

RECURSO EDUCATIVO ABIERTO: HIBRIDACIÓN DEL ÁTOMO DE CARBONO: VISUALIZACIÓN DE MOLÉCULAS 3D EN EL PROGRAMA RASMOL

GUÍA NO 2. VISUALIZACIÓN DE MOLÉCULAS EN 3D

SIGUE CADA UNO DE LOS PASOS QUE SE DESCRIBEN EN LAS SIGUIENTE GUÍA

Rasmol es un excelente visualizador de moléculas en 3 dimensiones, que además, es gratis. Alrededor de Rasmol se ha construido toda una comunidad de usuarios, que ha generado que el programa se haya desarrollado muy rápidamente. Soporta los formatos moleculares más extendidos, como pdb, mol, mdl, xyz, etc., por lo cual es muy sencillo encontrar moléculas en las numerosas bases de datos de la red. Por otra parte, podemos crear nuestras propias moléculas, si así lo deseamos, aunque no es necesario, como indico más arriba, pues se consiguen con gran facilidad en Internet.

Existen versiones para casi todos los sistemas operativos y, es relativamente fácil encontrar manuales de uso en múltiples idiomas.

Descarga:

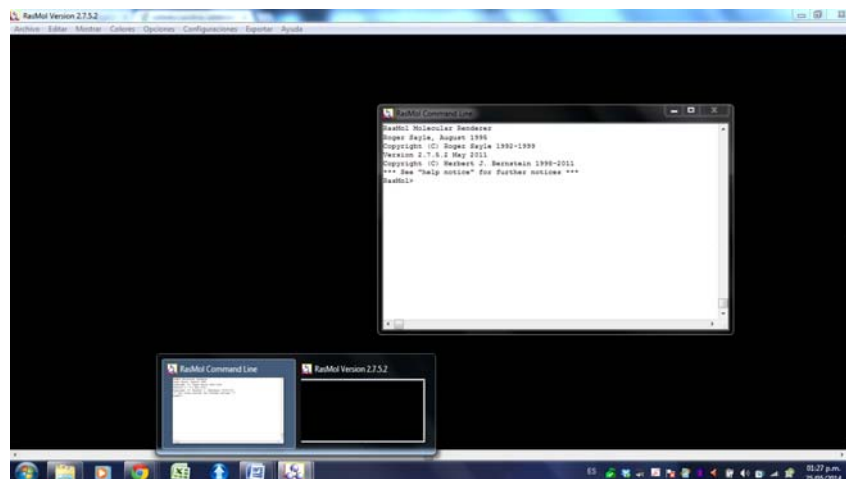
Este software se puede descargar de la página www.RasMol.org y www.OpenRasMol.org.

En la parte superior de la página mencionada anteriormente, se encuentran los links con la información correspondiente a copia y seguridad, contenido, distribución, manual, historia, entre otros.

Al lado izquierdo de la pantalla se selecciona el vínculo: **RasMol Latest Windows Installer**, al seguir las instrucciones, se evidencia que la descarga se hace en un minuto, se escoge el idioma de preferencia. Una vez instalado, se hace ingreso al programa.

Inicio del Programa

Para empezar RasMol, se hace doble clic en el icono RasMol del gestor de programas. Al empezar RasMol, el programa muestra una única ventana principal (la ventana de la pantalla) con un fondo negro en la pantalla y proporciona la ventana de línea de comandos, minimizada, como un pequeño icono en la parte inferior de la pantalla.



La línea de comandos o la ventana del terminal se pueden abrir haciendo doble clic en este icono RasMol.

