

Jmol para Principiantes

Bob Hanson
St. Olaf College, Northfield, MN
<http://www.stolaf.edu/people/hansonr>

Colegio Don Bosco
Cochabamba, Bolivia

22 Jun 2016



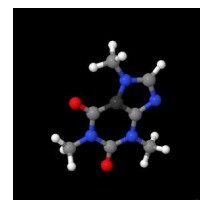
Temas para el Debate

- introducción general a Jmol
- capacidades generales
- ejemplos de la web
- empezamos y tiempo para la experimentación

introducción general a Jmol

Misión : visualización en tiempo real de la estructura molecular, la dinámica y la energética.

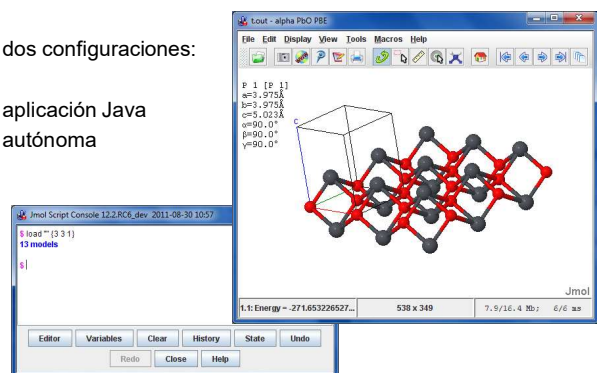
Jmol es :
código abierto
interdisciplinario
principalmente desarrollado con la entrada de los usuarios



introducción general a Jmol

dos configuraciones:

aplicación Java
autónoma

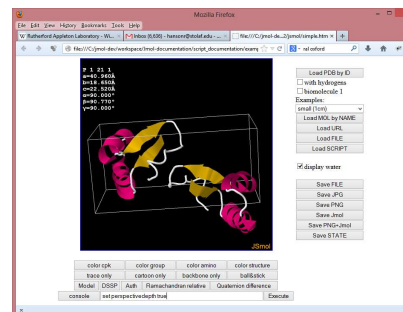


introducción general a Jmol

dos configuraciones:

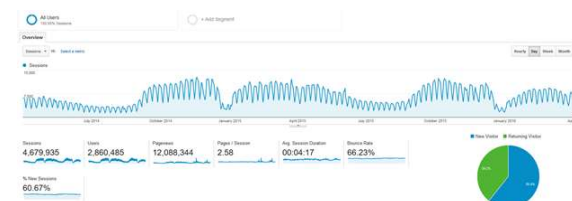
“JSmol” JavaScript
aplicación

agregado fácilmente
a cualquier
navegador web



introducción general a Jmol

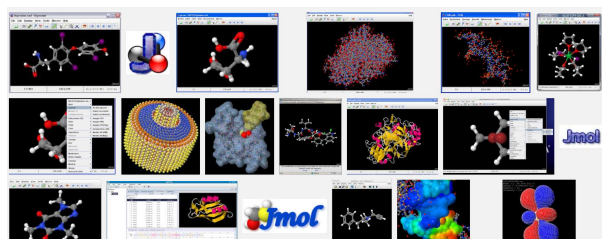
!es muy popular!



estadísticas par el periodo de 2015.03 a 2016.03

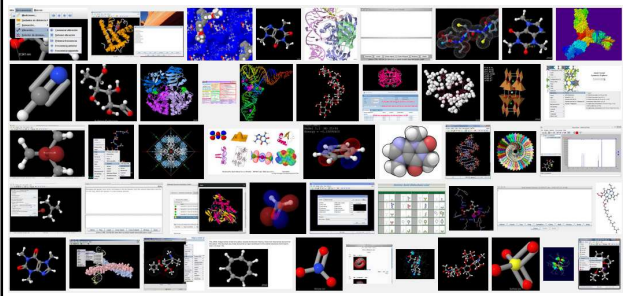
introducción general a Jmol

!es muy popular!



introducción general a Jmol

!es muy popular!



