

ENLACE QUÍMICO Y ESTRUCTURA DE LA MATERIA

CHIME es un **visualizador molecular** que funciona como un plugin que se instala en el navegador. Lo podéis obtener gratis desde la página web de la empresa, MDL, que lo comercializa:

http://www.mdl.com/products/framework/chime/

Fijaos que en esta misma página podéis descargaros el programa ISIS que os permitirá dibujar moléculas y representarlas en dos y tres dimensiones. Si no tenéis ningún otro programa para dibujar moléculas, os lo recomiendo. También es gratis.

No obstante, yo os he puesto este programa en un fichero comprimido: MDLChimeSP6.rar que encontraréis en la página de AVISOS del curso.

Dentro del fichero MDLChimeSP6.rar, os he puesto:

- el fichero ejecutable de la versión SP6 de CHIME (en el sitio MDL del que os he hablado antes, os podéis bajar una versión posterior, SP7)
- un ejecutable del visualizador RASMOL
- el fichero de AYUDA (HELP) del programa RASMOL.

Para Instalar CHIME:

Una vez que hayáis descomprimido el fichero .rar que os envío, guardar el fichero MDLChimeSP6.exe allá donde normalmente tengáis por costumbre guardar vuestras copias de ficheros.

Clicar dos veces sobre el fichero y seguir las instrucciones que se vayan generando en la pantalla.

Si todo ha ido bien, ahora ya podréis ver en tres dimensiones todos los ficheros con extensión .pdb. Probad con los ficheros de la glicina que os adjunto también en la página de AVISOS de la asignatura. Para ello, sólo tendréis que clicar dos veces sobre el fichero glicina.pdb y, si todo ha ido bien, directamente aparecerá el navegador y la molécula de glicina en la pantalla.

Situar el puntero del ratón sobre la molécula y apretar su botón derecho. Veréis que os aparece un menú con múltiples acciones para realizar sobre la molécula: cambiar la forma en la que parece, seleccionar átomos, etc.

Nota: En el primer seminario del mes de Enero haremos algún ejercicio de visualización y utilizaremos los comandos básicos de CHIME

Para trabajar con RASMOL:

Cread una carpeta nueva con el nombre RasMol, en aquella parte del disco duro de vuestro ordenador allá donde normalmente vosotros trabajéis.

Poned en esta carpeta el fichero **raswin.exe** y **raswin.hlp**.

Clicar dos veces sobre el fichero **raswin.exe** para ejecutar la aplicación. Aparecerá una pantalla en negro con algunos menús desplegables en la parte de arriba.

Clicar sobre FILE (se despliega el menú) y arrastrar el puntero del ratón hasta OPEN.

Ahora podréis navegar por todo vuestro ordenador para buscar el fichero xxxx.pdb que queráis abrir.

Si en la carpeta RasMol penéis el fichero glicina.pdb, enseguida que seleccionéis OPEN, veréis este fichero y lo podréis seleccionar.

En este programa, las acciones que se pueden realizar sobre la molécula también están en los menús desplegables de la cabecera.

Nota: En el primer seminario del mes de Enero haremos algún ejercicio de visualización y utilizaremos los comandos básicos de RASMOL

Si tenéis dificultades, enviadme un e-mail a josefa.donoso@uib.es .Os atenderé en cuanto pueda. Recordad que no controlaré la correspondencia entre el 20 y el 28 de diciembre.