

Visualización de estructuras moleculares en 3D y su utilización en la práctica docente

Objetivos

- Introducción al uso de recursos informáticos de identificación y visualización de moléculas en 3D.
- Aplicación para la preparación de materiales de apoyo docente, en forma de presentaciones interactivas o de páginas web.

El contenido del curso se podrá adaptar para ajustarse a las necesidades e intereses de los asistentes.

Competencias a adquirir

- Identificación de recursos existentes que pueden usarse como apoyo para la docencia o para el desarrollo de actividades de aprendizaje.
- Discriminación de la utilidad y aplicabilidad de cada recurso.
- Capacidad para emplear el programa Jmol en la visualización de modelos que ilustren las propiedades de las moléculas acordes a los objetivos docentes.
- Autoría de materiales educativos adaptados a las necesidades particulares.

Método

Presentaciones y demostraciones multimedia. Trabajo mediante ejemplos con los asistentes. Actividades prácticas de construcción de material por los asistentes.

Requisitos: ordenador con Java instalado (cualquier sistema operativo); navegador de páginas web.

Programa tentativo

1. Demostración de recursos disponibles, útiles para comprender la estructura tridimensional de moléculas o materiales. Revisión de fuentes de datos donde obtener modelos estructurales.
 - Acceso a estructuras químicas a partir de su nombre o identificador: servidor CACTUS NIH Chemical Identifier Resolver.
 - Dibujo de moléculas sencillas y generación del modelo 3D.
 - Obtención de estructuras moleculares desde bases de datos. Por ej.:
 - 3Dchem.com, University of Oxford
 - The Virtual Museum of Minerals and Molecules
 - Inorganic Crystal Structure Database
 - American Mineralogist Crystal Structure Database
 - Mineralogy Database
 - Database of Zeolite Structures
2. Entrenamiento en el uso del *software* Jmol para visualizar estructuras y para prepararlas para su uso en el aula o en actividades no presenciales.
 - Modalidades de uso de Jmol. Características. Direcciones de referencia. Descarga y uso básico.
 - Estilos de representación de la molécula.
 - Uso del color para transmitir información.
 - Selección de partes del modelo para la aplicación de estilos.

- Medición de distancias, enlaces y ángulos.
 - Selección por proximidad.
 - Superficies moleculares.
 - Identificación de soluciones adecuadas a las necesidades de los asistentes.
3. Procedimiento para guardar los modelos resultantes para su uso posterior en el aula.
- Archivos autónomos para usar con la aplicación Jmol
 - Páginas web sencillas generadas desde Jmol
 - Integración en "aulas virtuales"
4. Prestaciones especializadas
- Celdilla cristalográfica
 - Operaciones de simetría
 - Modos de vibración de la molécula
 - Animación de modelos múltiples
 - Orbitales atómicos y moleculares

Angel Herráez Sánchez
Profesor Titular de Bioquímica y Biología Molecular
Universidad de Alcalá
28871 Alcalá de Henares
angel.herraez@uah.es