

Químic@ en pantalla

Pere Alemany

alemany@gf.ub.es

Una de les característiques que han convertit la World Wide Web en un mitjà de comunicació excepcional és, sense cap mena de dubte, la possibilitat d'inserir als diferents documents tant imatges en color com animacions o fins i tot imatges interactives. Seguint aquesta tendència, en el camp de la química cada cop és més freqüent trobar informació sobre l'estructura molecular de diferents molècules presentada en forma de model tridimensional que podem manipular en temps real amb el ratolí del nostre ordinador. Un dels problemes amb què es troben, però, la majoria d'usuaris d'Internet és que els navegadors disponibles actualment no són capaços per si sols de mostrar aquesta informació correctament i cal instal·lar primer una extensió del navegador (*plugin*) per poder-ho fer. En aquest article comentarem com obtenir una d'aquestes extensions, el programa *Chime*, i donarem les adreces d'algunes pàgines web en què apareixen diferents tipus d'estructures moleculars que podem visualitzar al nostre ordinador un cop instal·lada l'extensió.

A la majoria de pàgines que requereixen extensions dels navegadors se'ns indica quines extensions necessitem i també les adreces on podem obtenir-les. Així, doncs, el procés més habitual és seguir aquests enllaços fins a trobar la pàgina web d'on podem descarregar (*download*) l'extensió en qüestió. En el cas de *Chime*, podem trobar l'extensió a la pàgina web de la companyia que l'ha desenvolupada, *MDL Information Systems Inc.* (<http://www.mdli.com>). Malgrat que *Chime* es distribueix gratuïtament, per poder descarregar-lo cal que estiguen donats d'alta en una llista d'usuaris registrats. Per obtenir *Chime* activeu en primer lloc l'enllaç *Download Chime*, que trobareu a la pàgina principal de *MDL*. Aquesta acció us dirigirà a una pàgina on se us demanarà que us identifiqueu com a usuaris registrats. El primer cop caldrà, doncs, sol·licitar que us incloguin a la llista. Per fer-ho haureu d'activar l'enllaç *Register*, que us portarà primer a una pàgina on s'especifiquen les condicions d'ús del programa i després a una altra pàgina on haureu d'omplir un formulari amb les vostres dades. Un cop l'haureu enviat, se us donarà accés a totes les pàgines web del lloc dedicades a *Chime*, entre les quals hi ha les que permeten la descàrrega del programa. La clau d'accés serà la vostra adreça de correu electrònic i la vostra paraula secreta la que hagueu indicat al formulari esmentat anteriorment. Abans de descarregar el programa, cal que llegiu la informació continguda a la secció *Downloads*, especialment pel que fa referència als

requeriments de la màquina en la qual voleu instal·lar el programa. Actualment, *MDL* ofereix la versió 2.6 de *Chime* tant per a PC com per a Macintosh. Per descarregar el programa i instal·lar-lo al vostre ordinador, només cal que seguïu les instruccions que es van indicant a les pàgines de descàrrega.

Un cop instal·lada l'extensió del navegador, si tot ha funcionat correctament hauríeu d'ésser capaços de visualitzar pàgines que continguin estructures moleculars preparades per a ésser visualitzades amb *Chime*. Un bon punt de començament són les pàgines dedicades a *Chime* que ha creat Eric Martz al Departament de Microbiologia de la universitat de Massachusetts (<http://www.umass.edu/microbio/chime/index.html>). Aquí hi trobareu un breu curset de com usar *Chime* (a l'enllaç *Chime: How to Use It*). Si heu instal·lat correctament el programa, quan activeu aquest enllaç heu d'anar a parar a una pàgina on teniu algunes estructures moleculars. Situeu, per exemple, el cursor sobre la molècula d'ATP i moveu el ratolí mantenint el botó de l'esquerra premut. Si heu instal·lat *Chime* correctament, haureu de veure que aquesta acció fa girar el model molecular. Seguint els enllaços que hi ha a la pàgina, podeu anar veient les diferents possibilitats que us ofereix *Chime*. Entre d'altres coses, podeu canviar el tipus de model (de boles i enllaços, de filferro, de boles...) els colors dels àtoms, etc.

