

CICLO DE TALLERES

VISUALIZACION INTERACTIVA DE MOLECULAS EN 3D Y USO DE LOS RECURSOS Jmol

(I) Química general-inorgánica

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

Universidad Mayor de San Simón
 Cochabamba, Bolivia

28 Jun 2016

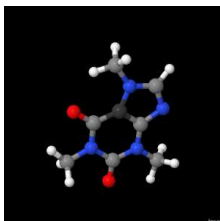
Temas para el Debate

- una breve introducción a Jmol
- discusión de los grupos
- capacidades generales de Jmol
- algunos ejemplos de la web
- discusión de los grupos
- tiempo para experimentar
- discusión

introducción general a Jmol

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

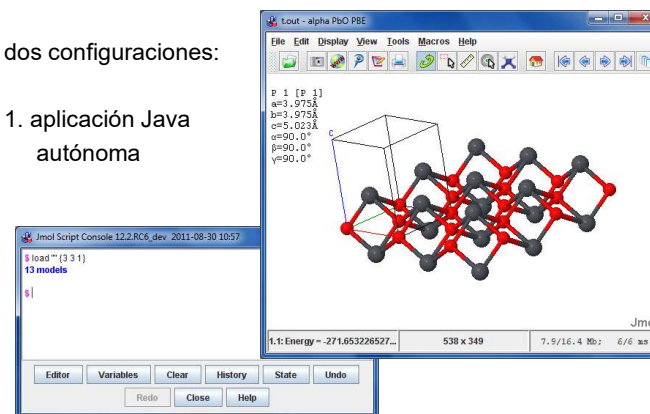
Jmol es :
 código abierto
 interdisciplinario
 principalmente desarrollado
 con la entrada de los usuarios



introducción general a Jmol

dos configuraciones:

1. aplicación Java
 autónoma



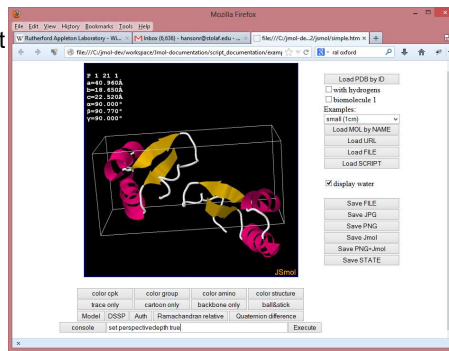
introducción general a Jmol

dos configuraciones:

2. "JSmol" JavaScript aplicación

tiene fácil acceso a cualquier navegador web

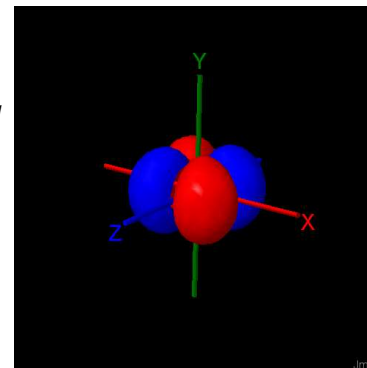
fácilmente adaptable a cualquier interés particular



capacidades generales

Orbitales atómicos

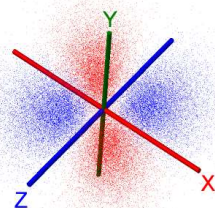
isosurface scale 3.0
phase atomicorbital 3 2 1
font axes 30
axes 0.2



capacidades generales

Orbitales atómicos

isosurface phase
atomicorbital 3 2 1
1.0 points 50000
background white



capacidades generales

varios archivos con millones de estructuras

en particular, para las moléculas pequeñas:

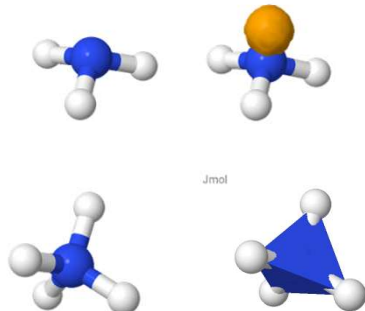
NCI Resolver *load \$3-bromotoluene*
 PubChem *load :Tylenol*

No solamente importante para la química orgánica

capacidades generales

"LCAOcartoon" y poliedros para enseñar la geometría molecular

```
load $ammonia
select _N
lcaocartoon create sp3d lp
```



```
load $ammonium
polyhedra bonds
```

capacidades generales

Moléculas simples para enseñar la geometría molecular

```
load $ammonia
load $ammonium
load $borane
load "$carbon dioxide"
load "$xenon tetrafluoride"
load "$phosphorus pentafluoride"
load "$sulfur hexafluoride"
```



Jmol

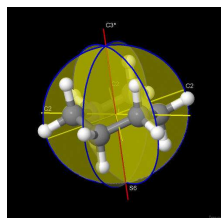
todos estas moléculas son de NCI, que se indica con \$
es importante utilizar las camillas cuando usamos
un espacio en el nombre de la molécula
es importante utilizar el nombre en inglés

capacidades generales

simetría

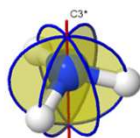
```
load $cyclohexane
draw pointgroup
```

C6H12
D3d



```
load $ammonia
draw pointgroup
```

H3N
C3v



algunos ejemplos – uso general de Jmol

la consola es para introducir más comandos

para introducir un comando

<http://chemapps.stolaf.edu/jmol/jsmol/simple2.htm>

algunos ejemplos – moléculas reales

CoolMolecules: A Molecular Structure Explorer

Search by:

- atoms
- bonds
- shape
- method
- text
- source

All of the 962 structures in the full database are actual, experimentally determined structures. They are displayed TO SCALE (100 pm = 1 cm on my screen). You can rotate them around to see them from different angles, and you can double click on them to check bond lengths and angles right on the model itself. If the model doesn't display, you may need to install the java plug-in (vary).

entry level ☒ expanded valence ☒ include metals ☒ pi complexes ☒ cool shapes ☒ full database ☒

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18

1 H He

2 Li Be B C N O F Ne

3 Na Mg Al Si P S Cl Ar

4 K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr

5 Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe

6 Cs Ba La Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb

7 Fr Ra Ac Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md No

transition metals

lanthanides

actinides

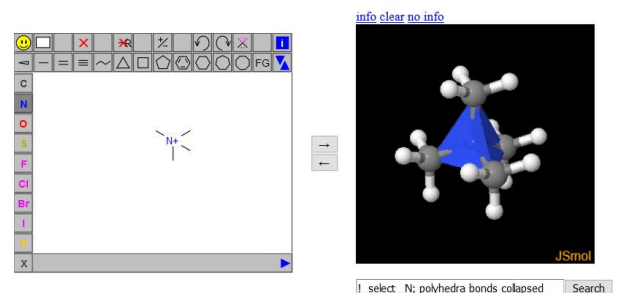
15 structures have silicon either in a central location or connected to it. Of these, 14 have silicon in a central location. (Show just these)

sort by: * center atom shape View All details

Sb tetrahedral	[Ga(CH ₃) ₂ (C ₂ H ₅ SSiC ₂)] ₃	silane	info view	CCDC
Si tetrahedral	SiH ₄	trifluoromethane	info view	
Si tetrahedral	SiH ₂ F ₂ (g)	trichloromethane	info view	
Si tetrahedral	SiHCl ₃ (g)	trichloromethane	info view	
Si tetrahedral	SiHBr ₃ (g)	trichloromethane	info view	
Si tetrahedral	SiF ₄ (g)	silicon tetrafluoride	info view	
Si tetrahedral	SiCl ₄ (g)	silicon tetrachloride	info view	

<http://www.stolaf.edu/depts/chemistry/mo/struc>

algunos ejemplos – 2D para 3D



observe que el símbolo "!" introduce un comando

<http://chemapps.stolaf.edu/jmol/jsmol/jsmetest2.htm>

algunos ejemplos – los grupos puntuales

Symmetry @ Otterbein

Home Tutorial Gallery Challenges Info Feedback

Point Group Type: All

Select Molecule:

- 12-crown-4
- 18-crown-6
- BH₃
- BrF₃
- C₆₀F₅₄
- S₈N₄
- [Ca(THF)₆]²⁺
- [Co₄(CO)₁₂] cluster
- [Cr(CO)₆]
- [Fe(C₃H₅N₃)₆]²⁺
- [Fe(η⁵-Cp)(P₃)₂]
- [Ir₄(μ₃-Cl)₁₂] cluster
- [MnCl(CO)₅]

Point Group = O_h

Reference: Whitaker, A.; Jeffery, J. W. Acta Cryst. 1967, 23, 977. DOI: 10.1107/S036511067004153. WebCSD: FOHCOU.

<http://symmetry.otterbein.edu/gallery>

algunos ejemplos – orbitales atómicos

