



UNIVERSIDADE ESTADUAL DA PARAÍBA –
UEPB

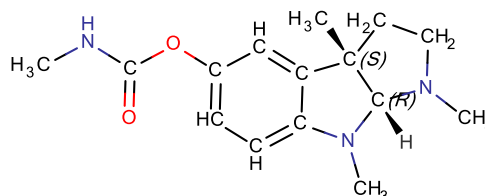
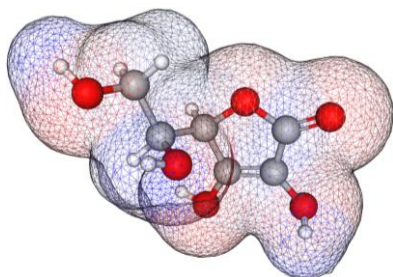


CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA – CCT

Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e
Educação Matemática – PPGECEM

APOSTILA PARA DESENHO DE ESTRUTURAS COM O PROGRAMA MARVINSKETCH

 MarvinSketch



Autor: Carlos Helaidio Chaves da Costa

Introdução

O MarvinSketch é um software pertencente ao pacote MarvinBeans (2014), desenvolvido pela empresa CHEMAXON, que permite a construção de fórmulas (estrutural e molecular) e nomenclaturas de acordo com as regras da IUPAC. Com o uso dessa ferramenta é possível desenhar estruturas com uma visualização em 2D e 3D, como também cálculos de fórmula molecular, massa molecular e acesso ao mecanismo de correção de erros de ligação e estrutura (CHEMAXON, 2014). O pacote MarvinBeans possui o MarvinSpace, que permite manipular as moléculas em 3 (três) dimensões, destacando-se as propriedades atômicas assim como as propriedades resultantes das ligações químicas estabelecidas entre os elementos.

Desse modo, baseando-se nas discussões anteriores, criou-se um material, que será mostrado a seguir, sendo este produto do Mestrado Profissional em Ensino de Ciências e está dividido em 5 (cinco) partes:

1. Instalação: será mostrado os procedimentos para o download e instalação do pacote MarvinBeans, diretamente do endereço da empresa Chemaxon;
2. Ferramentas básicas e construção de estruturas: serão apresentadas as ferramentas básicas para o desenho de cadeias carbônicas, visualização de estruturas e determinação de dados quantitativos sobre as moléculas desenhadas;
3. Ferramentas de texto e desenho no contexto da classificação de cadeias: o usuário conhecerá as ferramentas de texto e desenho do MarvinSketch associadas ao conteúdo de classificação de cadeias carbônicas, assim como essas diferenças podem afetar as propriedades dos compostos orgânicos;
4. Funções, Radicais e Nomenclatura: serão apresentados como nomear as estruturas (de várias funções orgânicas), numerar as cadeias carbônicas e explorar os radicais orgânicos em sua estrutura e nomenclatura.
5. Isomeria, propriedades físicas e mecanismo de reação orgânica: usar as ferramentas do programa para destacar a polaridade das moléculas associando a solubilidade e ao ponto de fusão em seguida usando os recursos do programa iremos diferenciar os isômeros do ponto de vista plano e espacial e concluiremos com a montagem de uma reação orgânica simples de saponificação.

Em cada tópico estudado estarão presentes exercícios de aprendizagem para que o usuário tenha a oportunidade de verificar seus conhecimentos. O material não aborda todas as funções e todos os comandos presentes no programa mas pretende trazer para o professor/aluno de Química um guia para o desenho de estruturas e estudo de alguns tópicos da química orgânica.

1. Instalação

A – Acesse o endereço: <https://pass.chemaxon.com/sign-up> e preencha seu email, primeiro e ultimo nome, País (Brasil), Escola, Outside US, Teacher ou Student e selecione os ícones dos termos de uso e de segurança do site.

The screenshot shows the ChemAxon PASS SIGN UP page. The form contains the following fields and options:

- Email: helaidioifrn@gmail.com
- Profession: Professor
- School: QUIMICO
- Country: Brazil
- Location: Outside US
- School Name: IFRN
- Teacher/Student: Teacher
- Terms of Use: I've read and agree to the Terms of Use, Privacy Policy and End User License Agreement (EULA).
- Security: Não sou um robô (CAPTCHA)

B - Na etapa seguinte, você abrirá o e-mail cadastrado na etapa anterior e clicará no link de ativação da sua conta (destacado em amarelo);

Welcome to ChemAxon

ChemAxon Pass <pass@chemaxon.com> 14:11 (Há 1 minuto)

para mim

inglês > português Traduzir mensagem Desativar para: inglês

Dear Professor,

Thank you for registering to ChemAxon.

In order to activate your account, please click on the button below.

ACTIVATE MY ACCOUNT

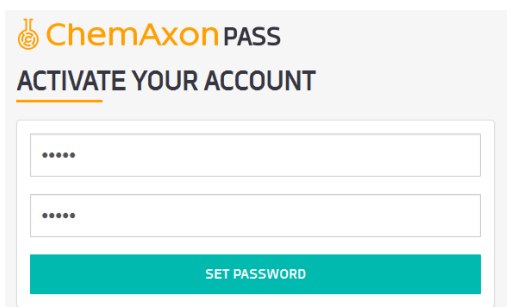
If the button does not show, you can also visit the the following link to activate: <https://pass.chemaxon.com/activate/helaidioifrn@gmail.com/5ccfacfbc8290e4f53df20c0a158c7c1c26b01f49b0405728d88ab378303a774>

Should you have any technical difficulties, please do not hesitate to drop a line to the website-support@chemaxon.com.

Best regards,

The ChemAxon team

C - Após clicar no link de ativação você retornará ao site da empresa ChemAxon para ativar a sua senha e conseguir o acesso ao download dos programas disponíveis na versão livre;

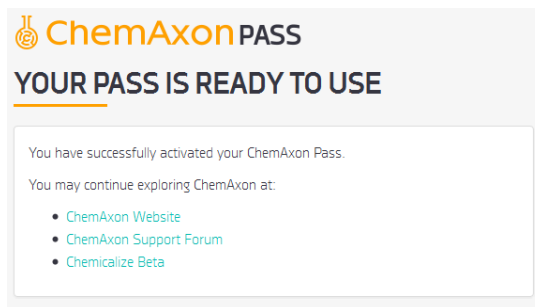


ChemAxon PASS
ACTIVATE YOUR ACCOUNT

.....

.....

SET PASSWORD



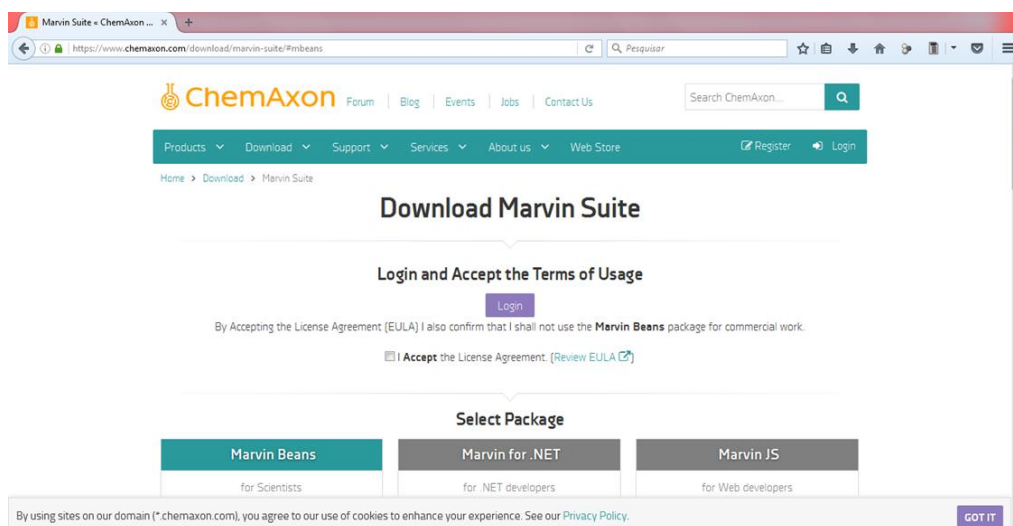
ChemAxon PASS
YOUR PASS IS READY TO USE

You have successfully activated your ChemAxon Pass.

You may continue exploring ChemAxon at:

- [ChemAxon Website](#)
- [ChemAxon Support Forum](#)
- [Chemicalize Beta](#)

D – Após entrar com seu login e senha, acesse o endereço: <https://www.chemaxon.com/download/marvin-suite/#mbeans>. Em seguida, escolha o pacote MarvinBeans de acordo com seu sistema operacional (Windows, Mac, Linux ou plataforma independente) e execute o download; (Observação: na imagem selecionamos o pacote para Windows – installer + JRE (.exe) 32 bits que já possui o Java associado; Ter o Java instalado é obrigatório para a execução dos programas do pacote MarvinBeans) (A última versão disponibilizada foi a 16.10.31.0 – data de acesso: 05/11/2016)



Marvin Suite • ChemAxon ... x

<https://www.chemaxon.com/download/marvin-suite/#mbeans> Pesquisar

ChemAxon Forum | Blog | Events | Jobs | Contact Us

Products | Download | Support | Services | About us | Web Store Register Login

Home > Download > Marvin Suite

Download Marvin Suite

Login and Accept the Terms of Usage

By Accepting the License Agreement (EULA) I also confirm that I shall not use the **Marvin Beans** package for commercial work.

I Accept the License Agreement. [\(Review EULA\)](#)

Select Package

Marvin Beans for Scientists	Marvin for .NET for .NET developers	Marvin JS for Web developers
---------------------------------------	---	--

By using sites on our domain (*chemaxon.com), you agree to our use of cookies to enhance your experience. See our [Privacy Policy](#).

Marvin Beans
Version 16.10.31.0

DESKTOP APPLICATIONS, API, SIGNED JARS AND EXAMPLES

SELECT PLATFORM:

- Windows (.exe)
- Macintosh (.dmg)
- Linux (.sh)
- Platform independent (.zip)

WINDOWS (.EXE) FILES:

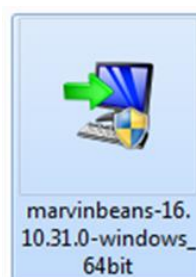
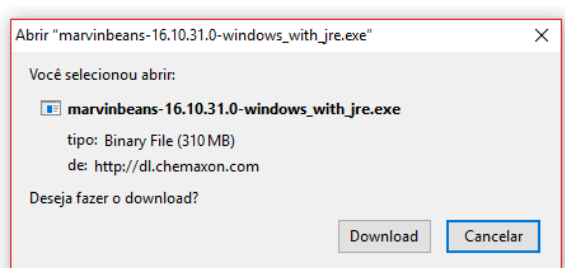
- Installer + JRE (.exe) 32 bit
- Installer (.exe) 32 bit
- Installer (.exe) 64 bit

WINDOWS (.EXE) INSTALLER + JRE (.EXE) 32 BIT
Includes Marvin desktop applications, API, examples, documentation.
Bundled with JRE version 1.6.0_45.

Download Marvin Beans

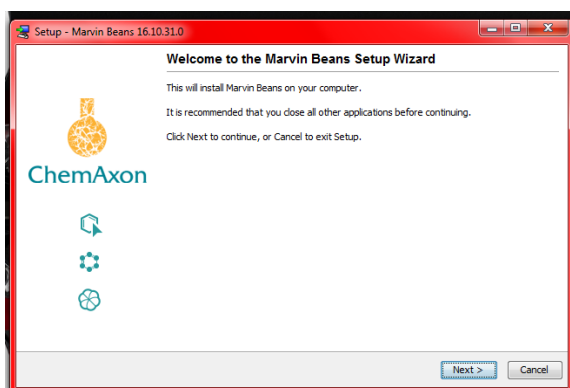
Name

marvinbeans-16.10.31.0-windows_with_jre.exe

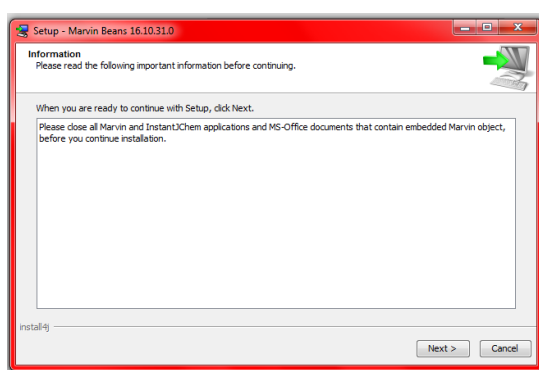


E – Quando o download do instalador terminar, clique no ícone com a seta verde mostrado acima e inicie a instalação que será composta por 12 janelas que você terá de aceitar os termos de uso e avançar clicando em Next;

