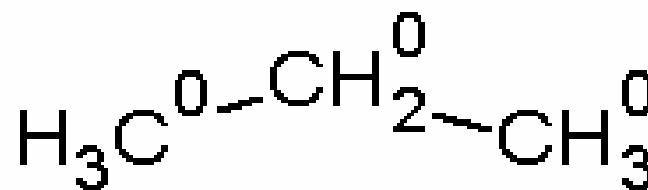
Opção terminal Marcada



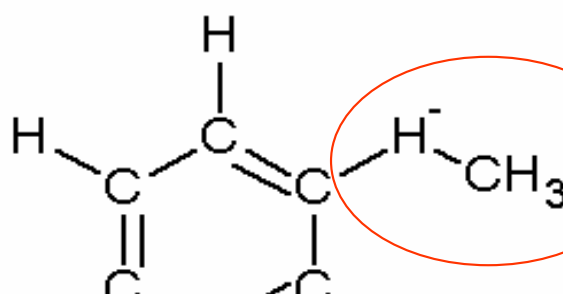
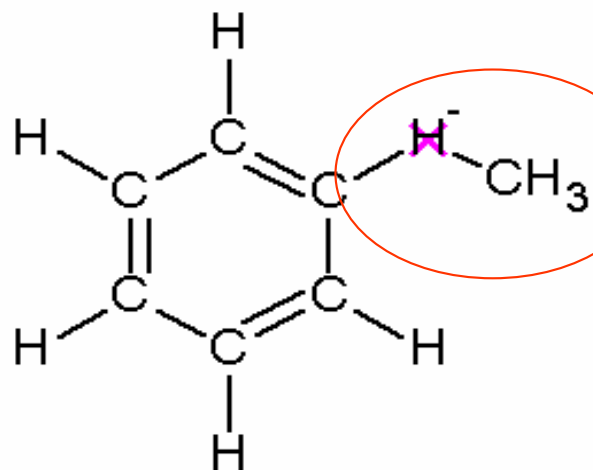
Opção All marcada

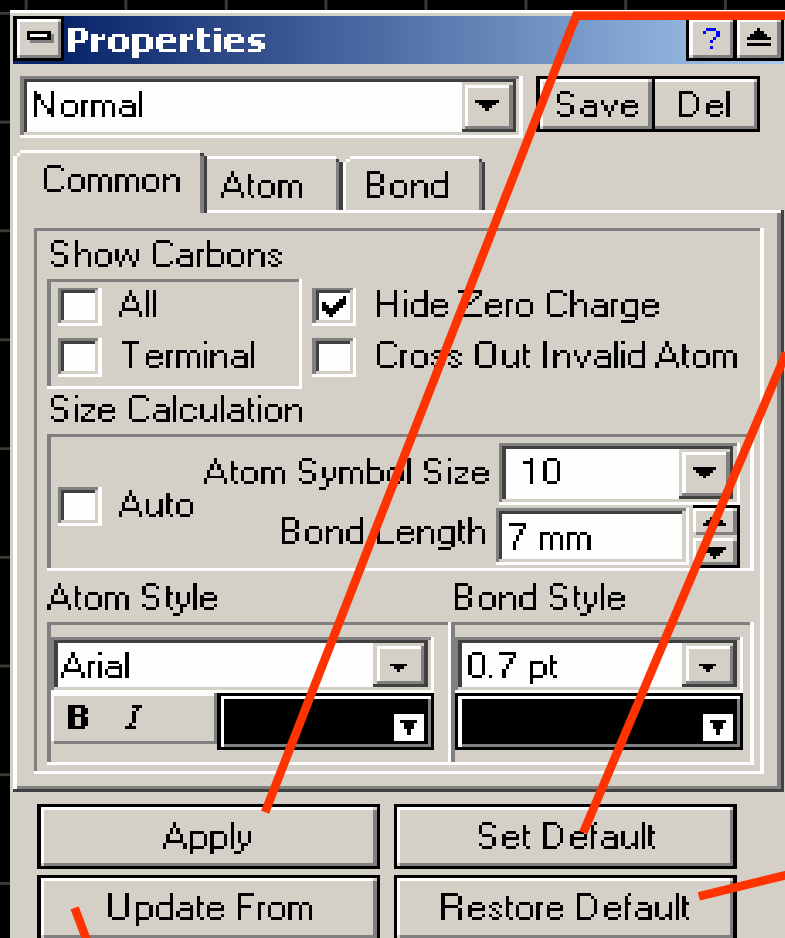


Quando marcada esconde o Nox "0" das entidades químicas. Caso a opção esteja desmarcada, o Nox "0" passa a ser colocado automaticamente.



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





Aplica as alterações feitas na seleção de alguma entidade química.

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

Permite restaurar as configurações padrão do ChemSketch.

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

Referências bibliográficas

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