

Tutorial Chems sketch

Chems sketch es un programa para dibujo avanzado en Química. Útil para dibujar estructuras químicas, reacciones y esquemas.

Modo Estructura (Structure Mode) para dibujar estructuras químicas y calcular sus propiedades.

Modo Dibujo (Draw Mode) para texto y procesamiento de gráficos.

Propiedades Moleculares (Molecular Properties) cálculos para la estimación automática de:

- Peso fórmula
- Composición en porcentaje
- Refractividad molar
- Volumen molar
- Parachor
- Índice de refracción
- Tensión superficial
- Densidad
- Constante dielectrica
- Polarizabilidad
- Masa monoisotopica, nominal y promedio.

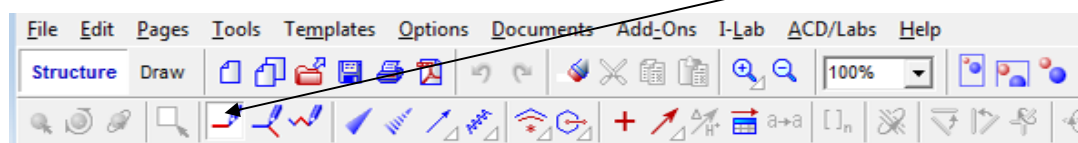
Para comenzar!

1. Iniciar el programa.
2. En la esquina superior izquierda se elige el modo: Structure- Draw .

Modo Estructura

Dibujar moléculas

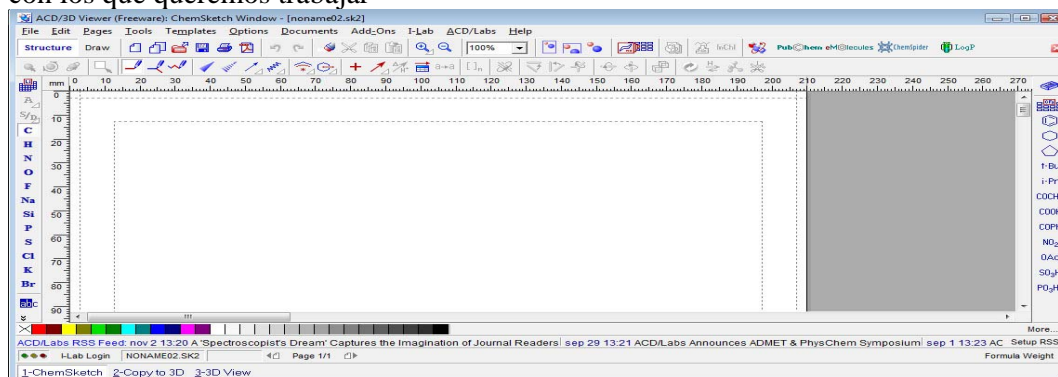
Para dibujar un átomo debemos tener seleccionado el modo de **dibujo normal**.



En las herramientas de la izquierda de la pantalla podemos seleccionar los átomos con los que queremos trabajar

Tabla
periódica

átomos



Radicales

Si queremos trabajar con un elemento que no está en la lista de la izquierda, en la parte superior de la misma podemos seleccionar una tabla periódica, y cliqueando en el elemento podemos seleccionar el que queramos.

Además al seleccionar un elemento en esta tabla nos brinda información del mismo como su nombre, masa atómica promedio, el número de valencia, el número atómico y la configuración electrónica. También sus características, cómo se encuentra en la naturaleza, una foto de cómo se ve y muchas cosas más.

Actividad 1. Probemos encontrar el iodo. Cómo se ve en la foto? Quién fue su descubridor? Cuál es su punto de ebullición (boiling point)? Cuáles son sus isótopos? Cuales son radiactivos? Cuál es su vida media? En qué estado de agregación lo encontramos en la naturaleza?

Ahora a dibujar!

Cuando dibujemos un átomo, el programa por defecto lo asociará a los hidrógenos que correspondan, por ejemplo si dibujamos un átomo de carbono estará asociado a 4 H. Pero al ir asociándolo con otros átomos cambiará un H por un enlace simple.