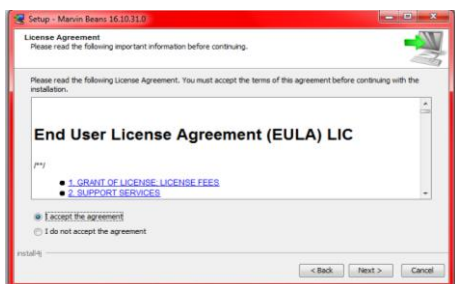
1



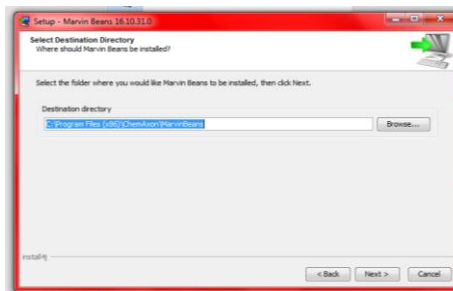
2



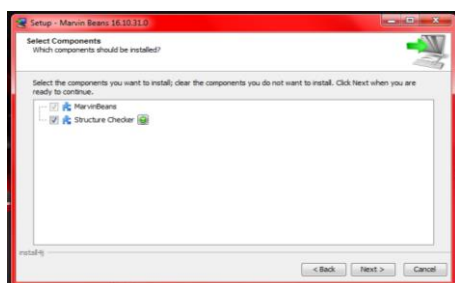
3



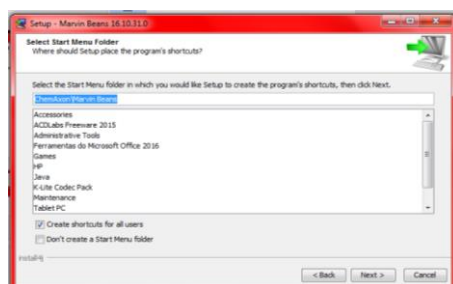
4



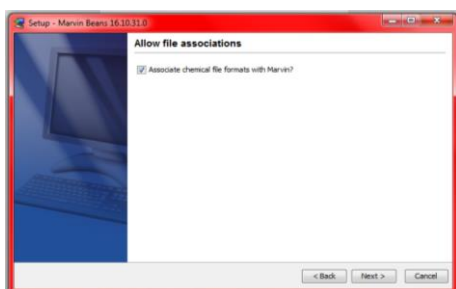
5



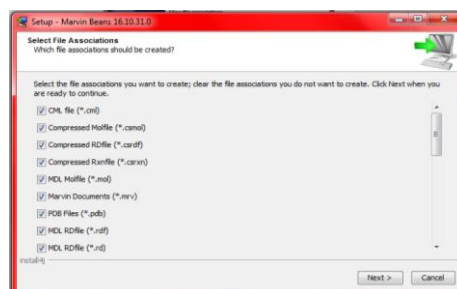
6



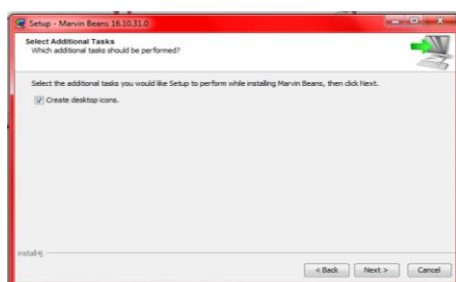
7



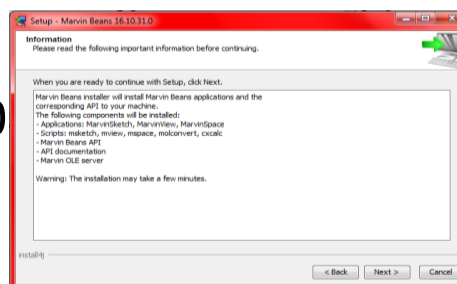
8



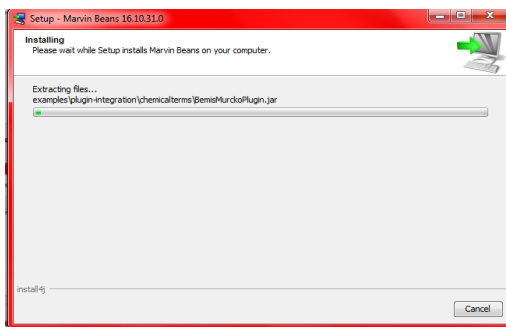
9



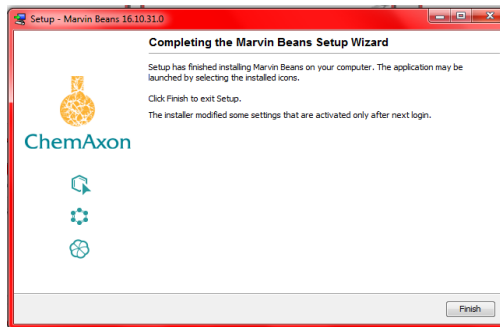
10



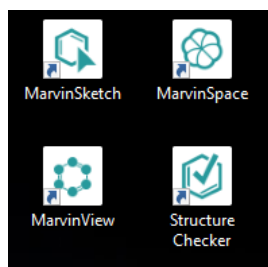
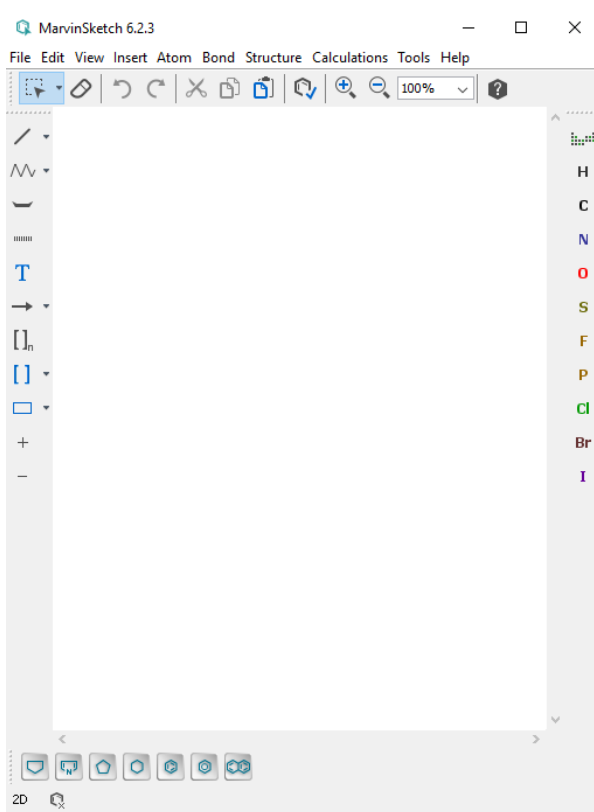
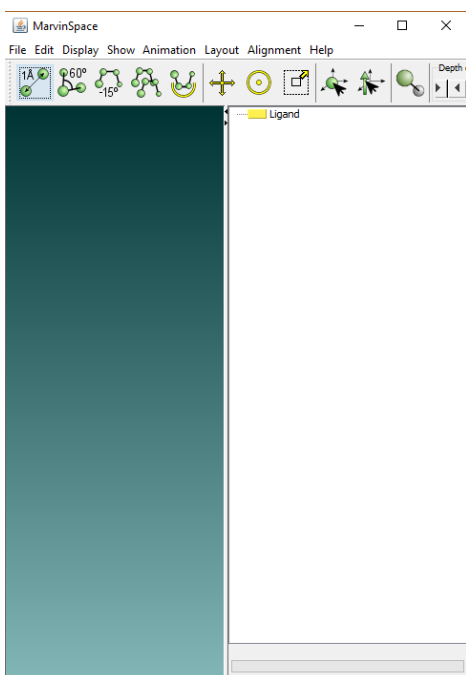
11



12



F – Ao concluir a instalação, aparecerão esses 4 ícones mostrados abaixo que fazem parte do pacote MarvinBeans; Nos tópicos a seguir, trabalharemos com o MarvinSketch e o MarvinSpace, cujas janelas de trabalho estão mostradas abaixo:



2. Ferramentas básicas e construção de estruturas

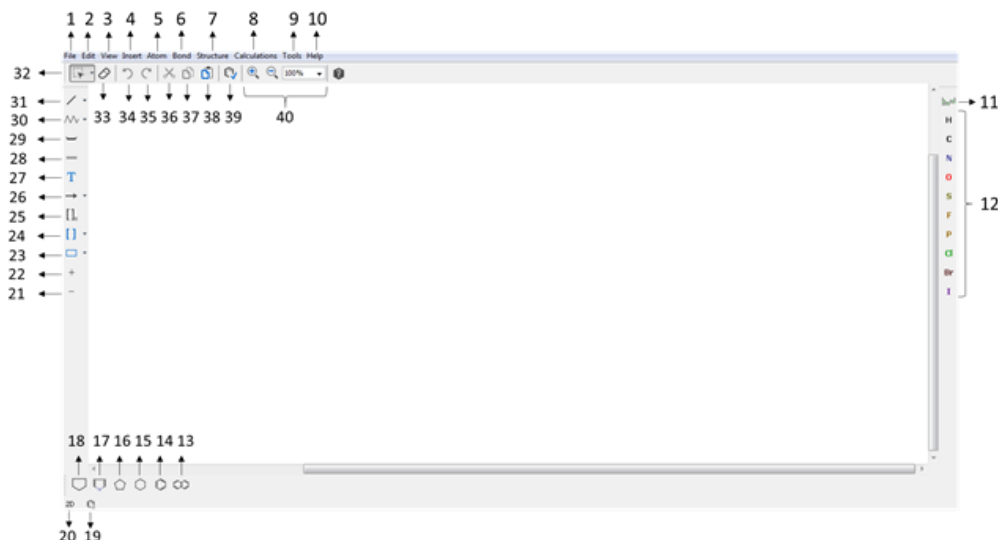


Figura 1. Visão geral do programa Marvin Sketch e suas ferramentas básicas.

Na figura 1 acima, temos uma visão geral sobre o programa MarvinSketch em sua versão livre após a instalação, onde relacionamos as principais ferramentas a seguir:

1 – File: Nesse comando você pode salvar a estrutura que está construindo, optar por abrir uma nova mesa de trabalho limpa, importar ou exportar imagens entre programas, procurar a estrutura construída em banco de dados online e obter opções de impressão.

2 – Edit: nesse comando você terá opções semelhantes a outros softwares, tais como fazer, desfazer, copiar, colar e selecionar todas as estruturas presentes. Você poderá selecionar suas preferências em relação ao Marvin Sketch e terá acesso a biblioteca de modelos de estruturas, onde também poderá contar com modelos criados e adicionados pelo usuário.

3 – View: o usuário poderá escolher a forma como a estrutura construída será apresentada, como exemplo: na forma de bolas e varetas; selecionar o aparecimento de hidrogênios implícitos, colocar a numeração nos átomos de carbono da cadeia selecionada, personalizar a barra de ferramentas e ter acesso ao programa de visualização chamado Marvin Space.

4 – Insert: Na construção de estruturas, o usuário poderá introduzir modelos de outras estruturas, radicais, novas ligações, elementos de reações químicas, como parênteses, setas e movimento de elétrons e, finalmente, a ferramenta de texto que permite inserir informações editáveis próximo de estruturas ou do mecanismo da reação química.

5 – Atom: Nessa ferramenta você poderá escolher opções referentes aos átomos presentes na sua estrutura, onde você poderá modificar os isômeros, isótopos, carga e valência. Você pode selecionar a tabela periódica para inserir átomos específicos como também consultar alguns valores de eletronegatividade, massa e estados de oxidação.

6 – Bond: ferramenta específica para modificar as ligações químicas presentes em sua estrutura em relação ao tipo, forma de apresentação e alinhamento.

7 – Structure: O usuário poderá realizar correções na estrutura construída, adicionar ou remover detalhes como hidrogênios explícitos, nomear a estrutura de acordo com as regras da IUPAC e realizar a autocorreção do programa em busca de erros, que serão destacados na cor vermelha para posterior correção.

8 – Calculations: O programa analisará a estrutura construída, mostrando a massa molecular, contagem atômica e possíveis isômeros. As demais ferramentas, assim como no comando 9 (Tools), só estão disponíveis na versão completa do software.

10 – Help: Tópico de ajuda para possíveis dúvidas do usuário, conteúdo de licenças e informações sobre a versão do software instalada no seu computador.

11 e 12 – Ícones de acesso rápido à tabela periódica e átomos mais comuns presentes em cadeias carbônicas que, depois de selecionados, podem ser inseridos ou substituir átomos presentes em sua estrutura.

13,14,15,16,17 e 18 – ícones de acesso rápido para seleção de cadeias carbônicas cíclicas saturadas, insaturadas ou aromáticas que poderão ser introduzidas ou mesmo modificadas pelo usuário, de acordo com a estrutura a ser construída.

19 e 39 – Ícone de acesso rápido à ferramenta de correção de estruturas, onde o usuário pode escolher deixar o comando acionado para que os erros apareçam em tempo real durante a construção ou pode deixar o comando desligado ativando – o apenas para fazer verificação quando a estrutura estiver finalizada.

20 – Ícone de acesso para selecionar o tipo de visualização em 2 ou 3 dimensões.

21 e 22 – Ícone de acesso para alteração das cargas elétricas dos átomos, onde (+) aumenta a carga e o (-) reduz a carga do átomo selecionado.

23 e 26 – Ícone de acesso para as ferramentas de desenho que permitem construir retângulos, inserir setas (26) de reação e linhas.

24 – Ícone de acesso para a inserção de parênteses ou colchetes para selecionar estruturas em mecanismos de reação.

25 – Ícone de acesso para a construção de grupos atômicos que podem ser desde radicais a estruturas mais complexas como proteínas, para que este se transforme em um modelo utilizável em outras construções.

27 – Ícone de acesso à ferramenta de texto para inserir informações sobre estruturas ou mecanismos de reação.

28 – Ícone de acesso à seleção de ligação pontilhada que pode ser aplicada em qualquer ligação da estrutura.

29 – Ícone de acesso à seleção de ligação no formato negrito, onde uma ligação específica da molécula pode ser destacada.

- 30 – Ícone de acesso à ferramenta de construção de cadeias com átomos em sequência, onde se optará por uma estrutura de cadeia aberta ou fechada.
- 31 – Ícone de acesso ao tipo de ligação química a ser introduzido na cadeia carbônica.
- 32 – Ferramenta de seleção de grupos ou cadeias.
- 33 – Ferramenta de exclusão (borracha) de qualquer elemento presente na planilha de desenho.
- 34 e 35 – Desfazer e refazer.
- 36, 37 e 38 – Recortar, copiar e colar.
- 40 – Ferramenta de visualização onde podemos aumentar ou diminuir o tamanho das estruturas durante a construção.

O usuário poderá configurar a barra de ferramentas de acordo com as suas preferências, podendo adicionar ou remover ferramentas a qualquer momento.