Al web podeu trobar un gran nombre de pàgines, majoritàriament d'universitats i centres d'ensenyament, on s'utilitza *Chime* per a diferents cursos en línia. Un bon exemple el podeu trobar al curs *462 A Biochemistry* de la Universitat d'Arizona (a (<http://www.biochem.arizona.edu/dept/courses.html>) trobareu una llista completa dels cursos que ofereix el Departament de Bioquímica d'aquesta universitat). Si entreu a la pàgina web del curs, hi trobareu uns apunts (*Lecture notes*) en els quals es fa ús extensiu de *Chime* per visualitzar les estructures tridimensionals de diverses molècules d'interès biològic. Un altre exemple interessant, el trobareu a la pàgina <http://www.chem.purdue.edu/gchelp/>, on es presenten diverses pàgines amb informació complementària per a un curs de química general. Per veure el potencial de *Chime* recomanem la secció dedicada als modes normals de vibració de molècules petites, la dedicada a l'estructura i propietats de líquids o la que presenta el model VSEPR per determinar l'estructura d'una molècula. Pel que fa al camp de la química orgànica, a l'adreça <http://www.okanagan.bc.ca/chem/nomenclature/> podeu trobar un curs de nomenclatura orgànica on s'adjunten

models tridimensionals per als compostos que s'hi estudien. A <http://www.pubpages.unt.edu/~rpj> podeu veure una pàgina d'un grup de recerca que sintetitza molècules orgàniques tensionades, de les quals inclou models que podeu visualitzar amb *Chime*.

Una de les pàgines web amb més informació estructural sobre molècules diverses és *WebMolecules* (<http://www.webmolecules.com>), on podeu trobar les estructures tridimensionals de més de 200.000 compostos. Per visualitzar-los necessitareu tenir instal·lat el programa *Chime* o bé una extensió que us

permeti visualitzar fitxers de tipus VRML, per exemple *Cosmo Player* de *Cosmo Software* (<http://www.cosmosoftware.com>), que podeu descarregar de manera gratuïta seguint les instruccions que hi ha a la mateixa pàgina web de *WebMolecules*. Per facilitar la cerca, les diferents molècules que hi ha a *WebMolecules* es troben agrupades temàticament, p. ex. aminoàcids, principis actius de medicaments, toxines, explosius, cristalls inorgànics, etc. Podeu també buscar les molècules per fórmula, pel seu nom comú o mitjançant el nombre de registre CAS. Una opció molt útil que hi ha a la mateixa pàgina de *WebMolecules* és un enllaç que us proporciona les coordena-

The screenshot shows the WebMolecules website interface. At the top, the logo "WebMolecules" is displayed with the tagline "Over 220,000 Molecular Models Online in Full 3D". Below this, there is a "CATEGORIES:" dropdown menu currently set to "21.03 - Pharmaceuticals - Over-the-Counter". A "MOLECULES:" section contains radio buttons for "VRML" and "Chime", with "Chime" selected. A search bar below contains the text "Ibuprofen (Advil®) C13H18O2". The main content area features a 3D ball-and-stick model of the Ibuprofen molecule, with a toolbar above it for "DISPLAY" and "FILL" options. To the right of the model is a "Model Options" sidebar with links for "Bookmark model", "Email to a friend", "Printing & Clipart", "XYZ data (*.m3d)", and "Plastic Kit Shop". Below this sidebar are sections for "Upload Model", "Request Model", "FREE Newsletter", and "Report Problem". At the bottom of the page, there is information about the model's formula ($C_{13}H_{18}O_2$), weight (206.285(1) g/mol), and sponsors including "Molecules-3D" and "SafetyBoard.com".

FIGURA 1. Pàgina de WebMolecules amb la visualització mitjançant el programa Chime d'un model tridimensional de la molècula d'ibuprofè.

des de tots els àtoms de la molècula que podeu usar per crear posteriorment els vostres propis models tridimensionals. Si teniu coneixements bàsics d'HTML i l'edició de pàgines web, seguint les instruccions que hi ha a la pàgina web de *Chime* veureu que és relativament senzill incloure un model d'aquest tipus en les vostres pròpies pàgines web.

Per acabar, podeu visitar una pàgina comercial, la de la companyia *Leffingwell & Associates*, que comercialitza aromes i essències (<http://www.leffingwell.com>), i on trobareu enllaços a diverses pàgines sobre diferents tipus d'aromes i les molècules que els originen. En alguns casos s'inclouen també models *Chime* d'aquests compostos, per exemple, a <http://www.leffingwell.com/emaltol.htm> trobareu informació sobre diferents compostos usats en la indústria alimentària per imitar els aromes de productes que continguin sucres cuits (olor de caramel, de *toffee*, de pinya o de maduixes cuites, etc.).