Actividad 2. Probemos dibujar el O₂. (O=O)

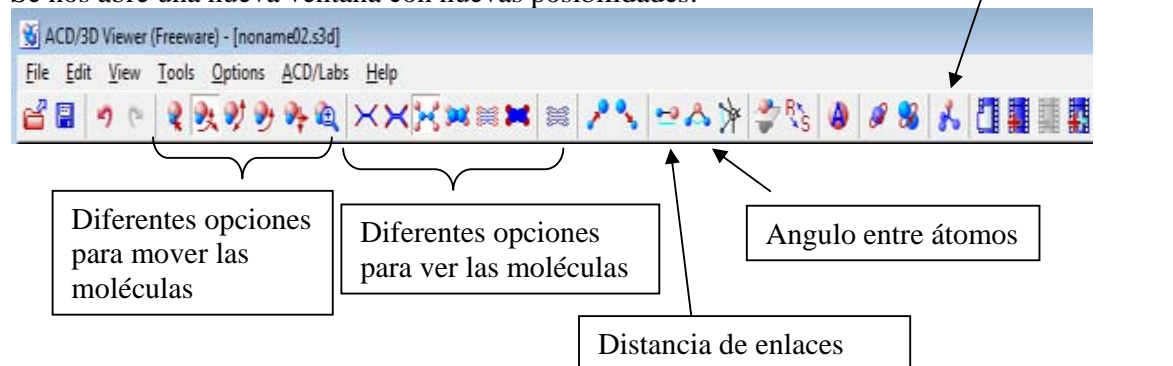
Tocamos el símbolo del O en la columna de la izquierda y luego pinchamos en el centro de la pantalla. Aparece cómo queremos?

Llevamos otro átomo de O y lo colocamos a una distancia corta del primero. Nos apoyamos en uno y vamos con el botón izquierdo del mouse apoyado hasta el otro para formar un enlace simple entre los dos. Obtuvimos la molécula como la queremos?

Para lograr el doble enlace repetimos lo que hicimos recién, tocamos un O y arrastramos el mouse hasta el otro. Ahora sí tenemos nuestra molécula.

Con la herramienta 3D-Viewer podemos ver la molécula en 3D.

Se nos abre una nueva ventana con nuevas posibilidades:



Ahora podemos calcular la distancia de los enlaces: seleccionamos un átomo (se pone verde), seleccionamos el otro y se abre una ventana que nos dice la distancia entre los átomos. Podemos también desde esta ventana modificarlo.

De la misma manera podemos calcular el ángulo entre tres átomos seleccionándolos.

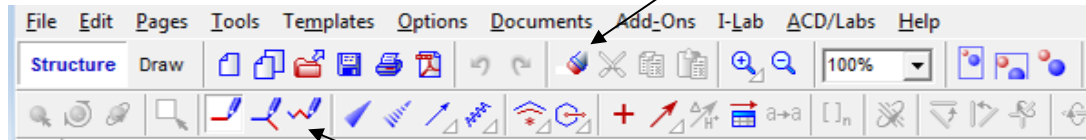
Actividad 3. Probemos calcular la distancia óptima entre los átomos de O.

Volvamos al chemsketch.

Actividad 4. Podrán hacer la molécula de CO₂? (O=C=O)

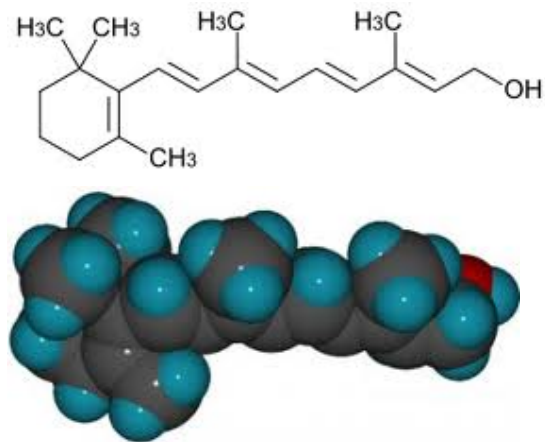
Calculemos ahora la distancia óptima de este nuevo doble enlace y el ángulo entre los átomos que lo forman.

