Accord para Excel e Access (Uma ferramenta Química)

JOÃO PAULO LEAL*

O comentário que aqui se apresenta não é a um programa propriamente dito, mas sim a dois adicionais ("Add-On" em inglês) que vêm trazer novas possibilidades a utilitários incluídos no pacote Office. Trata-se do *Accord 2.0* para *Excel* e do *Accord 1.1a* para *Access*, produzidos pela *Synopsys* e gentilmente oferecidos à Sociedade Portuguesa de Química (SPQ). O primeiro deles exige *Windows 3.1* e *Excel 4.0* ou versões superiores, pede 2.5 MB de disco e 2 MB de memória. O segundo é mais guloso e para além do *Windows 3.1* (a correr num 486) e do *Access 2.0* necessita de 8 MB de disco e outros tantos de memória. E posto isto, vamos ver o que eles fazem.

O *Accord* para *Excel*, transforma a vulgar folha de cálculos numa folha que passa a entender alguma química. Após a instalação aparece uma nova barra de tarefas com uma série de novos ícones, bem como um novo menu "Drop-down" intitulado "Chemistry" (desculpem-me os puristas mas nisto de computadores há termos que são danados para traduzir). Embora a função de cada um dos ícones não sejam imediatamente clara, parando sobre eles aparece uma etiqueta amarela com a descrição da operação como é normal nos programas da família *Microsoft*.

Podemos agora abrir um dos exemplos fornecidos com o programa e aparece-nos uma folha aparentemente idêntica a qualquer outra. Mas basta um duplo-clique no nome de um dos compostos listados para aparecer a fórmula estrutural do mesmo (Fig. 1).

E tal como outra informação essas fórmulas podem ser criadas, copiadas, cortadas e coladas para outras células da folha. É possível ainda efectuar pesquisas sobre as fórmulas, não só usando como critério os átomos que a compõem (fórmula bruta) mas, pesquisando também por sub-estrutura ou grupo funcional. As condições para a pes-

quisa são facilmente introduzidas numa caixa de diálogo. O resultado, que consiste num pequeno "workbook" adicional, pode depois ser trabalhado à parte. Por exemplo, pode ser ordenado, para além dos modos clássicos duma folha de cálculo, por semelhança entre as estruturas. Para além disso a pesquisa pode ser estereoquimicamente orientada reconhecendo, por exemplo, moléculas como alenos, olefinas ou complexos organometálicos octaédricos diferenciando os respectivos isómeros.

Existem também três botões na barra de tarefas que permitem a partir da fórmula estrutural calcular a fórmula bruta, a massa molar e a composição percentual de cada um dos elementos. São cálculos simples mas sempre úteis, tanto mais que podem ser incluídos em outros cálculos mais elaborados.

Falta apenas dizer que as estruturas podem ser transferidas individualmente de e para o programa utilizando o "Clipboard" ou em alguns

casos (p. ex. *ChemDraw* e *ISISDraw*) por conversão de ficheiros.

Depois de tudo isto para o *Excel*, o que dizer do *Accord* para *Access*. Talvez baste dizer que segue a mesma filosofia e que adapta as várias operações que o *Access* possui para que possam reconhecer estruturas químicas. Imagine as possibilidades de uma base de dados relational em que um ou mais dos seus campos são estruturas químicas. Só mesmo experimentando. Recomenda-se.

NOTA FINAL

O *Accord* para *Excel* e para *Access* tem versões para Mac, mas não foram testadas. Qualquer informação adicional pode consultar-se em <http://www.synopsys.co.uk>

* Dep. Química, ITN, Sacavém.

Fig. 1 - Ecrã do *Excel* com o *Accord* mostrando a nova barra de ferramentas e as fórmulas estruturais.