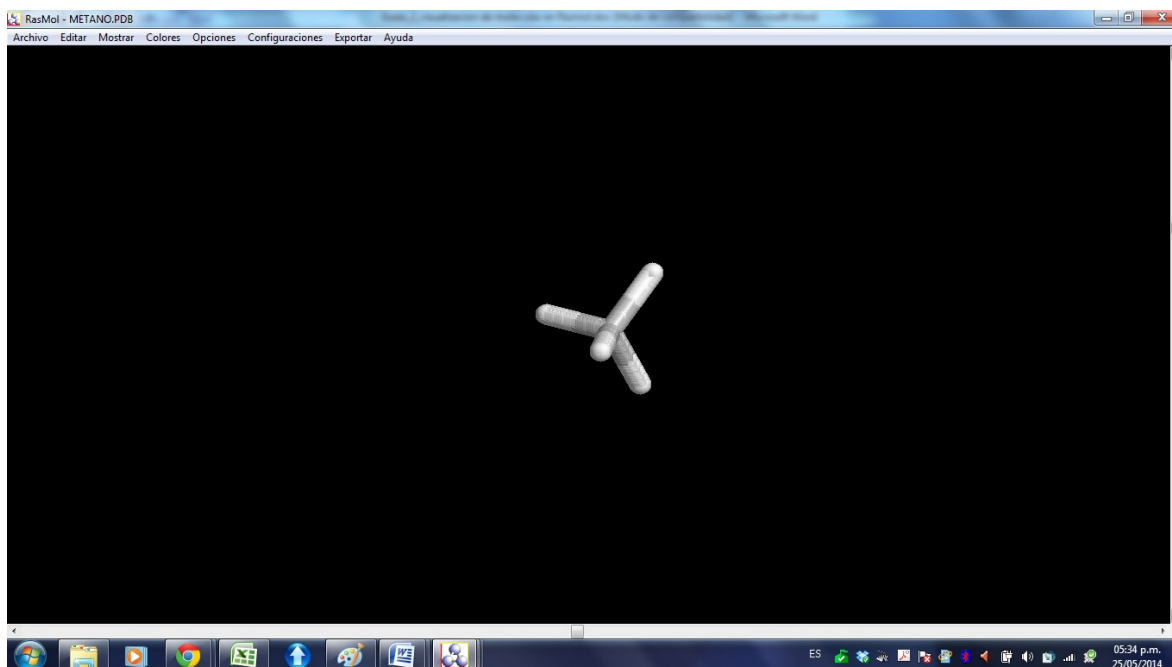
1. Introduce en el buscador de Internet la siguiente dirección:

<http://www.ehu.es/biomoleculas/moleculas/pdb/>

2. Selecciona las moléculas que se quieran visualizar en el programa, estas se descargarán automáticamente en el computador con la extensión *.pdb*, algunas sugerencias son:

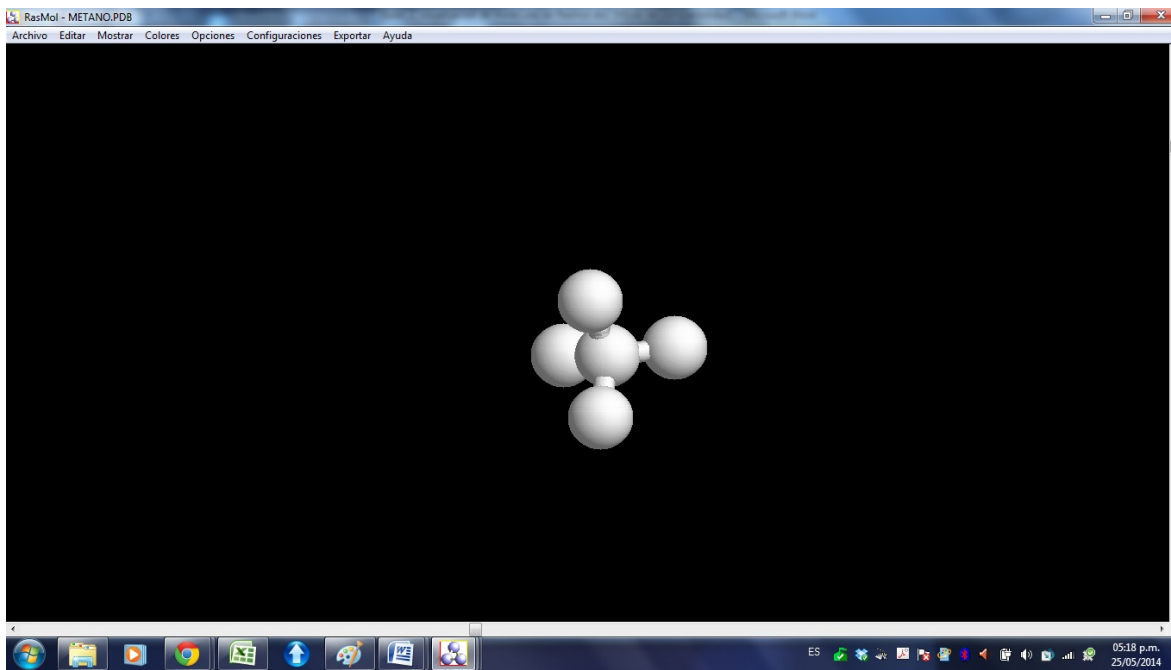
ALCANOS/CICLOALCANOS	ALQUENOS /CICLOALQUENOA	ALQUINOS
HIBRIDACIÓN SP ³	HIBRIDACIÓN SP ²	HIBRIDACIÓN SP
Metano.pdb	Eteno.pdb	Etino.pdb
Butano.pdb	Metilpropeno.pdb	Propino.pdb
Ciclo6.pdb	Ciclohexeno.pdb	Butino.pdb
Ciclo3.pdb	Propeno.pdb	1-hexino.pdb
Etano.pdb	Benceno.pdb	