En caso que queramos borrar un átomo tenemos que tocar la **goma** y luego el átomo.

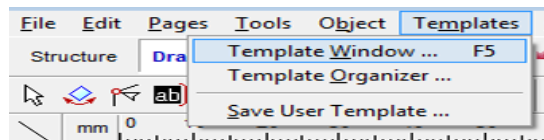


Si queremos dibujar una molécula más compleja, como un alcano o luego un lípido con una cadena carbonada podemos utilizar la herramienta. También podemos agregar un radical como un grupo ácido utilizando la lista de radicales que encontramos a la derecha de la pantalla.

Actividad 5. Intentemos ahora algo más complicado como la vitamina A o retinol:



También podemos trabajar con estructuras que ya están dibujadas. Para eso,

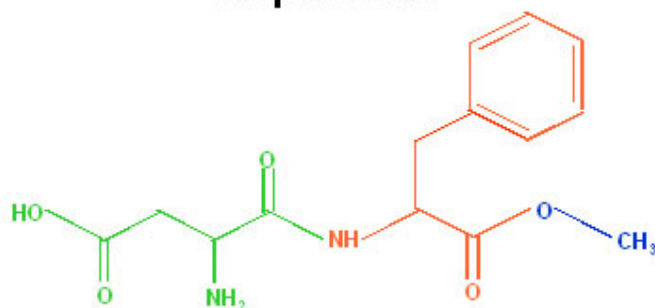


Y ahí elegimos alguna molécula. Por ejemplo podemos buscar la vitamina A. Les salió parecida?

Actividad 6. Pegar algunos nucleótidos y hacer una cadena de RNA o DNA. Ej: A-C-T/U-G

Actividad 7. Pegar los aminoácidos necesarios y hacer una molécula de aspartame, que se utiliza como endulzante.

Aspartame



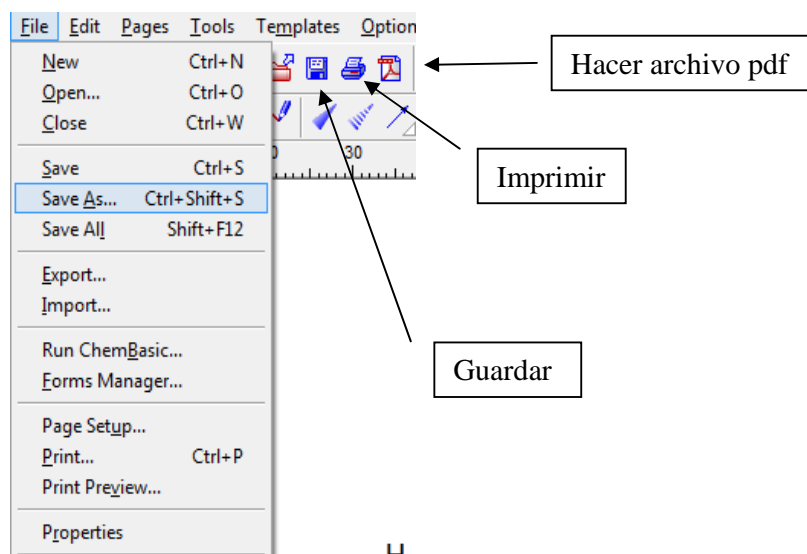
L-aspartyl-L-phenylalanine methyl ester

Aspartate

Phenylalanine

Methanol

Para guardar las moléculas, tanto en el Chemscketch como en el 3D viewer:



Pueden directamente utilizar el botón del menú o ir a File- Save as y guardar los archivos con el nombre que deseen.

Para imprimir, o desde el menú o File- Print.

Finalmente se pueden guardar en formato pdf desde el menú.