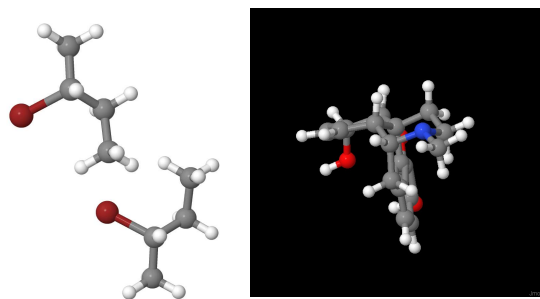
introducción general a Jmol

!es muy popular!



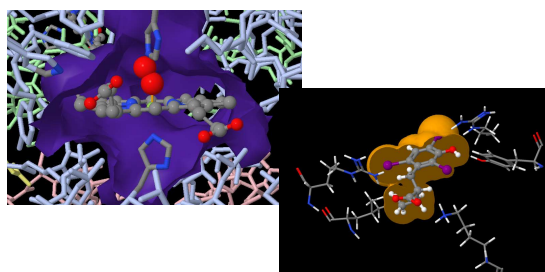
capacidades generales

moléculas pequeñas

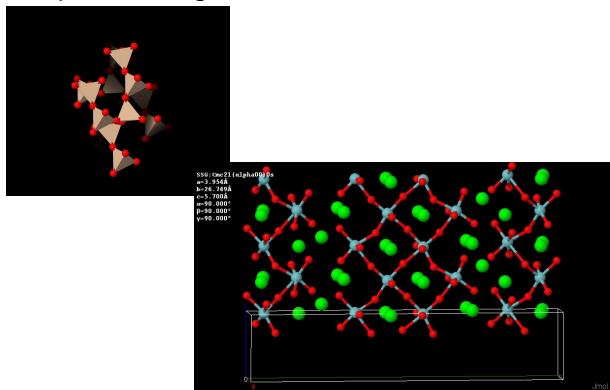


capacidades generales

biomoléculas

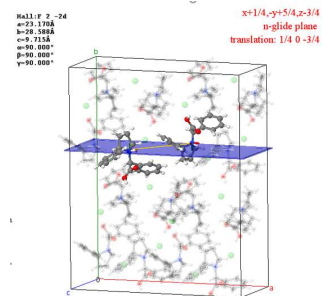
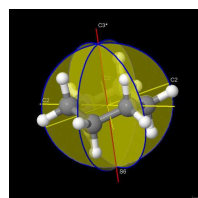


capacidades generales



capacidades generales

simetría

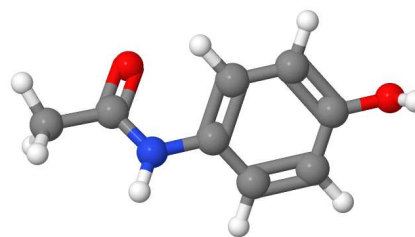


capacidades generales

varios archivos con millones de estructuras

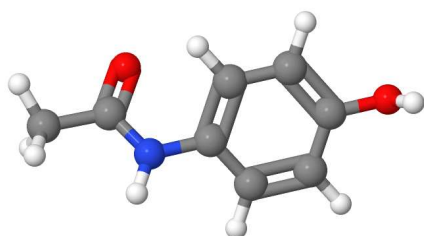
NCI Resolver	load \$3-bromotoluene
PubChem	load :Tylenol
RCSB	load =1crn; load ==HEM
PDBe	load *1crn

capacidades generales



construcción de los modelos *de novo* o de moléculas común

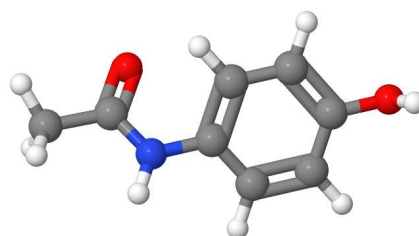
capacidades generales



Jmol

construcción de los modelos *de novo* o de moléculas común

capacidades generales

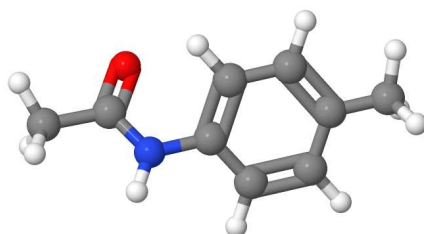


Jmol

construcción de los modelos *de novo* o de moléculas común

capacidades generales

|

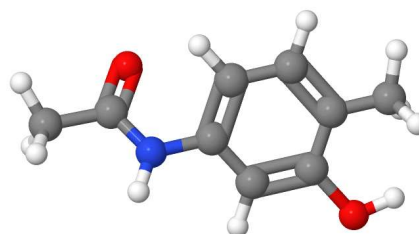


Jmol

construcción de los modelos *de novo* o de moléculas común

capacidades generales

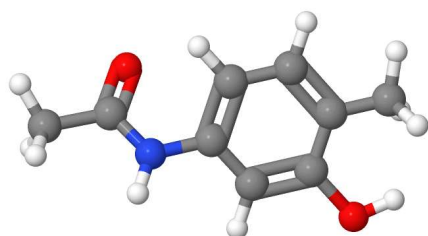
|



Jmol

construcción de los modelos *de novo* o de moléculas común

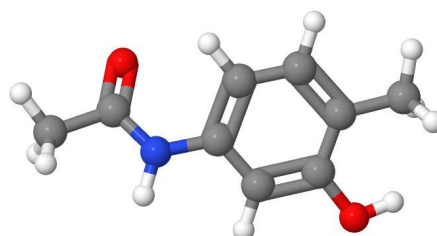
capacidades generales



Jmol

Minimización automática

capacidades generales

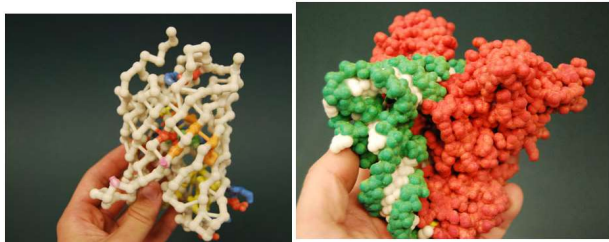


Jmol

Minimización automática

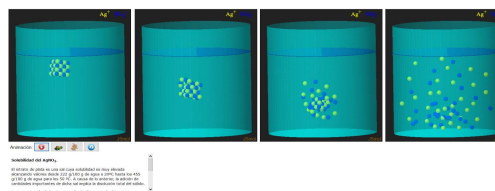
capacidades generales

Preparación para impresión 3d


<http://cbm.msos.edu/modGallery/GFP/gfpviewer.swf>
<http://cbm.msos.edu/modGallery/ribosome/riboviewer.swf>

ejemplos de la web

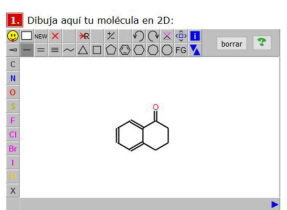
Visualizaciones en química



ejemplos de la web

Bricomoléculas

1. Dibuja aquí tu molécula en 2D:



2. Ponle un nombre:


3. Transfiere al panel derecho (se añadirán los H)

4. Optimiza la estructura en 3D. (Puede ser preciso varias veces; [ayuda](#))

5. Observa la molécula en 3D a la derecha.

6. También puedes obtener estructuras 3D escribiendo su nombre en Inglés: y después puedes [pasarla a 2D](#), por ejemplo para añadirle modificaciones.

mueve el modelo usando el ratón



Opciones avanzadas [ayuda](#)

Usar la versión Java de Jmol

ejemplos de la web

Galería visual 3D de moléculas química del carbono

Ejercicios de reconocimiento de moléculas 3D con JSmol. Puedes manipular la molécula con el ratón.