Para explorarmos as funções de desenho de moléculas orgânicas, devemos primeiramente acionar as barras de ferramentas (Toolbars), conforme mostrado na figura 2, para que o uso de ícones de acesso rápido auxilie no momento do desenho de estruturas. Para desenhar uma ligação simples, utilizamos o ícone 31, que oferece vários tipos de ligações covalentes (figura 3). Assim, construiremos o composto presente na figura 4, que foi selecionado usando o ícone 32.

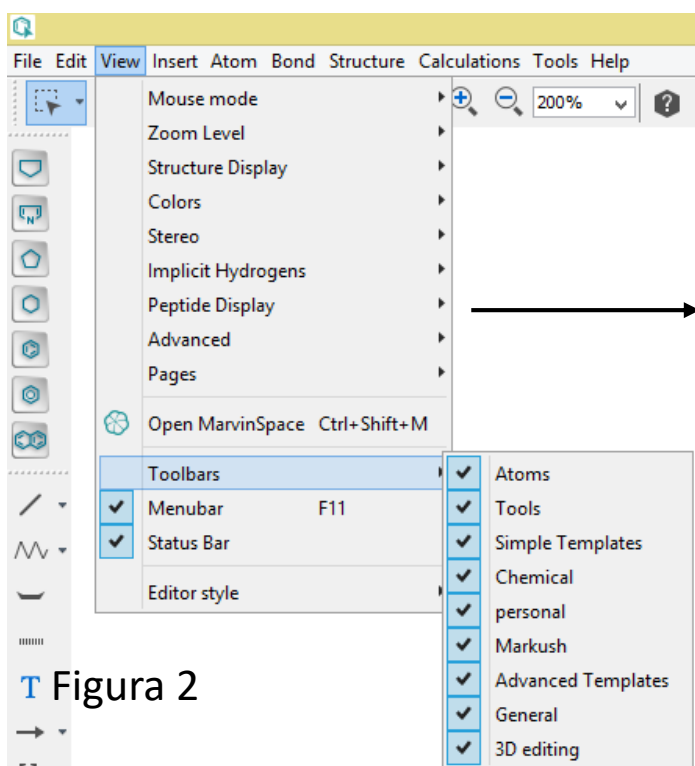


Figura 2

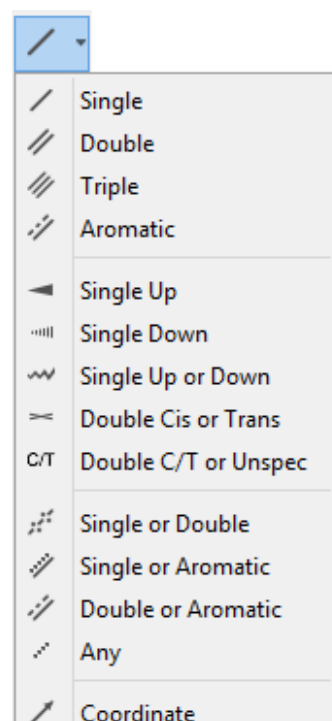


Figura 3

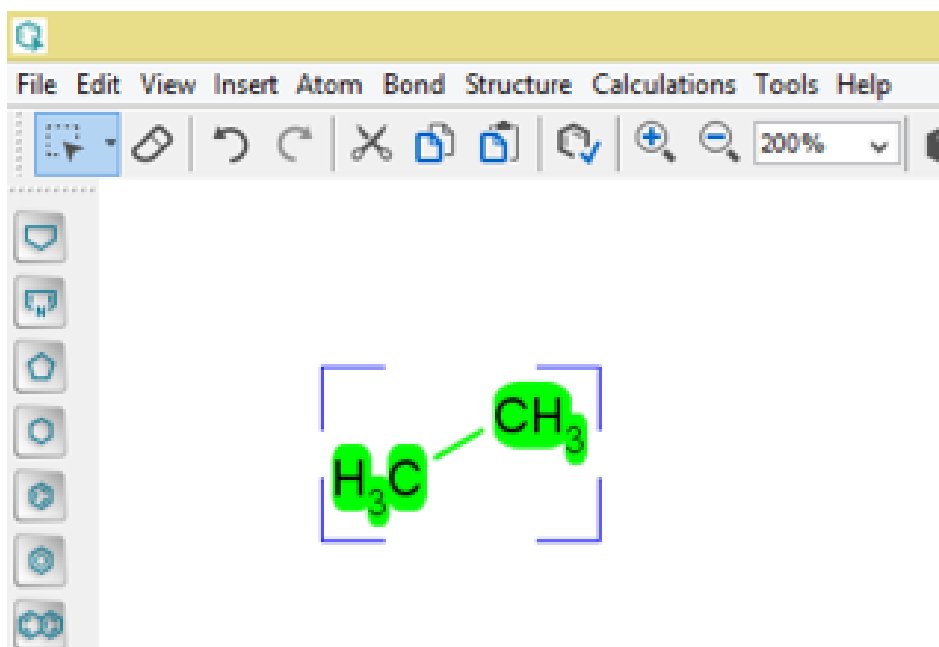
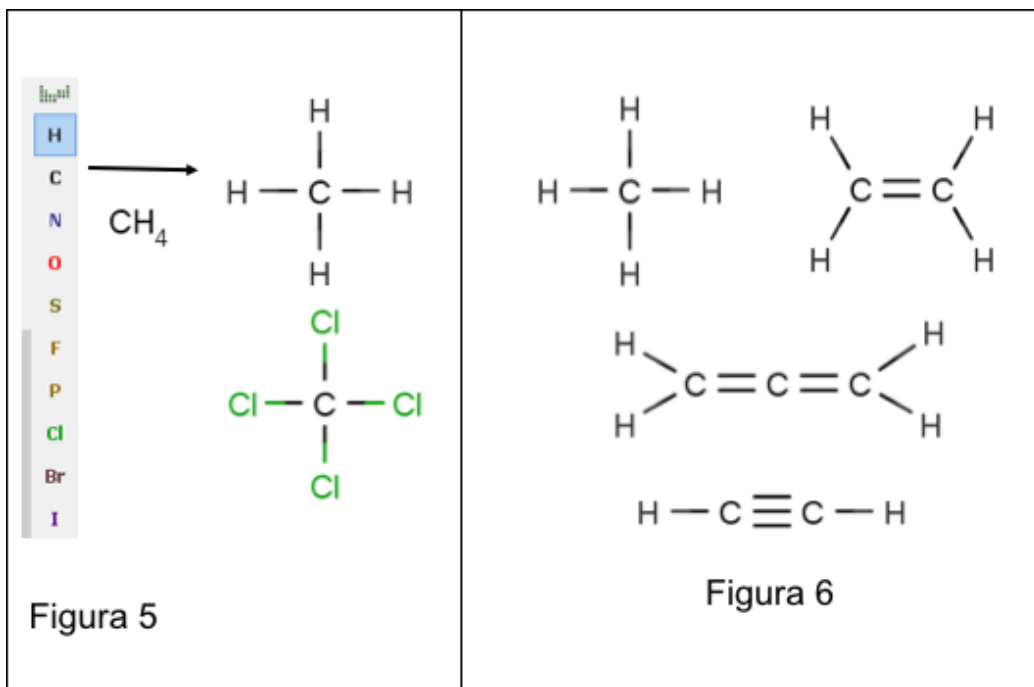


Figura 4

Usando a barra de átomos e tabelaperiódica (ícones 11 e 12), iremos construir a estrutura tetraédrica do metano e do tetracloreto de metano (figura 5) para, em seguida, construirmos as geometrias possíveis para o átomo de carbono nos compostos orgânicos (figura 6).

Durante o processo de construção de moléculas, pode ocorrer erros quanto ao tamanho de ligação química, onde a mesma pode ser corrigida usando as otimizações para as dimensões 2 e 3, presentes em *structure* (ícone 7). O usuário poderá também escolher se os carbonos estarão na forma simplificada (vértices da estrutura) ou se estarão visíveis na ferramenta *edit* (ícone 2). As modificações de estrutura e carbonos se encontram na figura 7.



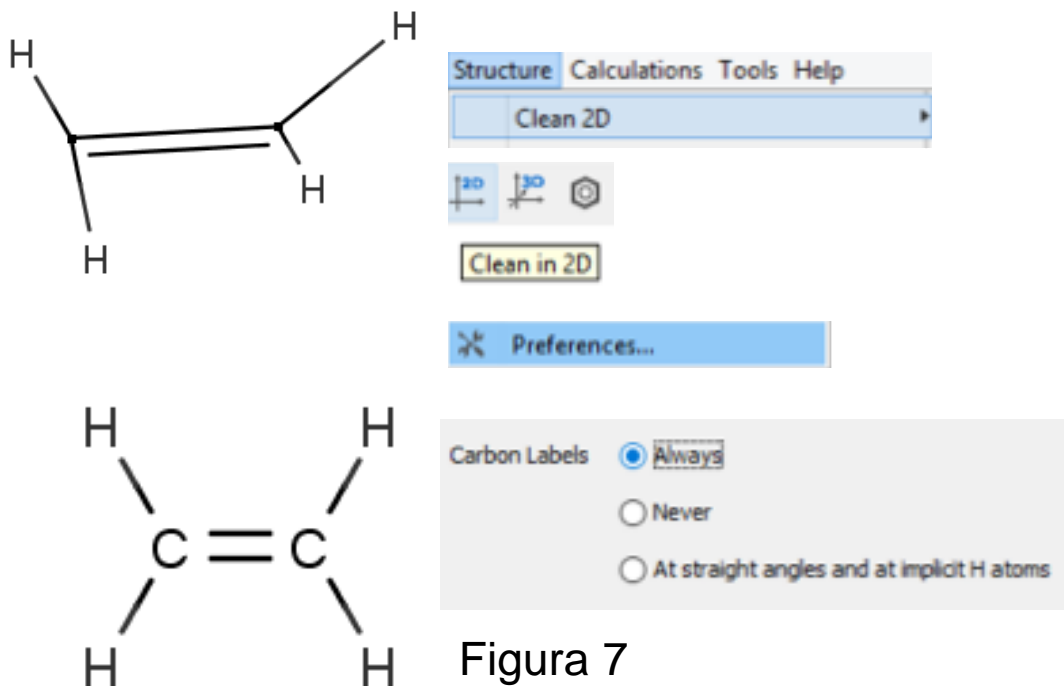


Figura 7

Na construção de cadeias maiores, a ferramenta Draw Chain (ícone 30) permite que você construa a cadeia e que você saiba a quantidade de carbonos que deseja naquela sequência e, em seguida, foram acrescentados os hidrogênios implícitos (View – ícone 3 – implicit hydrogen) e a molécula foi otimizada para as três dimensões (structure – ícone 7 – Clean 3D) com a ferramenta View (ícone 3). Na figura abaixo, é mostrada o processo de construção do butano em etapas com a visualização no MarvinSpace (etapa 4). Observação: quando abrir o MarvinSpace, lembre – se de manter a janela do MarvinSketch aberta para não correr o risco de perder a estrutura não salva.

