

**“PROGAQ” - PROGRAMA PARA GERENCIAMENTO DE ALMOXARIFADOS DE QUÍMICA**

Joel Jones Jr.

Instituto de Química - Universidade Federal do Rio de Janeiro - Ilha do Fundão, C.T. bloco A, 6ª andar - CP 68563 21945-970 - Rio de Janeiro - RJ - E.Mail - JJONES@DQO.IQ.UFRJ.BR

Recebido em 8/12/94; aceito em 4/7/95

The “PROGAQ” software manages a chemical stock-room and furnishes information about structure, molecular formula, physical constants of the substances. One of the best point of “PROGAQ” is the possibility of querying it using keywords (five for each compound) giving the complete list of chemicals of that class in your stock-room in few seconds .

**Keywords:** software; substance parameters; chemicals.

**INTRODUÇÃO**

Um dos maiores problemas em um laboratório de pesquisa é o gerenciamento do seu almoxarifado de reagentes com eficiência. Vários são os problemas que acarretam em um mal gerenciamento, sendo os mais comuns: o não aproveitamento dos compostos disponíveis no almoxarifado devido ao desconhecimento dos materiais nele contidos e a falta de um conhecimento rápido das mudanças do seu estoque para permitir aplicação eficiente de verbas em um curtíssimo espaço de tempo. Só esses dois problemas já justificam um investimento em um produto que os solucione.

Tentando solucionar esses problemas, desenvolvemos um programa chamado “PROGAQ” tendo como base o aplicativo “Paradox for Windows<sup>®</sup>”, fornecido pela Borland. O programa “PROGAQ” possibilita ao usuário inserir as estruturas e fórmulas moleculares, estoque, estoque mínimo, controle de entrada e saída, localização, constantes físicas e, principalmente, a inclusão de palavras-chave para cada item do almoxarifado.

Um conjunto bem escolhido de palavras-chave possibilita ao usuário descobrir rapidamente quais as classes de compostos que são disponíveis no almoxarifado otimizando, em muito, o seu trabalho de pesquisa.

**PROGRAMA “PROGAQ”**

O programa “PROGAQ” é composto de dois conjuntos de dados. A tabela 1 apresenta os 28 campos do conjunto de dados principal. A tabela 2 mostra os campos de um conjunto de dados coadjuvante que serve para controlar a entrada e saída de compostos por usuário principal.

A figura 1 mostra como o programa se apresenta na tela. A tela principal foi dividida em duas para facilitar a visualização.

O “PROGAQ” apresenta algumas características que são de extrema utilidade. O programa possibilita que o usuário veja, se desejar, a estrutura molecular dos compostos que, em muitos casos, são substâncias que passam anos guardadas no almoxarifado por possuírem nomes pouco comuns.

Utilizando as palavras-chaves é possível se listar em segundos todos os aldeídos que possuem ligação dupla C=C, ou terpenos aromáticos que também são cetonas e assim por diante. No exemplo da figura 2a e 2b é mostrado que inquirindo sucessivamente o almoxarifado fictício da figura 1 através de palavras-chaves, sairemos com uma lista de dois terpenos disponíveis que são hidroxilados.

**Tabela 1. Campos Básicos**

Campo	Identificação
campo - 01	Nome do composto
campo - 02	Estrutura Molecular
campo - 03	Localização
campo - 04	Estoque
campo - 05	Estoque Mínimo
campo - 06	Unidade
campo - 07	# átomos de carbono
campo - 08	# átomos de hidrogênio
campo - 09	# átomos de oxigênio
campo - 10	# átomos de nitrogênio
campo - 11	# átomos de enxofre
campo - 12	# átomos de flúor
campo - 13	# átomos de cloro
campo - 14	# átomos de bromo
campo - 15	# átomos de iodo
campo - 16	# átomos de fósforo
campo - 17	# átomos de “outros”
campo - 18	Palavra-chave I
campo - 19	Palavra-chave II
campo - 20	Palavra-chave III
campo - 21	Palavra-chave IV
campo - 22	Palavra-chave V
campo - 23	Ponto de Ebulição
campo - 24	Ponto de Fusão
campo - 25	Atividade Ótica
campo - 26	Periculosidade
campo - 27	Observações
campo - 28	Fluxo

**Tabela 2. Campos daFicha de Controle**

campo 1	Composto
campo 2	Nome
campo 3	#
campo 4	Entrada
campo 5	Saída
campo 6	Quantidade

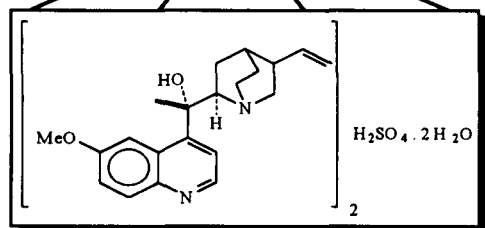
Uma outra utilidade é o controle de entrada e saída dos compostos que é feita por fichas individuais para cada um deles (figura 3).

Paradox for Windows

File Edit Table Record Properties Window Help

Table : PROGAQ.DB

PROG	Composto	Estrut	Estoques	Local	Est. Min.	Unid.	C	H	O	N	S	Br	Cl	I	F	P	M	Obs.	Fluxo	Peric.
1	1,2-bis-(2-metoxi-etoxi)etano	DB Graç	1,50	18-H	0,20	L	08	18	04											
2	1,2-epóxi-limoneno (+)	DB Graç	250,00	FH-1	50,00	g	10	16	01											
3	1,2-epóxi-limoneno (-)	DB Graç	250,00	FH-1	50,00	g	10	16	01											
4	1,3-dicloro-2-propanona	DB Graç	10,00	4-J	5,00	g	03	04	01				02							
5	1-bromo-6-cloro-hexano	DB Graç	25,00	3-U	5,00	g	06	12				01	01							
6	1-cloro-3-iodo-propano	DB Graç	30,00	3-E	5,00	mL	03	08					01	01						
7	4-(trimetil-silil)-morfolina	DB Graç	5,00	3-U	1,00	g	07	17	01	01							Si			
8	acetato cúprico	DB Graç	750,00	P1-H	100,00	g	04	06	04								Cu			
9	acetona d6	DB Graç	10,00	4-V	2,00	mL	03		01								6D			
10	acetonitrila d3	DB Graç	10,00	4-V	2,00	g	02			01							3D			
11	ciano-boroidreto de sódio	DB Graç	10,00	2-J	2,00	g	01	03		01							Na, B			
12	fluoreto de tetrabutílamônio	DB Graç	10,00	8-J	20,00	g	18	38		01				01						
13	fosfato de sódio bibásico	DB Graç	2.000,00	C-603	200,00	g	01	04							01		2Na	hidra		
14	Lawesson	DB Graç	200,00	18-A	50,00	g	14	14	02		04									
15	limoneno (d)	DB Graç	5.000,00	FH-1	300,00	mL	10	16												
16	óxido de 1-fenil-propileno (+)	DB Graç	1,00	FH-1	0,50	g	09	10	01											
17	p-menten-9-ol (+)	DB Graç	10,00	29-H	1,00	g	10	18	01											
18	perill álcool (S) (-)	DB Graç	50,00	29-I	5,00	g	10	18	01											
19	perodato de sódio	DB Graç	30,00	P1-AP	10,00	g			04					01			Na			
20	sulfato de quinidina	DB Graç	200,00	29-H	10,00	g	42	58	10	04										



Hidratado com 7. H<sub>2</sub>O

Paradox for Windows

File Edit Table Record Properties Window Help

Table : PROGAQ.DB

PROG	Composto	P. Chave I	P. Chave II	P. Chave III	P. Chave IV	P. Chave V	P. E	P. F	At. Olica
1	1,2-bis-(2-metoxi-etoxi)etano	éter	alifático	poliéter	solvente		221	-45	
2	1,2-epóxi-limoneno (+)	epóxido	olefina	ciclo	terpeno		113(00)		(+)
3	1,2-epóxi-limoneno (-)	epóxido	olefina	ciclo	terpeno		113(00)		(-)
4	1,3-dicloro-2-propanona	cetona	alifático				118		
5	1-bromo-6-cloro-hexano	alifático					110(0)		
6	1-cloro-3-iodo-propano	alifático					170		
7	4-(trimetil-silil)-morfolina	silano							
8	acetato cúprico	carboxilato							
9	acetona d6	solvente	deuterado				55	-63	
10	acetonitrila d3	solvente	deuterado						
11	ciano-boroidreto de sódio	reductor							
12	fluoreto de tetrabutílamônio	sal de amônio							
13	fosfato de sódio bibásico	ácido inorgânico	sal inorgânico	base inorgânica					
14	Lawesson	tioetona	tioéster	aromático	sulfeto			227	
15	limoneno (d)	olefina	ciclo	dieno	terpeno		178		d
16	óxido de 1-fenil-propileno (+)	epóxido	aromático	alifático			201	(+)	
17	p-menten-9-ol (+)	álcool	olefina	ciclo	terpeno		115(10)		(-)
18	perill álcool (S) (-)	álcool	olefina	ciclo	terpeno		119(11)		(-)
19	perodato de sódio	sal inorgânico	oxidante						
20	sulfato de quinidina	piridina	álcool	éter	olefina	alcalóide			d

Figura 1.

(Pergunta feita para a figura 1: Quais compostos são terpenos?)

TERPENQ	Composto	Local	Estoque	Unid.	P. Chave I	P. Chave II	P. Chave III	P. Chave IV	P. Chave V
1	1,2-epóxi-limoneno (+)	FH-1	250,00	g	epóxido	olefina	ciclo	terpeno	
2	1,2-epóxi-limoneno (-)	FH-1	250,00	g	epóxido	olefina	ciclo	terpeno	
3	limoneno (d)	FH-1	5.000,00	mL	olefina	ciclo	dieno	terpeno	
4	p-menten-9-ol (+)	29-H	10,00	g	álcool	olefina	ciclo	terpeno	
5	perilil álcool (S) (-)	29-I	50,00	g	álcool	olefina	ciclo	terpeno	

Figura 2a.

(Pergunta feita para a figura 2a: Quais compostos são álcool?)

ALCOOL	Composto	Local	Estoque	Unid.	P. Chave I	P. Chave II	P. Chave III	P. Chave IV	P. Chave V
1	p-menten-9-ol (+)	29-H	10,00	g	álcool	olefina	ciclo	terpeno	
2	perilil álcool (S) (-)	29-I	50,00	g	álcool	olefina	ciclo	terpeno	

Figura 2b.

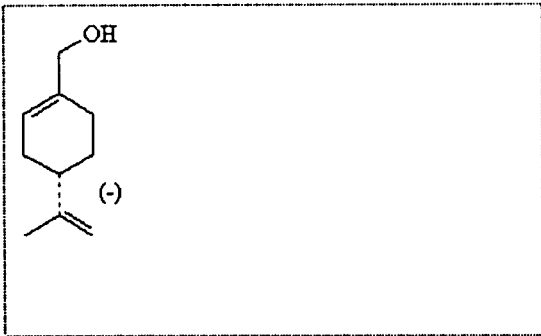
### Ficha de Controle das Substâncias

Paradox for Windows

File Edit Form Record Properties Window Help

Form: JOELII.FSL [Data Entry]

Composto:  Local:

At.Otica:  Estrut: 

P.F:

P.E:

**CONSUMO**

#	Nome	Entrada	Saida	Quant
01	Marcio	10/01/94		50,00
02	Frávia		24/05/94	5,00
03	Faliffa		2/08/94	10,00

Estoque:  Unid.:

Est. Min.:

Figura 3.

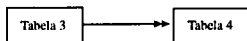
O programa leva em conta, ainda, que fazendo-se uma simples subtração dos campos "Estoque - Estoque Mínimo" pode-se detectar a falta de um ou mais reagentes com extrema facilidade, possibilitando que se gere uma lista de materiais a serem comprados rapidamente, agilizando e otimizando o desembolso de verbas.

### CONSTRUÇÃO DO PROGRAMA "PROGAQ"

A construção do "PROGAQ" é extremamente simples. Entretanto, é bom ressaltar que é necessário que se tenha conhecimento prévio da arquitetura do "Paradox for Windows" ou de outro banco de dados equivalente, sem o que as informações

abaixo não passarão de simples códigos.

O "PROGAQ" é constituído de dois menus. Esses menus podem ser vistos nas tabelas 3 e 4. Fazendo-se a conexão das duas tabelas teremos o corpo básico do "PROGAQ" com extrema facilidade e rapidez.



**Tabela 3.** Constuição dos Campos Básicos

	Field Name	Type	Size	Key
1	Composto	A	70	*
2	Estrut.	G	40	
3	Local	A	10	
4	Estoque	N		
5	Est.Mim.	N		
6	Unid.	A	2	
7	C	A	2	
8	H	A	2	
9	O	A	2	
10	N	A	2	
11	S	A	2	
12	F	A	2	
13	Cl	A	2	
14	Br	A	2	
15	I	A	2	
16	P	A	2	
17	M	A	2	
18	P.Chave I	A	20	
19	P.Chave II	A	20	
20	P.Chave III	A	20	
21	P.Chave IV	A	20	
22	P.Chave V	A	20	
23	P.E.	A	15	
24	P.F.	A	10	
25	At.Otica	A	5	
26	Peric.	A	100	
27	Obs.	F	200	
28	Fluxo	N		

**Tabela 4.** Construção da Ficha de Controle

	Field Name	Type	Size	Key
1	Composto	A	70	*
2	#	A	3	*
3	Nome	A	70	
4	Entrada	D		
5	Saida	D		
6	Quant.	N		

As estruturas moleculares são geradas por quaisquer programas para esse fim em ambiente "Windows", tais como Chemwin, Whimp 2001, ChemDraw.

#### PALAVRAS-CHAVES X QUESTIONAMENTO

Como foi dito anteriormente a inclusão de palavras-chaves é um dos pontos principais do "PROGAQ". Na figura 1 podem ser vistas algumas sugestões. Um exemplo interessante é o composto nº 5 onde 1-bromo-6-cloro-hexano possui a palavra "alifático" como única palavra-chave. Poderia se pensar em colocar como palavras-chaves "bromado" e "clorado", entretanto, quando se quiser os compostos que contenham um átomo de cloro é só se perguntar por todos compostos que possuam "01" átomos de cloro na coluna "Cl". Nesse exemplo fica claro que todos os campos podem ser utilizados para o questionamento do "PROGAQ", possibilitando assim uma infinidade de variações.

Pela nossa experiência o programa "PROGAQ" é de extrema utilidade no gerenciamento dos almoxarifados e possibilita otimização de todos os materiais disponíveis em nossos laboratórios.

#### AGRADECIMENTOS

Agradecemos aos Profs. Marcio C. S. de Mattos e W. B. Kover pelas sugestões e ajuda, e a Alcino P. de Aguiar que, com as suas sugestões, tornou o "PROGAQ" muito mais eficiente do que o plano original.