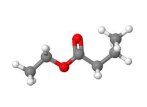
Elige la única respuesta correcta para cada pregunta.

Problemas adivinados: 1 Tu puntuación es 100%.

2. Indica el nombre de la molécula

☐ butano de alto
☐ etilbromuro
☐ etilbutanal
☐ etilbutano

Tipo de sustancias. Estructura de moléculas en 3D. Galería visual de moléculas del carbono en 3D.



ejemplos de la web

Biomodel

Estructura secundaria

Hélice alfa

recargar modelo

En este tipo de estructura secundaria el esqueleto peptídico se enrolla sobre sí mismo describiendo un helicoide compacto alrededor del eje longitudinal de la molécula.

Vemos aquí la hélice alfa formada por un pentadecapeptido (es decir, un péptido de 15 residuos aminoácidos).

☒ Resaltar la hélice

Podemos ☐ mostrar los planos peptídicos; observa que todos van girando de la misma forma.

Cada residuo se desplaza 0,15 nm a lo largo del eje con respecto al residuo anterior; y

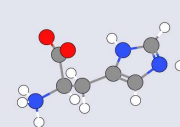


CHONPSFe

ejemplos de la web

BioMóvil

¿Qué aminoácido es este?



☐ alanina, Ala, A
☐ arginina, Arg, R

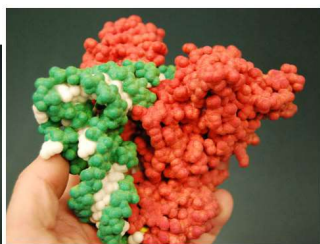
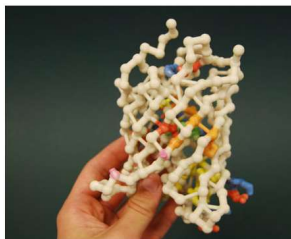
Evalúa mi respuesta

Otro

☐ alanina, Ala, A
☐ arginina, Arg, R

capacidades generales of Jmol

Output/Export Options

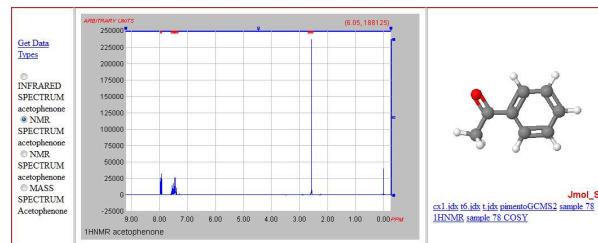


<http://cbm.msoe.edu/modGallery/GFP/gfpviewer.swf>

<http://cbm.msoe.edu/modGallery/ribosome/riboviewer.swf>

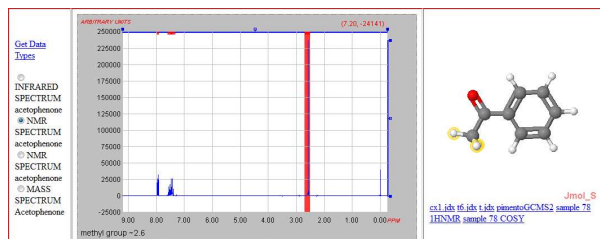
capacidades generales of Jmol

espectroscopia interactivo



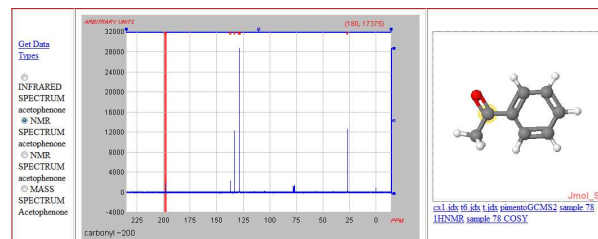
capacidades generales of Jmol

espectroscopia interactivo



capacidades generales of Jmol

espectroscopia interactivo



!Vámonos a empezar!



Ángel Herráez y Bob Hanson