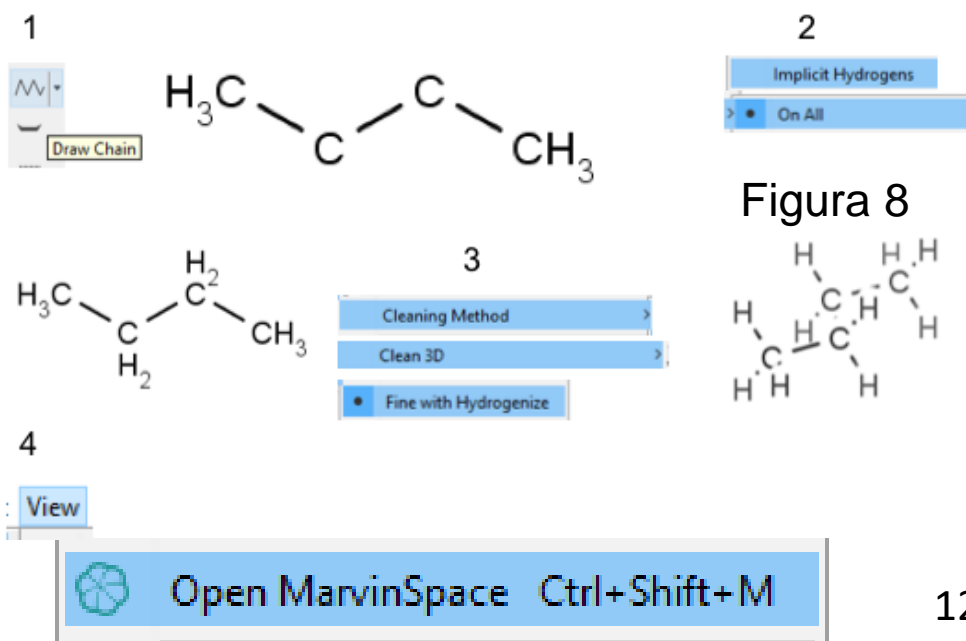


Figura 8

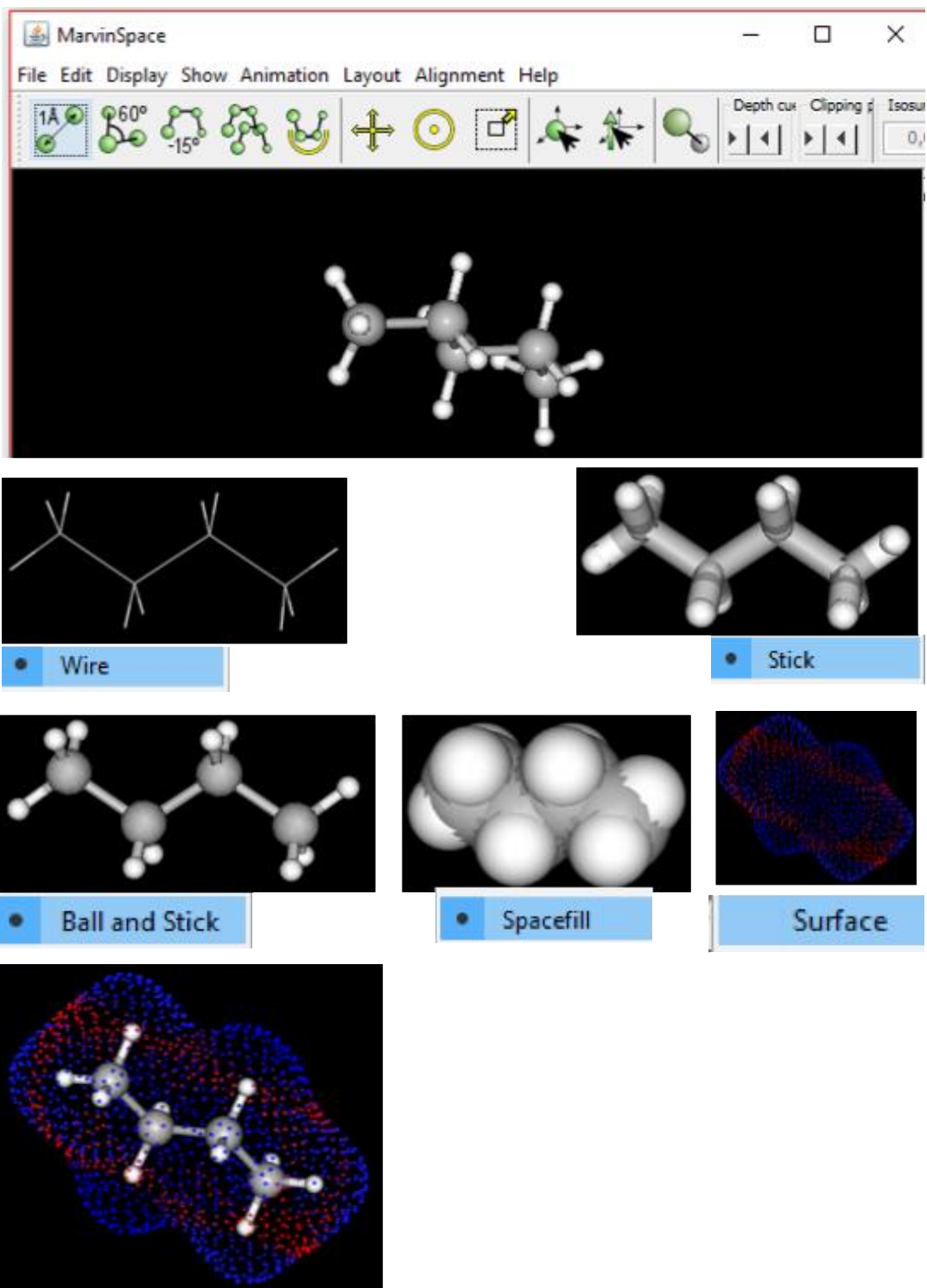
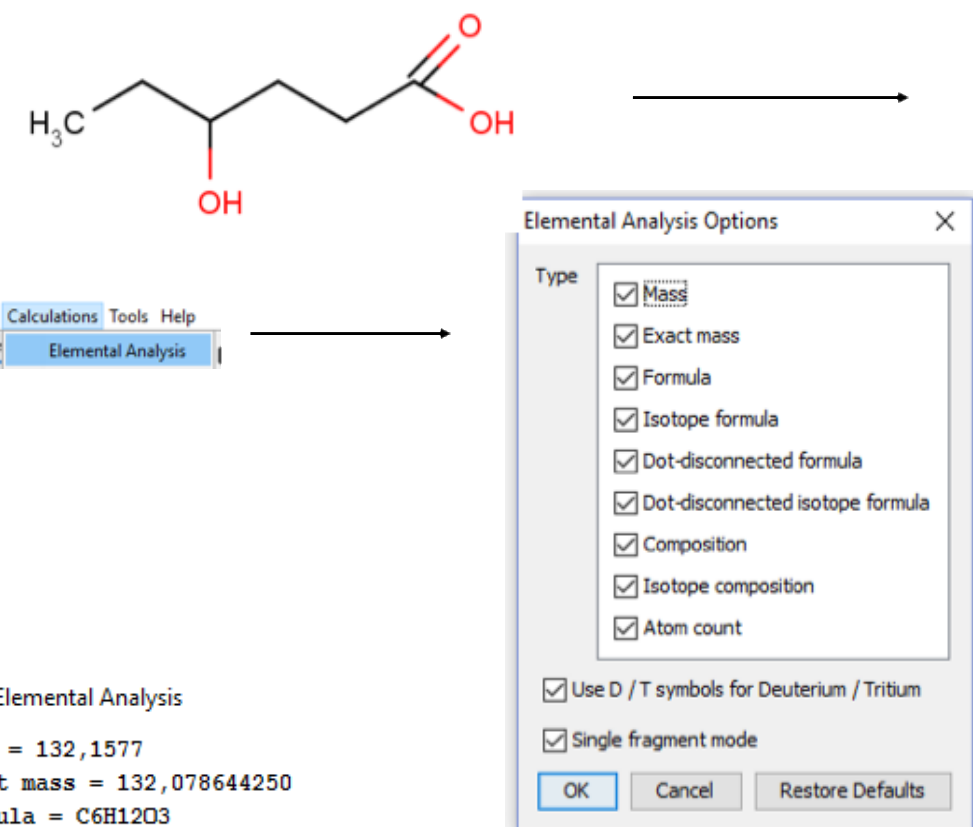


Figura 9

Na figura 9, temos algumas possibilidades de visualização da molécula do butano, que pode ser modificada pelas ferramentas Display e Show para explorarmos a geometria da molécula e prever suas possíveis interações. O comando Animation permite que a estrutura realize rotações automaticamente.

Finalizamos a segunda parte com o uso da ferramenta (Calculations – ícone 8 – elemental analysis), que realiza cálculos de fórmula molecular, massa molar, composição centesimal e contagem total de átomos. Na figura 10 é feita a aplicação para a estrutura do ácido 4 – hidroxi – hexanóico.

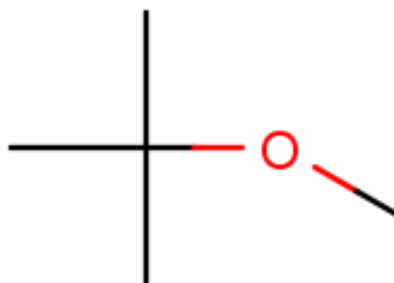


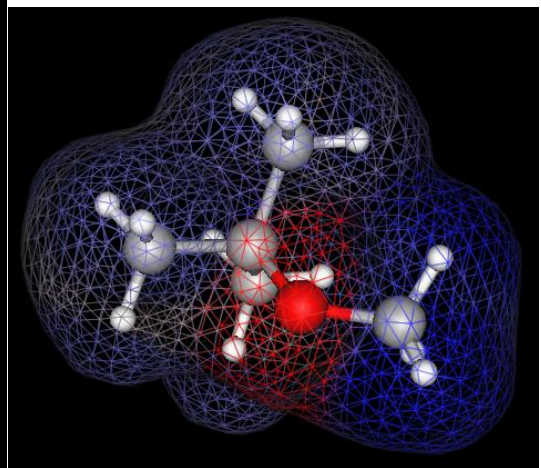
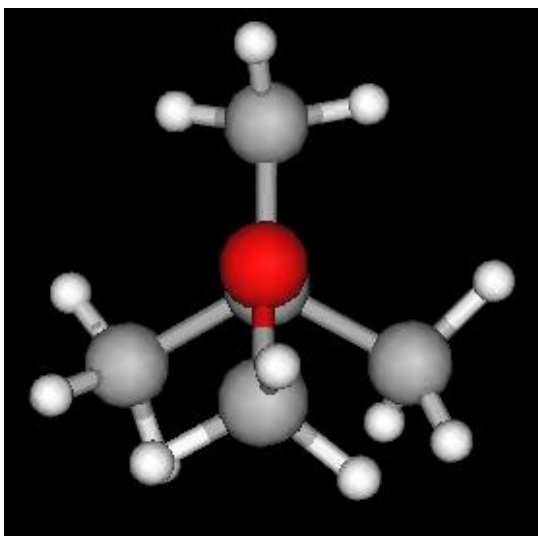
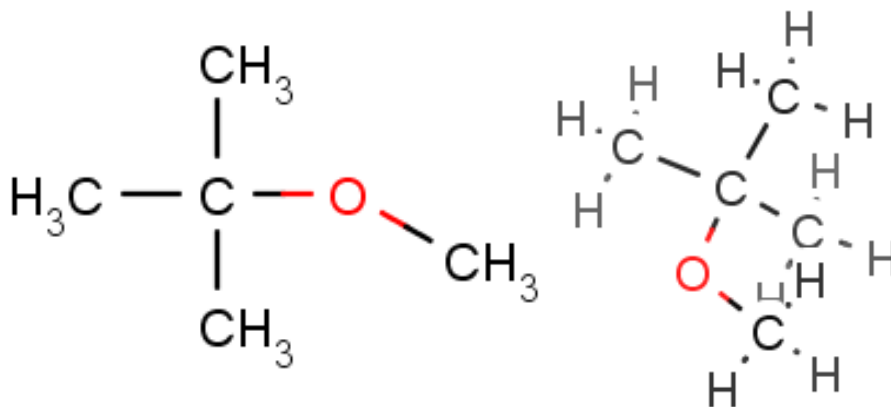
Elemental Analysis

Mass = 132,1577
 Exact mass = 132,078644250
 Formula = C6H12O3
 Isotope formula = C6H12O3
 Dot-disconnected formula = C6H12O3
 Dot-disconnected isotope formula = C6H12O3
 Composition = C (54,53%), H (9,15%), O (36,32%)
 Isotope composition = C (54,53%), H (9,15%), O (36,32%)
 Atom count = 21

Figura 10

Exercício parte II– Construa a estrutura do MTBE mostrada ao lado, fazendo com que ela mostre os carbonos nas estruturas 2 D e 3 D. Realize os cálculos com a ferramenta Elemental analysis.





Elemental Analysis



Mass = 88,1482

Exact mass = 88,088815006

Formula = C5H12O

Isotope formula = C5H12O

Dot-disconnected formula = C5H12O

Dot-disconnected isotope formula = C5H12O

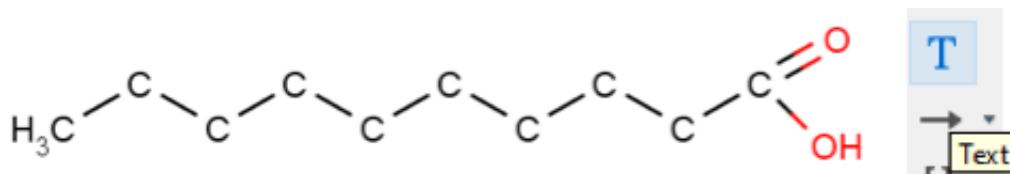
Composition = C (68,13%), H (13,72%), O (18,15%)

Isotope composition = C (68,13%), H (13,72%), O (18,15%)

Atom count = 18

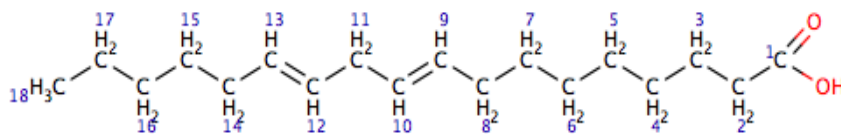
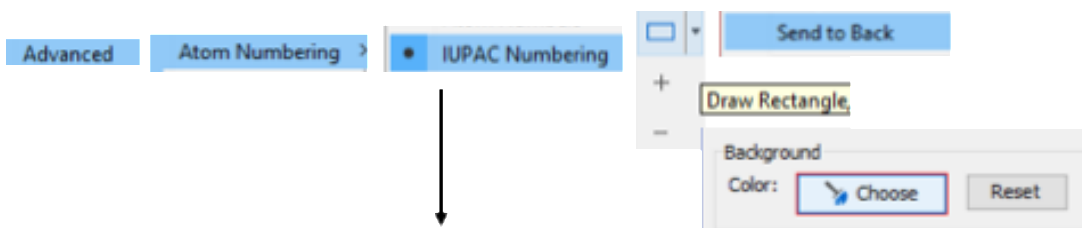
3. Ferramentas de texto e desenho no contexto da classificação de cadeias:

Iniciaremos a etapa 3 com a construção do Ácido graxo – Cáprico ($C_{10}H_{20}O_2$). Em seguida, usando a ferramenta de texto (ícone 27), vamos inserir algumas informações referentes a esse composto, conforme a figura 11 abaixo. Enfim, construiremos outro ácido graxo - o linoleico – e, para inserirmos informações sobre esse compostos, faremos uso da ferramenta de desenho (ícone 23) e da ferramenta de numeração da cadeia, que pode ser acessada pelo comando View (ícone 3), escolhendo a opção advanced e atom numbering, que complementarão a ferramenta de texto, conforme mostrado na figura 12. A figura 13 mostra o uso da ferramenta de setas (ícone 26) em conjunto com a ferramenta de texto para classificarmos os átomos de carbono presentes na cadeia.

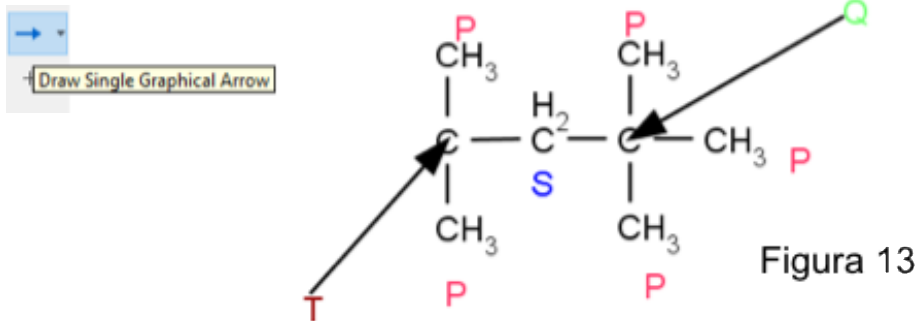


Ácido graxo $C_{10}H_{20}O_2$ - Cáprico
(presente no óleo de coco) ponto de fusão = $31^{\circ}C$.

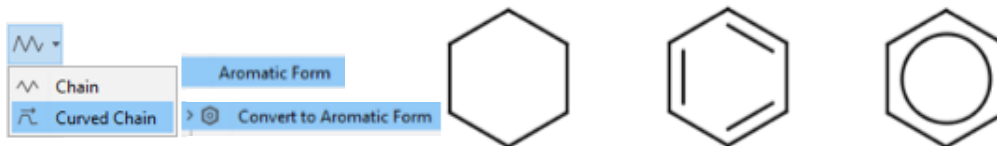
Figura 11



Ácido graxo $C_{18}H_{32}O_2$ - Linoléico (presente no óleo de soja) ponto de fusão = $-5^{\circ}C$



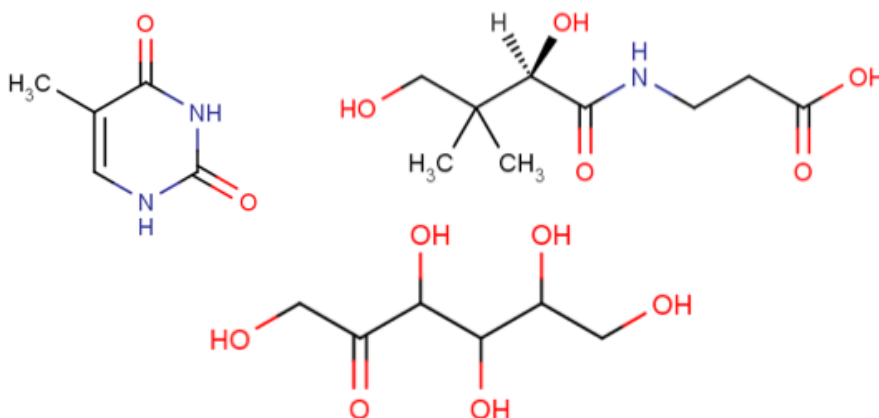
Finalizando a parte 3, na figura 14 é mostrada a ferramenta de desenho em curva para estruturas cíclicas (ícone 30) e a opção de formas aromáticas (structure – ícone 7).



Exercício - parte III:

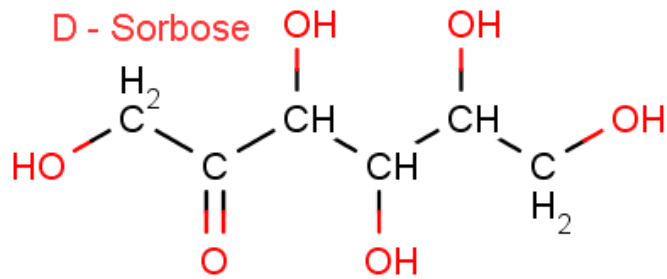
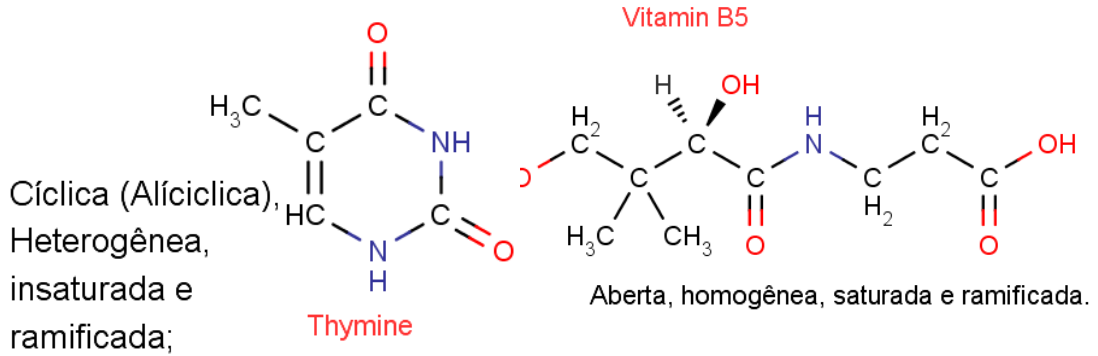
A – Qual é a característica das cadeias carbônicas dos compostos 1 e 2 (slide anterior), que justifica a diferença na temperatura de ebulição ?

B – Construa (com os carbonos explícitos) e classifique as cadeias abaixo. Coloque as classificações próximas das estruturas.



Resposta

A – As ligações duplas da segunda cadeia carbônica reduzem as forças intermoleculares e, portanto, resultará em um menor ponto de ebulição e fusão.



Aberta, homogênea, saturada e Normal

4. Funções, Radicais e Nomenclatura

Iniciaremos o tópico de funções orgânicas com a construção dos hidrocarbonetos (alcanos, alcenos, alcinos, cicloalcanos e aromáticos), utilizando as ferramentas de desenho já apresentadas. Para inserir as funções oxigenadas, podemos usar as ferramentas de átomos ou tabela periódica (ícone 12 e 13) e utilizar a ferramenta Atom (ícone 5) e, com um dos carbonos selecionados, podemos modifica-lo para um grupamento carbônico R, conforme mostrado na figura 15.

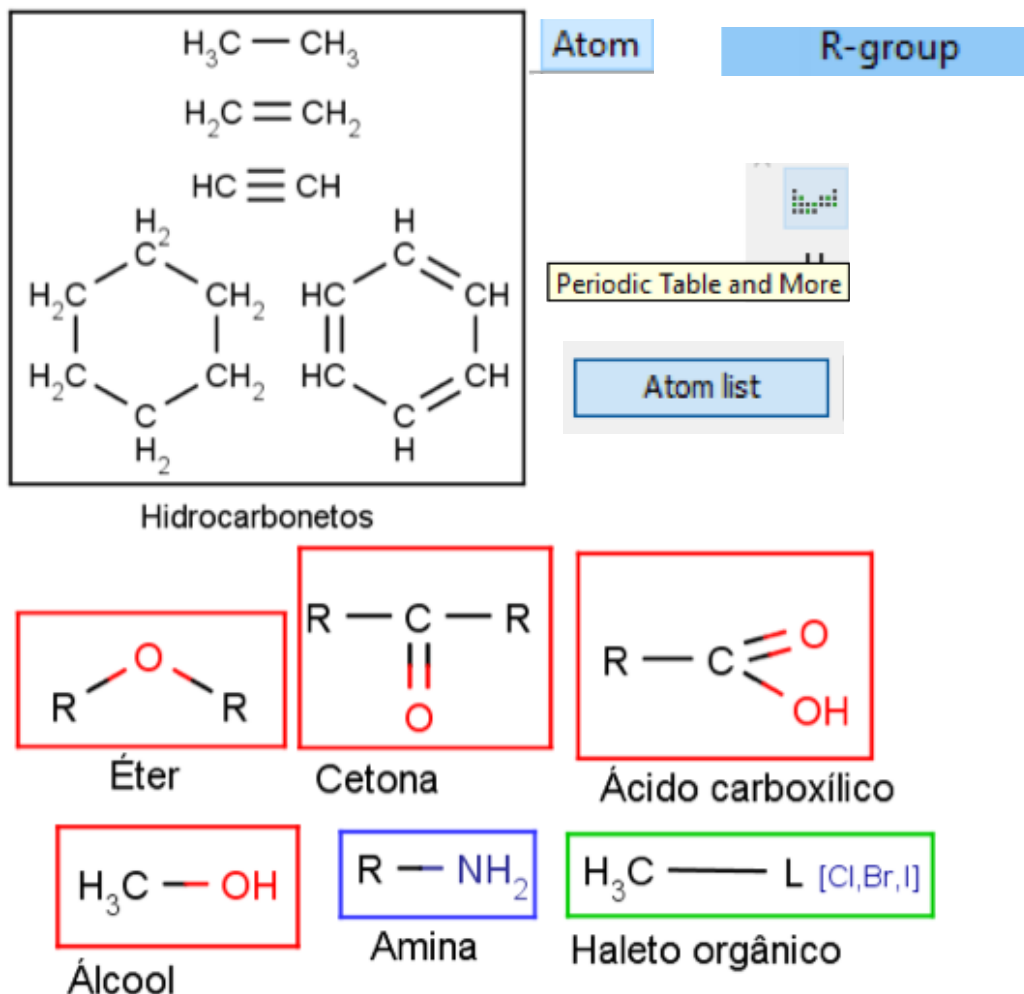


Figura 15

O usuário pode construir os radicais orgânicos a partir de cadeias carbônicas usando a ferramenta Atom (ícone 5). Com o átomo da estrutura previamente selecionado, a contagem de hidrogênios é reduzida e o composto se transforma em um radical. O programa MarvinSketch também possui uma biblioteca de estruturas, que pode ser acessada pela ferramenta Insert (ícone 4), onde selecionamos o isobutano, de onde podemos fazer o isobutil - conforme mostrado na figura 16.

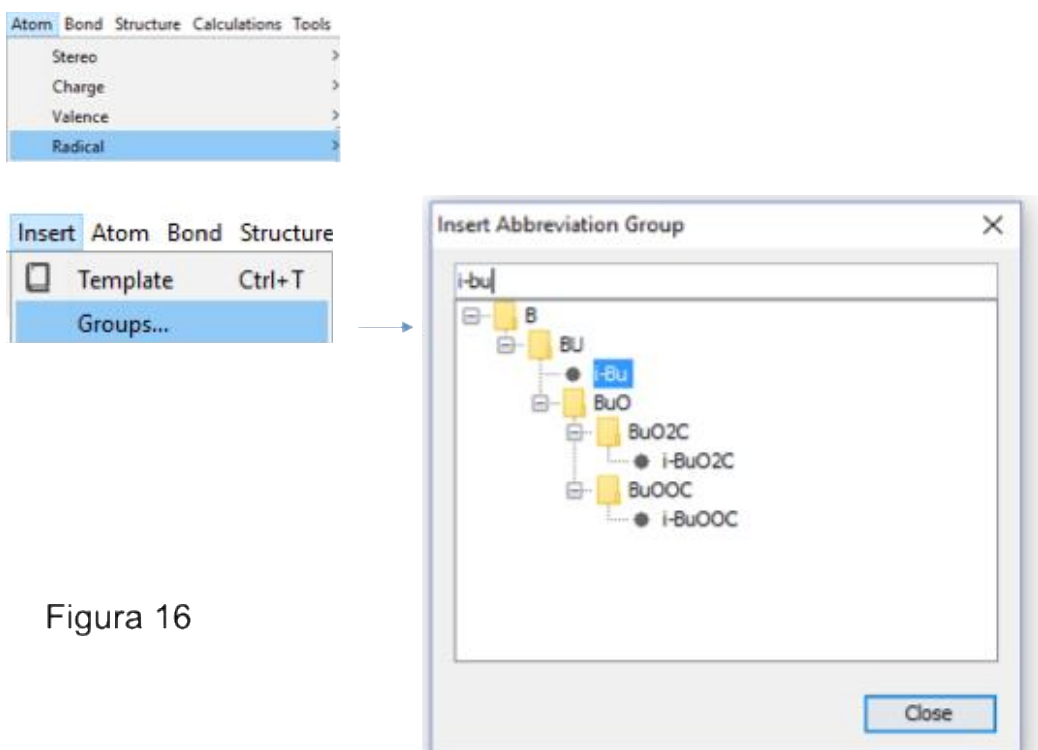
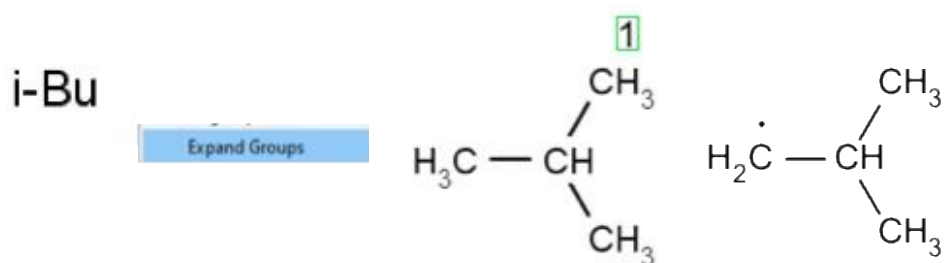


Figura 16



Acessando a ferramenta Structure (ícone 7), podemos inserir a nomenclatura oficial IUPAC para os compostos construídos na interface do MarvinSketch. Na figura 17, são mostradas 8 estruturas, sendo 7 funções orgânicas e um radical exemplificando a nomenclatura (em inglês) produzida pelo programa.

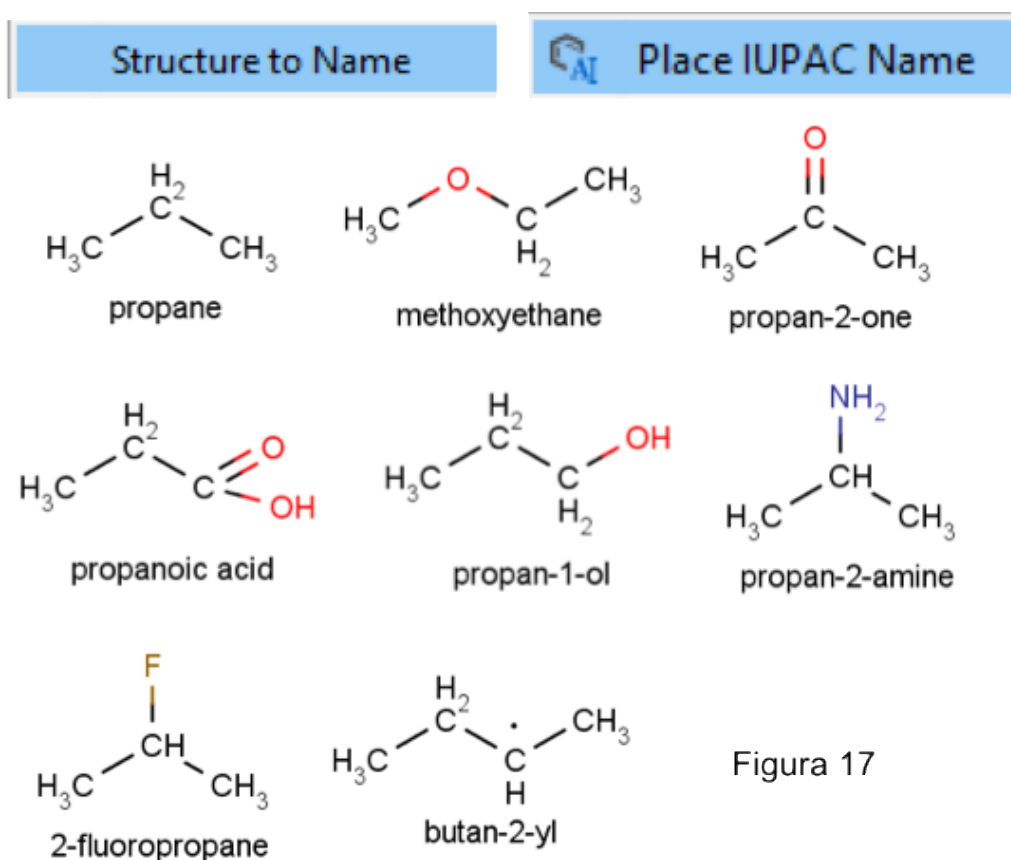


Figura 17

Em estruturas ramificadas, pode-se inserir a numeração das cadeias carbônicas a partir da numeração IUPAC na ferramenta View (ícone 3) ou uma numeração manual através da ferramenta Structure (ícone 7). A nomenclatura da cadeia carbônica ainda pode trazer detalhes, como a isomeria E-Z e pode ser destacada a partir das ferramentas de desenho já apresentadas, que nesse exemplo, destacam a cadeia principal conforme visto na figura 18.

● IUPAC Numbering

Map

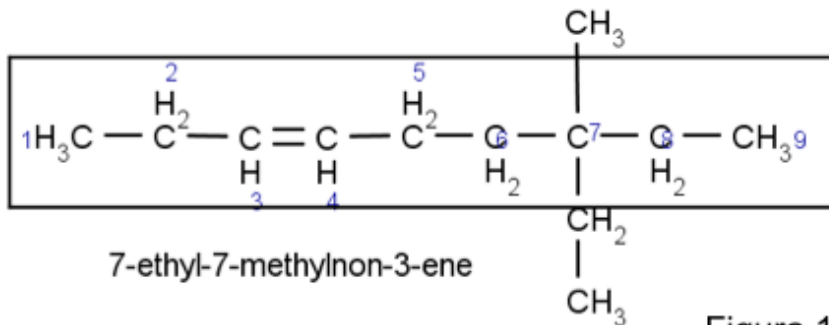
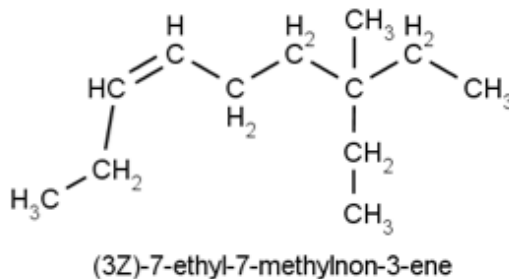
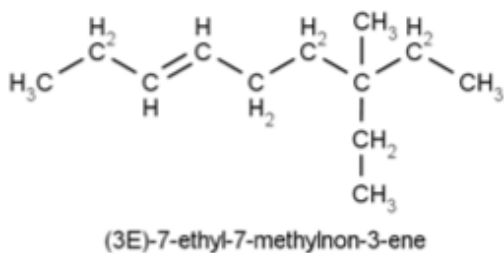
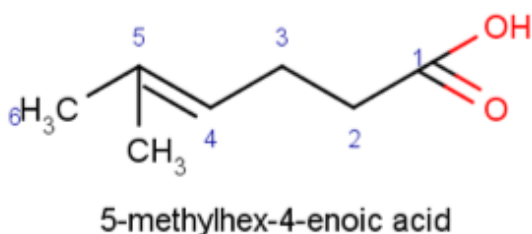
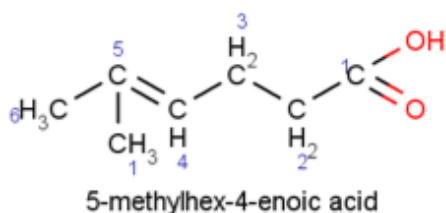
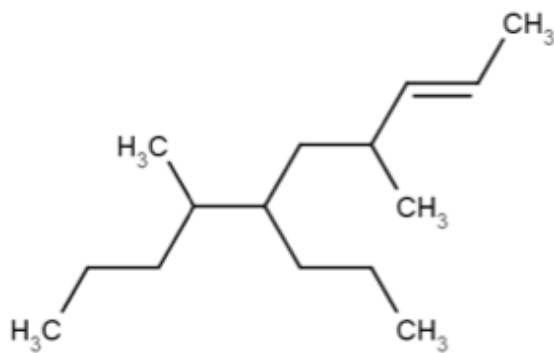


Figura 18

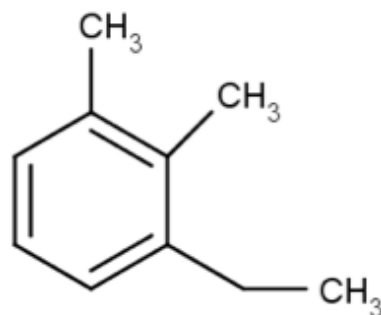
Exercício - parte IV:

A – Repita a construção das cadeias abaixo e, em seguida, insira a nomenclatura oficial

1º $C_{15}H_{30}$

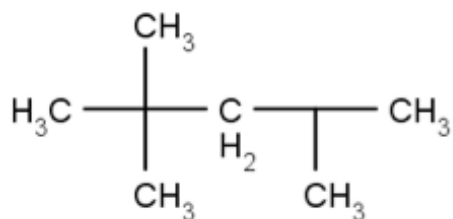


2º $C_{10}H_{14}$

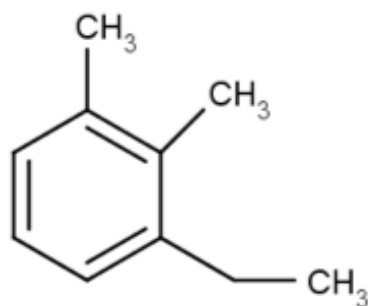


B – Construa a estrutura a partir da nomenclatura: 2,2,4 – trimetil – pentano (isooctano)

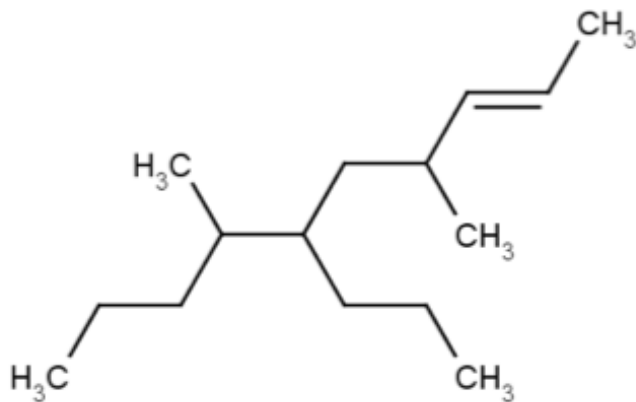
Resposta



2,2,4-trimethylpentane



1-ethyl-2,3-dimethylbenzene



(2E)-4,7-dimethyl-6-propyldec-2-ene

5. Isomeria, propriedades físicas e mecanismo de reação orgânica
 A isomeria plana de cadeia é mostrada com o exemplo do pentano e do 2 metilbutano, que foram construídos usando as ferramentas de cadeia e de texto. A tautomeria existente entre o etenol e o etanal (aldeído acético) foi determinada pela ferramenta Calculations (ícone 8). A isomeria espacial do tipo geométrica foi exemplificada pelas estruturas E – Z do composto 2-cloro-3-fluoropent-2-eno, em que a ligação dupla e o respectivos planos foram destacados usando uma linha feita a partir da ferramenta de desenho (ícone 23) - conforme mostrado na figura 19.

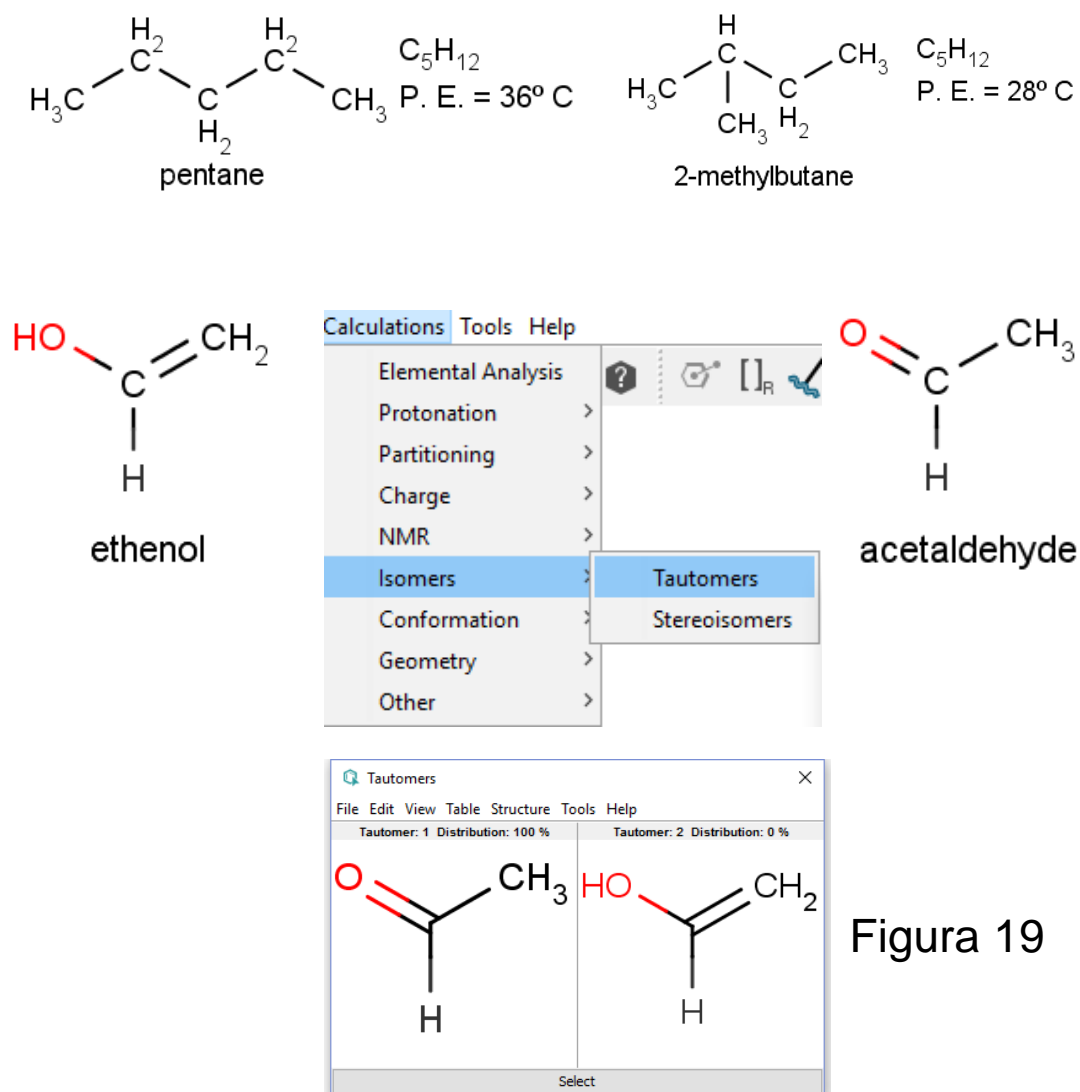


Figura 19

Para exemplificar a isomeria óptica, foi destacado o carbono quiral através da ferramenta Structure – Add – Multicenter (ícone 7) e, em seguida, a molécula do ácido láctico (2-hidroxi propanoico) foi duplicada para simular a visualização no espelho com o auxílio das ferramentas de desenho e texto. Ao visualizar os dois isômeros no MarvinSpace, temos o destaque do carbono 2 (quiral) e a diferença entre o dextrógiro e o levogiro, conforme mostrado na figura 20.

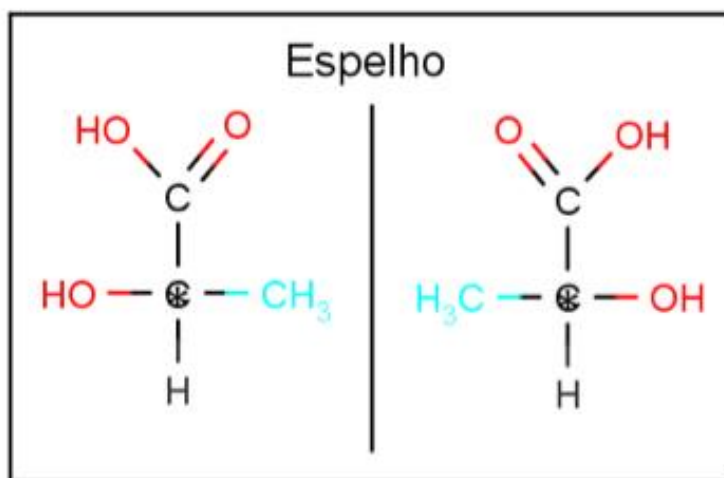
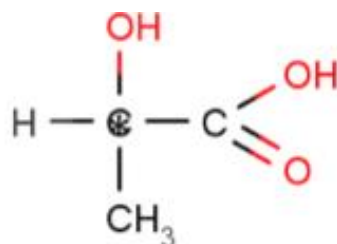
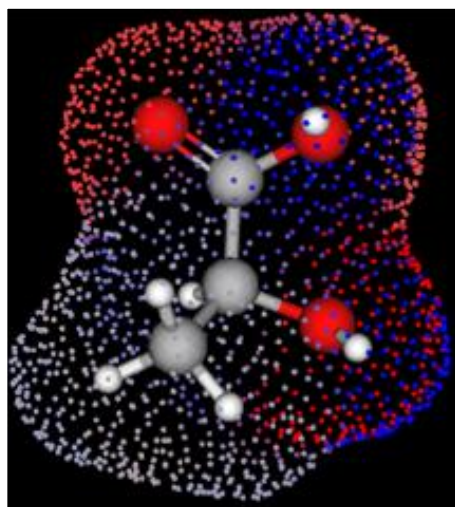
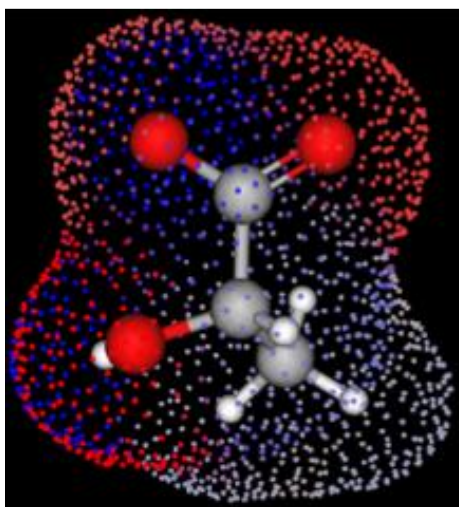


Figura 20



As propriedades físicas dos compostos estão relacionadas aos átomos e a geometria presentes na cadeia carbônica. O etanol apresenta a polaridade devido ao oxigênio presente na hidroxila e, utilizando as ferramentas de desenho e texto, destacamos as propriedades da molécula. O octano apresentado segue a tendência dos hidrocarbonetos apresentando uma cadeia apolar em toda a sua extensão. O aumento das forças intermoleculares resulta em um aumento no ponto de ebulição, conforme vemos nos compostos presentes na figura 21.

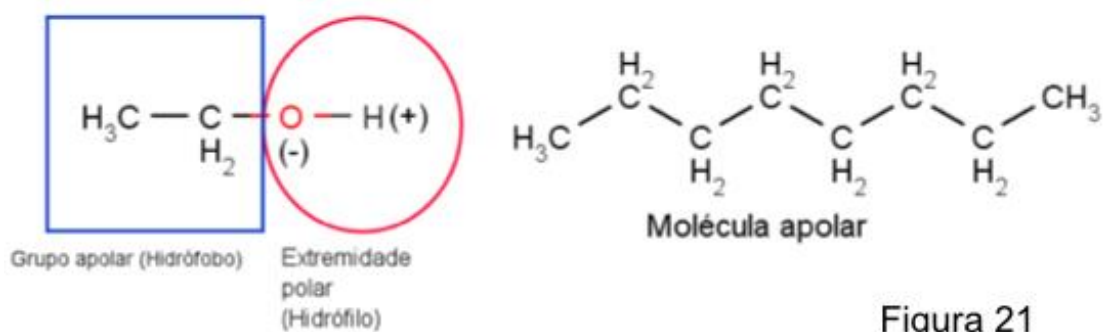
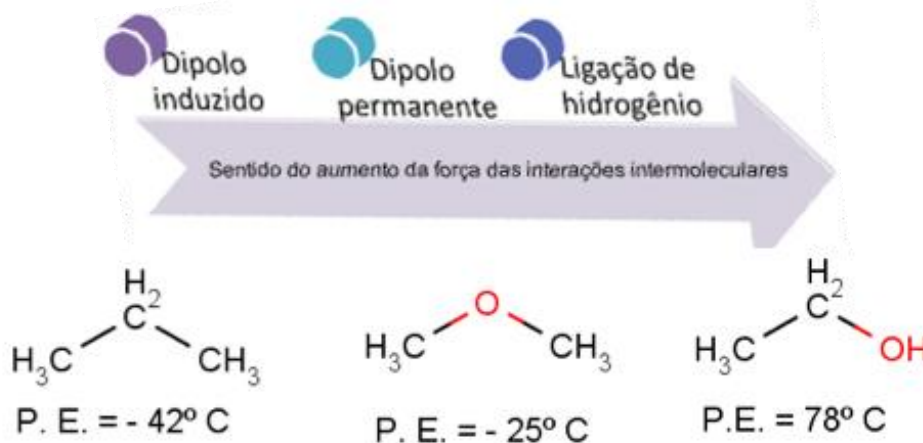


Figura 21



A relação entre a polaridade das moléculas e a solubilidade foi exemplificada pela estrutura da água e das vitaminas A e C, que foram obtidas pela ferramenta Insert – Template (ícone 4). Com as imagens, podemos exemplificar as vitaminas que são hidrossolúveis ou lipossolúveis, conforme mostrado na figura 22.

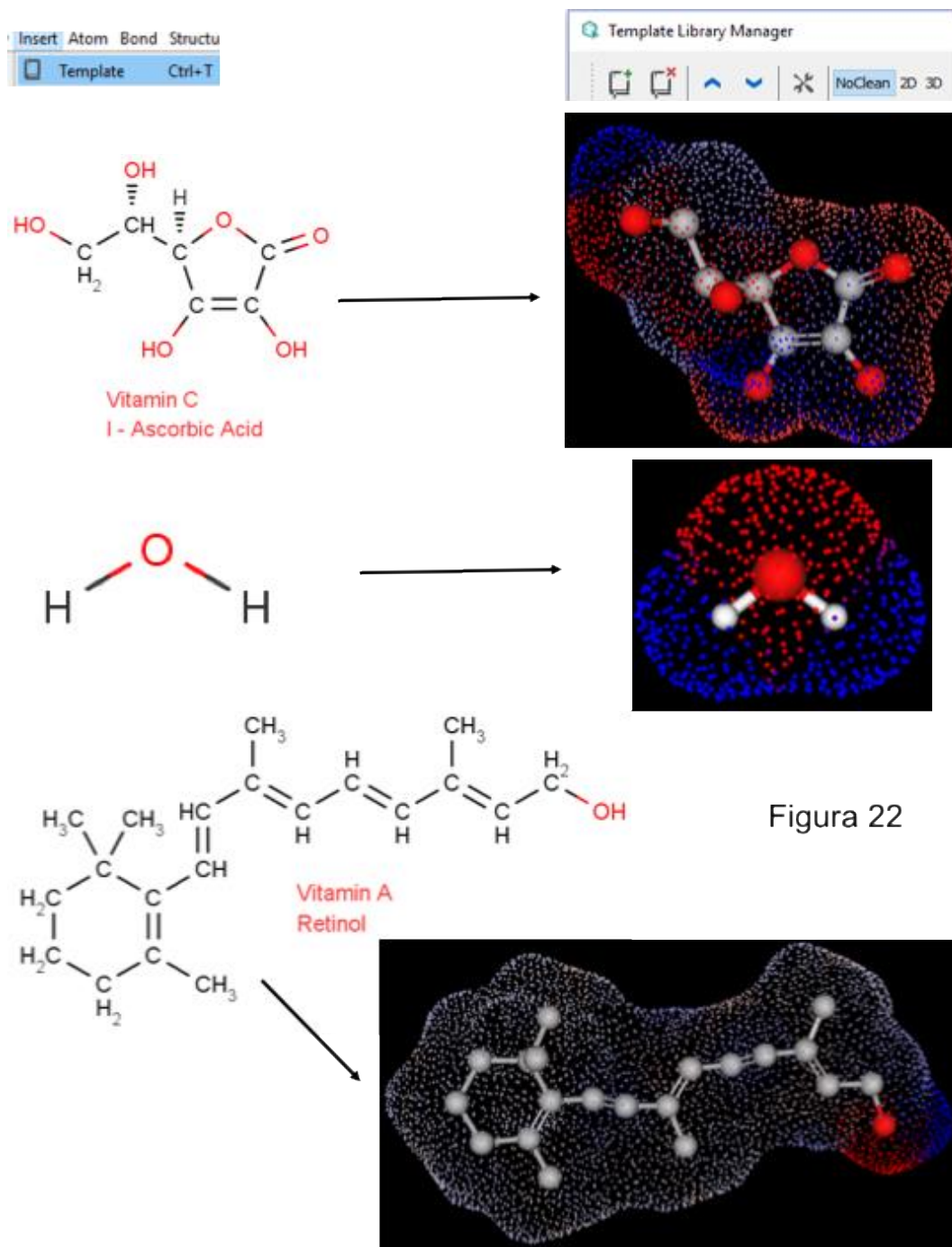


Figura 22

O mecanismo de reação orgânica é exemplificado pela reação de neutralização entre o ácido butanóico e o hidróxido de sódio, que deve ser iniciado pela construção de todas as fórmulas dos reagentes e dos produtos e finalizado pela introdução da seta de reação presente na ferramenta de seta (ícone 26), que adicionará também os sinais de soma para reagentes e produtos. A reação entre a gordura e a soda cáustica (hidróxido de sódio) representa um exemplo de uma reação mais complexa, conforme mostrado na figura 23.

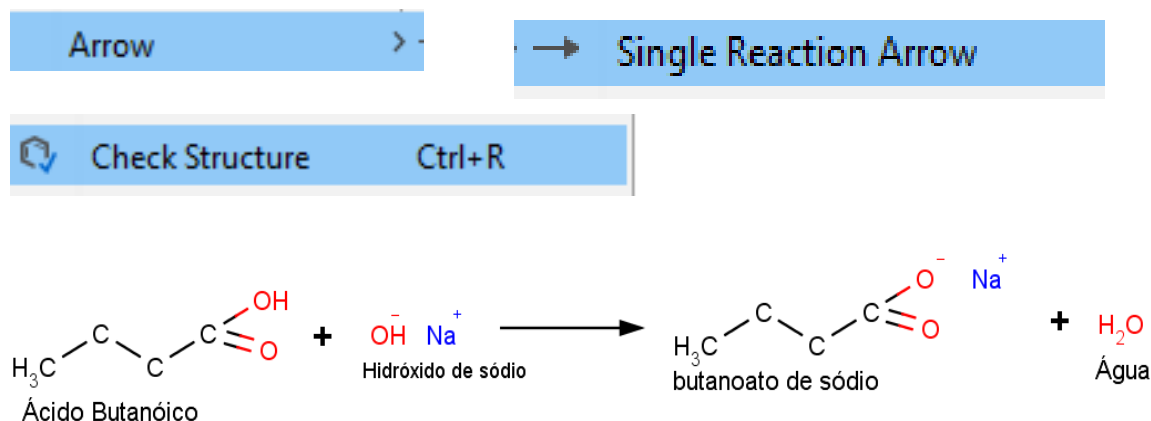
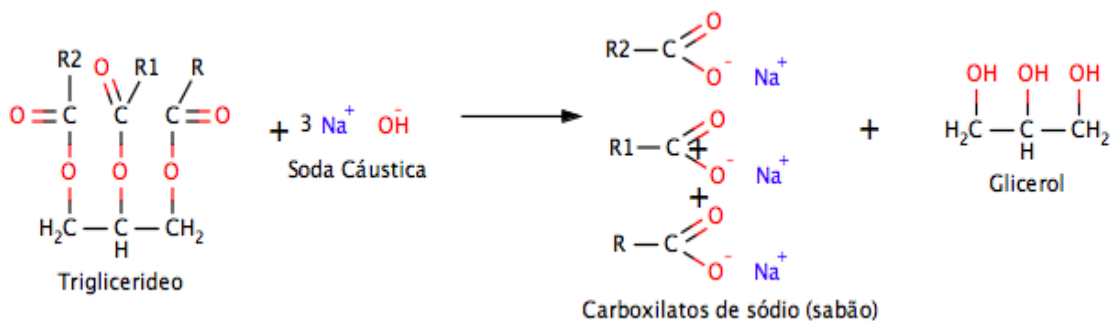
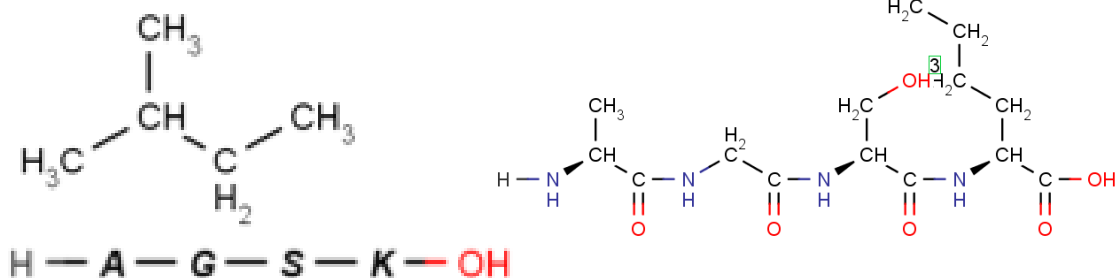


Figura 23

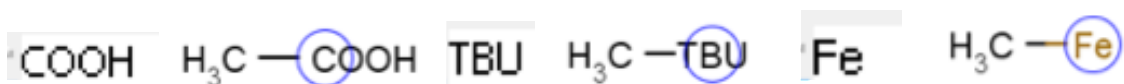


Dicas e observações

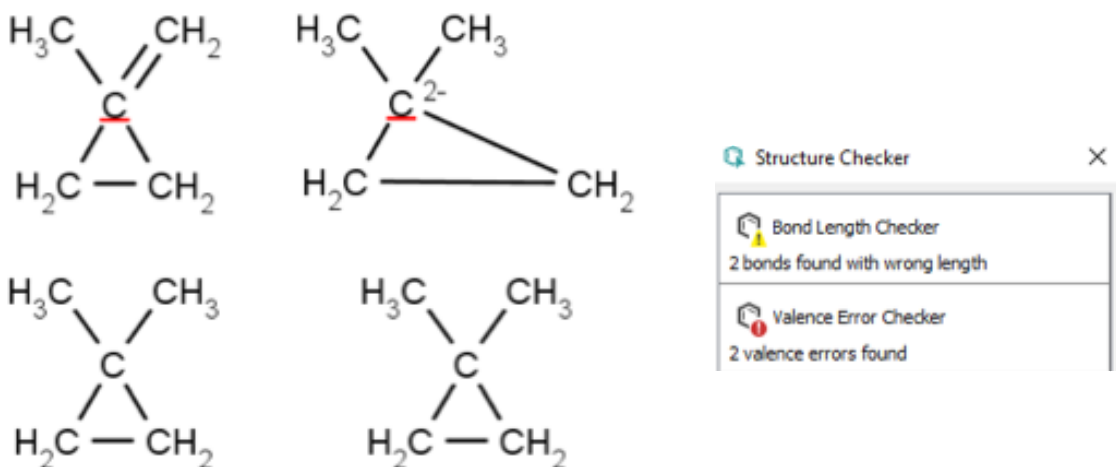
1 – Edit – Source (FILE – IMPORT AS): Permite a digitação da nomenclatura (língua inglesa) e o programa construirá uma estrutura simples (3-methylbutane) ou uma complexa, como a cadeia de proteínas (AGSK).