3. Abrir el archivo con el programa rasMol, ejemplo abrir el archivo metano.pdb:

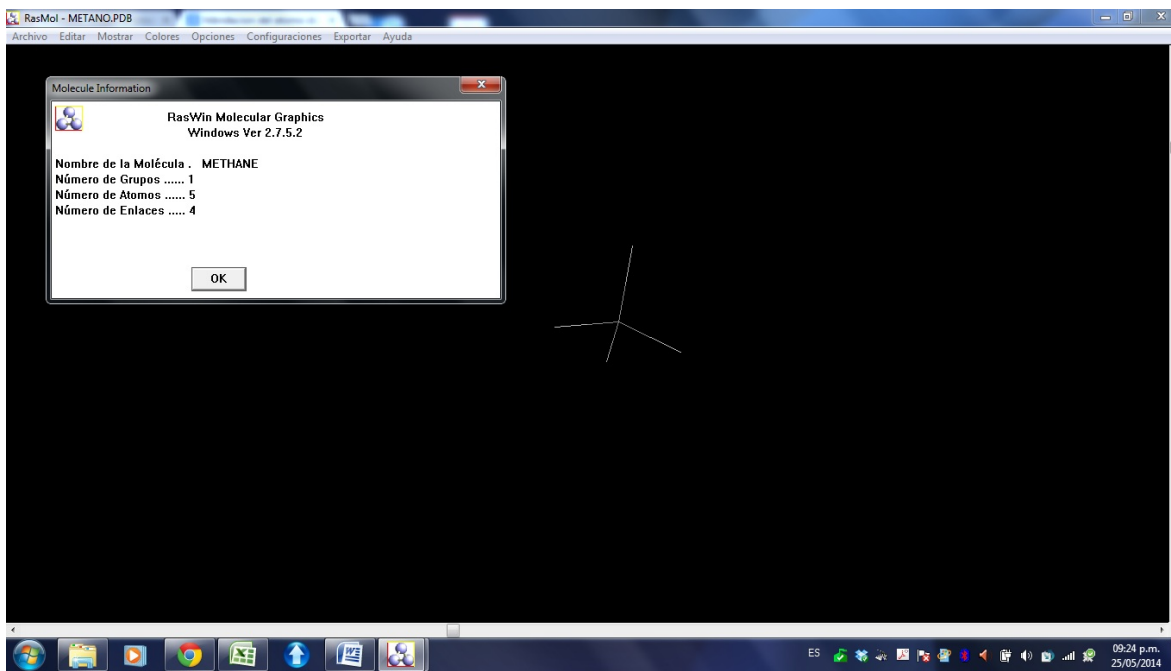


4. En el menú **Mostrar**, escoger y probar la visualización con cada una de las opciones que allí se especifican:
 - Alambre
 - Esqueleto
 - Bastones
 - Espacio completo
 - Bolas y bastones

