

# JMOL Y GEOMETRÍA MOLECULAR EN BACHILLERATO

María Belén Garrido Garrido (belengarrido@gmail.com)  
Colegio Guadalaviar. Valencia

## Resumen

La informática juega un papel muy importante en el campo del modelado y visualización espacial de modelos moleculares ya que facilita la elaboración y el uso de los mismos. Una aplicación ampliamente utilizada durante los últimos diez años para visualizar modelos moleculares en páginas web ha sido el *plug-in* Chemscape. En la actualidad es el visor Jmol es el que conjuga la mejor relación sencillez de uso/cantidad de recursos y está desplazando a Chime. Jmol es un visor Java de código abierto para estructuras químicas en tres dimensiones (<http://www.jmol.org/>). Tiene la ventaja de que como es un Applet de Java es multiplataforma y compatible con cualquier navegador de páginas web. La miniaplicación JmolApple puede integrarse en páginas web y es ideal para el desarrollo de material docente a través de la web.

Cuando se abre una página web implementada con Jmol, se visualizan directamente en la pantalla estructuras moleculares tridimensionales a partir de ficheros de coordenadas moleculares (pdb, mol y otros) embebidos en dichas páginas. Estos modelos son “*moléculas activas*” ya que permiten interactividad. Mediante el teclado y el ratón el usuario puede realizar sobre ellos distintas operaciones: giros, desplazamientos, cambios de tamaño, tipo de representación molecular, resaltar la estructura secundaria de una proteína o el esqueleto de un ácido nucleico, medir distancias y ángulos, entre otras.

En este trabajo se proponen una serie de actividades diseñadas en páginas web y basadas en Jmol. Están dirigidas a alumnos bachillerato y posibilitan un estudio interactivo de la geometría molecular de compuestos del tipo  $AX_n$ . Este enfoque enriquece el proceso de aprendizaje del aspecto tridimensional de las moléculas.