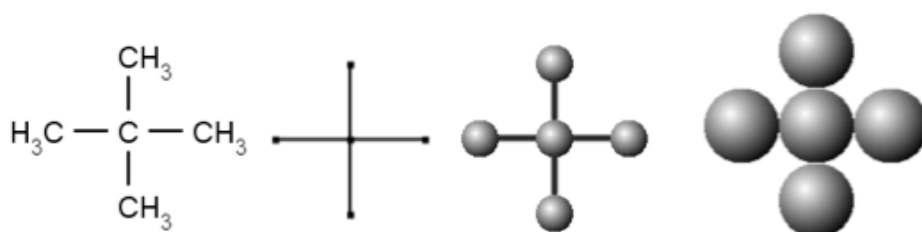
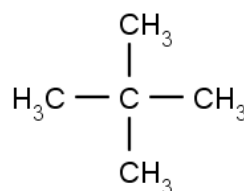
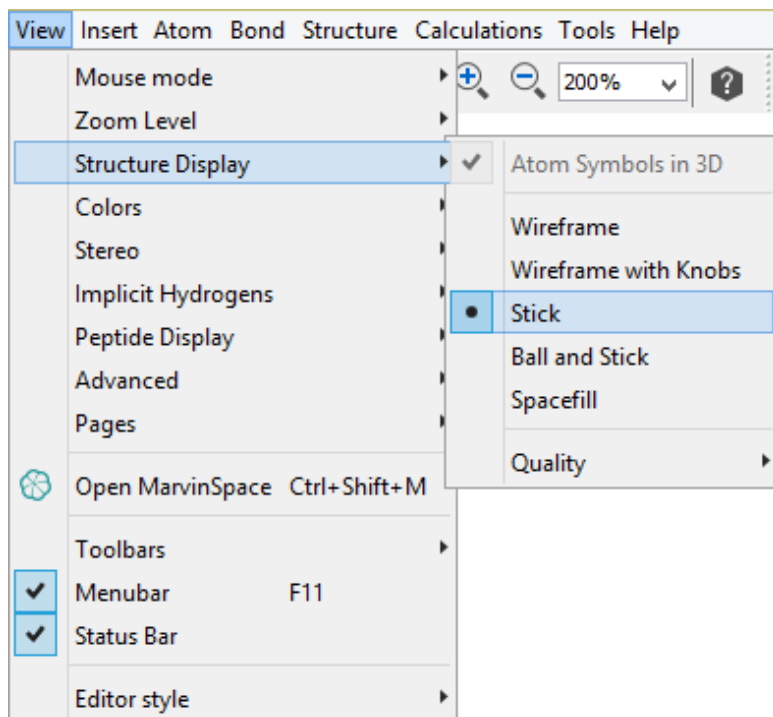
2 – Introduzir átomos os grupos: Selecione um átomo e a partir do teclado digite o átomo ou grupo que deseja ser introduzido no local e depois pressione Enter. (TBU – Terc – Butil)



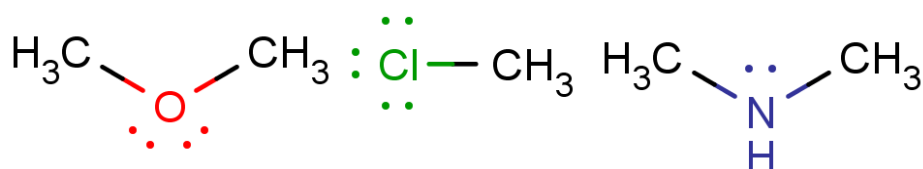
3 – Structure – Check Structure – Auto Check: Permite que o programa faça correções em ligações, valências, cargas e tamanho da ligação presentes na cadeia em construção. Quando houver um erro, ele será destacado e se a opção Auto Check estiver marcada além do erro, ele mostrará sugestão de alteração.



4 – Structure Display: Permite que você utilize as visualizações do Marvin View no Marvin Sketch durante a construção da sua molécula.

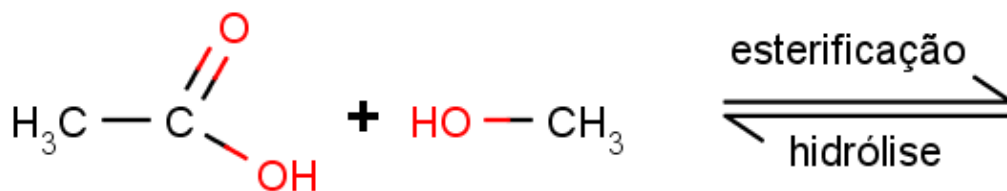


5 – View – Advanced – Lone Pairs: Permite que você coloque par de elétrons livres em um átomo, explorando a possibilidade de uma ligação dativa ou a propriedade de base de Lewis das aminas, por exemplo.

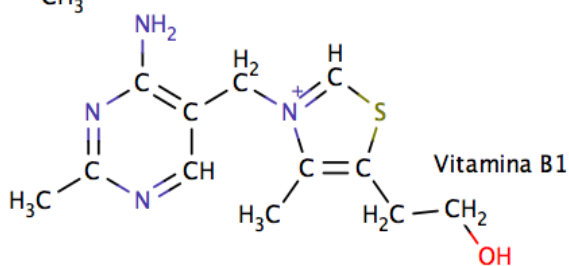
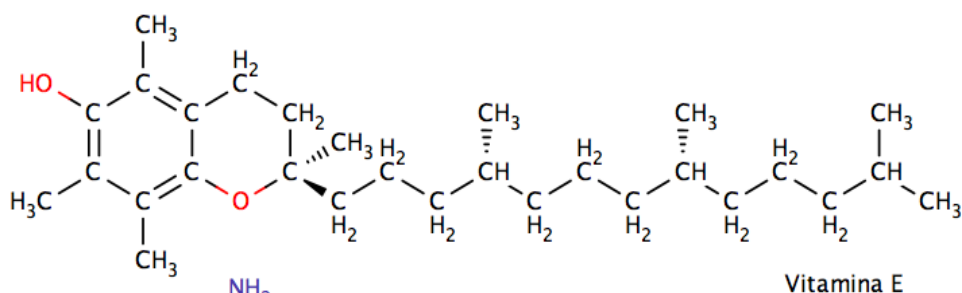


Exercícios - parte V:

A - Construa e complete a reação abaixo, sabendo que a água é um dos produtos da reação direta

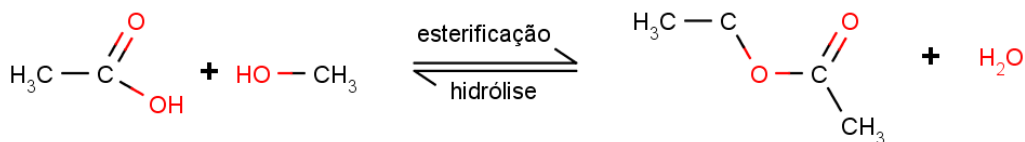


B - Classifique as vitaminas abaixo em lipossolúveis ou hidrossolúveis.

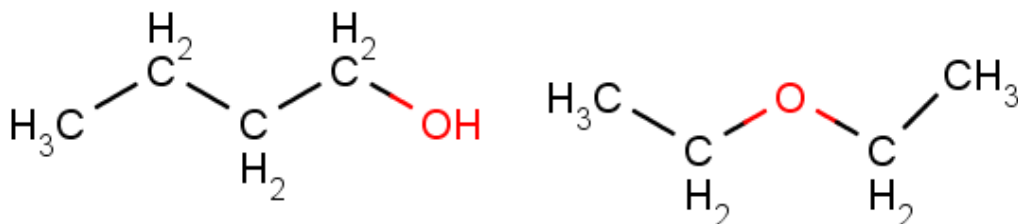


C - Construa a estrutura do butanol - 1 e do etoxi - etano e estabeleça o tipo de isomeria existente entre eles.

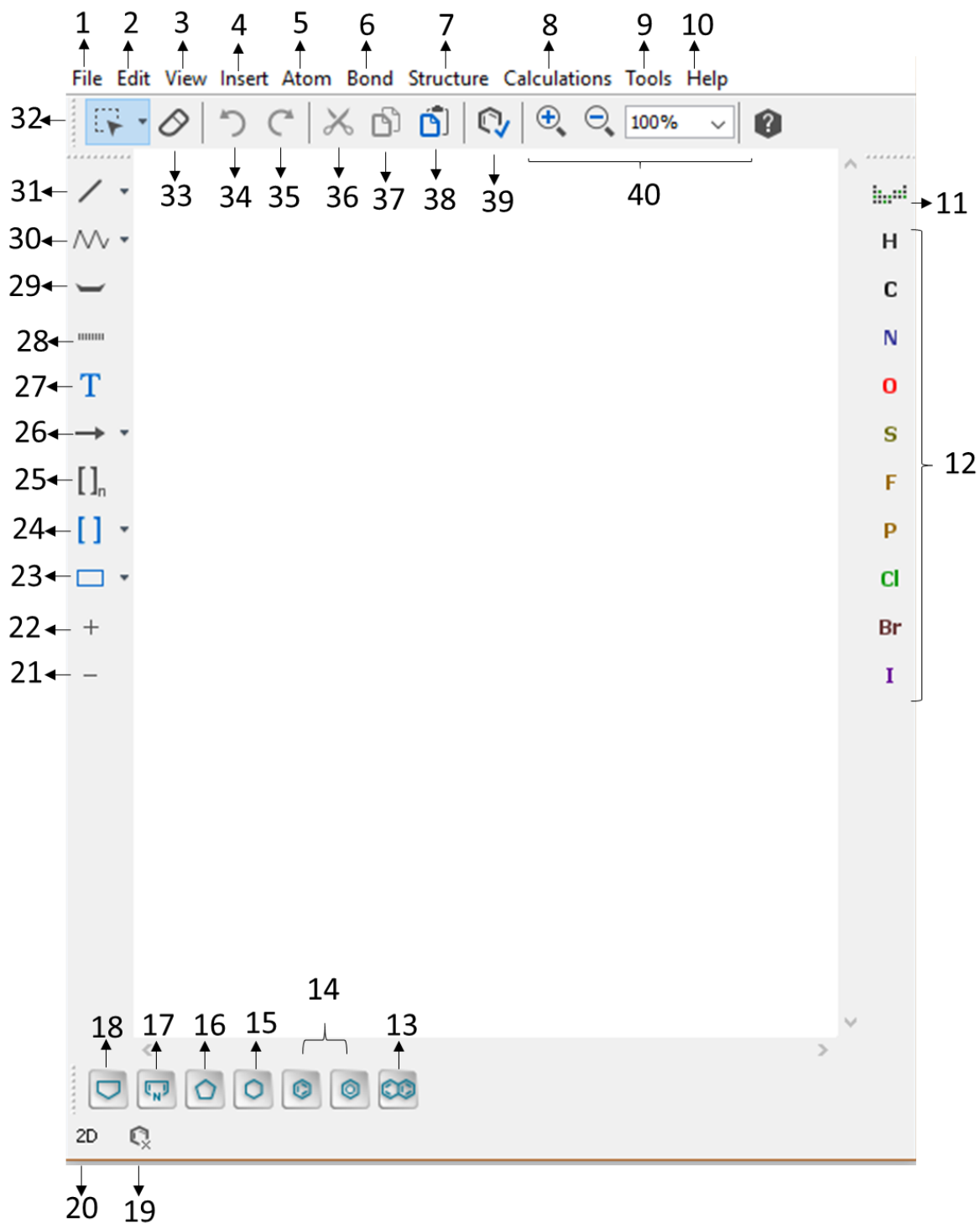
Respostas



B - A vitamina E é lipossolúvel e a vitamina B1 é hidrossolúvel.



Isomeria plana de função (álcool e éter)



REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BRAGA, C. F.; GOMES, G. J. A. **Computação para a Química**. Universidade Federal da Paraíba. Disponível em: http://www.quimica.ufpb.br/monitoria/Disciplinas/computacao_quimica/material/comp_quimica.pdf . Acesso em 10 de out. 2015.

CHEMAXON, **MarvinSketch version 6.2.3**. ChemAxon Ltd., Budapeste, Hungria, www.chemaxon.com , 2014.

CHEMELLO, Emiliano. **Curso de informática aplicada ao aprendizado da química** – módulo 01 software para desenho molecular (ACD/ChemSketch). Universidade de Caxias do Sul. Disponível em: <http://www.ecientificocultural.com/ftp/manual.pdf> . Acesso em 10 de abr. 2015.

LEITE, Bruno Silva. **Tecnologias no ensino de Química: teoria e prática na formação docente**. 1 ed. Curitiba – PR, Editora Appris, 2015, 365 p.