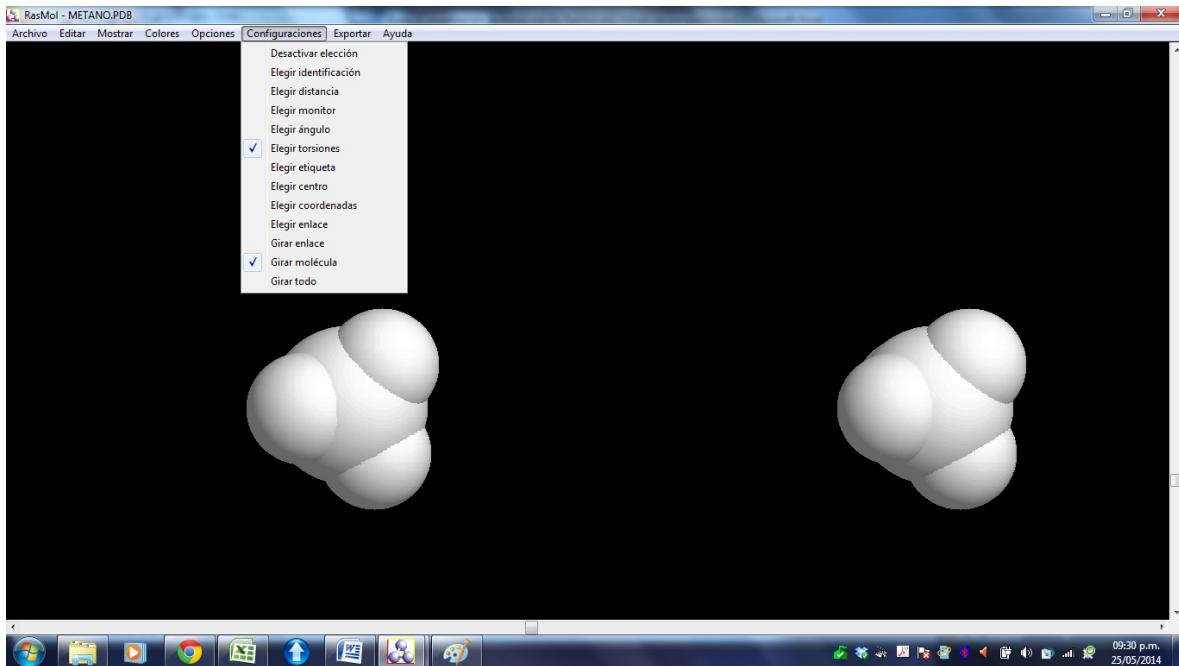
- Cintas
- Hebras
- Dibujos



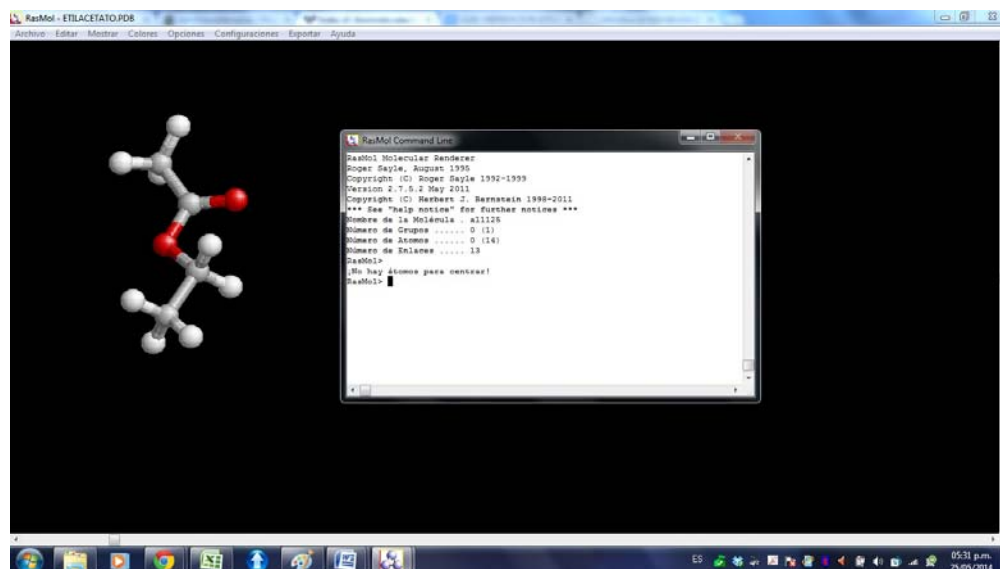
5. Ingresar al menú **Archivo** y seleccionar la opción información allí se despliega un cuadro blanco con la información de enlaces, y número de átomos para la molécula estudiada:



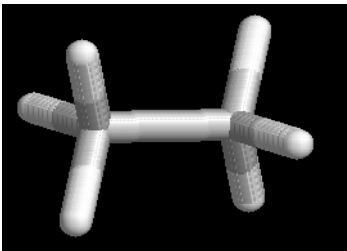
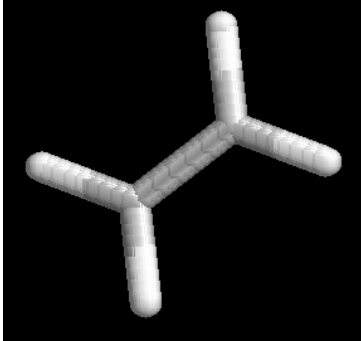
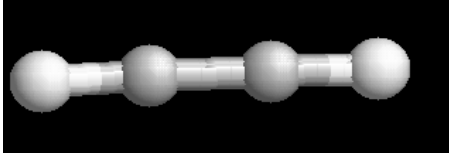
- Ingresar a cada uno de los menús que se ubican en la parte superior y probar los cambios que se evidencian en la visualización de la molécula, con el mouse se puede mover hacia cualquier dirección la estructura molecular, se puede aumentar la imagen al hacer clic sostenido con la tecla shift y mover el mouse hacia afuera. Realiza la exploración con el número de moléculas que quieras. En el menú Configuración, se puede seleccionar cualquier opción que permite determinar los ángulos de enlace, distancia, coordenadas, entre otras:



- Revisa la ventana de comandos, allí se da la identificación de la molécula, el número de enlaces, de átomos, los ángulos, las distancias:



8. Resuelve las siguientes preguntas después de hacer la exploración con **Rasmol**:

ALCANOS/CICLOALCANOS	ALQUENOS /CICLOALQUENOA	ALQUINOS
HIBRIDACIÓN SP ³	HIBRIDACIÓN SP ²	HIBRIDACIÓN SP
Etano.pdb	Eteno	Propino.pdb
		
No de enlaces:	No de enlaces:	No de enlaces:
Ángulos de Enlaces:	Ángulos de Enlaces:	Ángulos de Enlaces:
No de átomos	No de átomos	No de átomos
Distancia entre átomos	Distancia entre átomos	Distancia entre átomos
Describe brevemente las diferencias estructurales que observa para cada una de las hibridaciones:	Describe brevemente las diferencias estructurales que observa para cada una de las hibridaciones:	Describe brevemente las diferencias estructurales que observa para cada una de las hibridaciones: