

Taller de VISUALIZACION y MODELADO MOLECULAR

PI: "Visualización y Modelado Molecular de Macropolímeros Orgánicos de Interés Industrial"

Cátedra Química Orgánica Ic

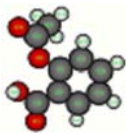
Junio de 2010

1. COMPUESTOS

Se trabajará con un conjunto de compuestos químicos estudiados en la asignatura Química Orgánica Ic: Hidrocarburos, Alcoholes, Aldehídos, Cetonas y Ácidos Orgánicos

HIDROCARBUROS			
	LINEALES	RAMIFICADOS	CICLICOS
ALCANOS	<i>Metano</i> <i>Etano</i> <i>Propano</i> <i>cis-Butano</i> <i>trans-Butano</i> Pentano <i>Hexano</i> <i>Heptano, Octano, Nonano,</i> <i>Decano, Undecano,</i> <i>Dodecano, Tridecano,</i> <i>Tetradecano,</i> <i>Pentadecano, Hexadecano,</i> <i>Heptadecano, Octadecano,</i> <i>Nonadecano, Eicosano,</i> <i>Tetracontano</i>	Isobutano Isopentano 2 Metil Pentano 3 metil Pentano	<i>Ciclopropano</i> <i>Ciclobutano</i> <i>Ciclopentano</i> <i>trans-Ciclohexano</i> cis-Ciclohexano <i>Cicloheptano</i> cis 1,4 Dimetil Ciclohexano trans 1,4 Dimetil Ciclohexano
ALQUENOS	<i>Eteno</i> <i>Propeno</i> Buteno <i>Butadieno</i> Hexatrieno	cis-Buteno trans-Buteno	<i>Ciclobuteno</i> <i>Ciclopenteno</i> <i>Ciclopentadieno</i> <i>Ciclohexeno</i> <i>Benceno</i> <i>Ciclohepteno</i>
ALQUINOS	<i>Etino</i> Propino Butino		
ALCOHOLES			
<i>Metanol, Etanol, Glicol, Propanol, Glicerol, Butanol, Fenol</i>			
ALDEHÍDOS			
<i>Formaldehído, Etanal, Propanal, Butanal</i>			
CETONAS			
Propanona, Butanona			
ÁCIDOS			
<i>Ác. Metanoico (Fórmico), Ác. Etanoico (Acético), Ac. Etanodioico (Oxálico)</i>			

NOTA: Los compuestos en cursiva están incluidos en la biblioteca del Gabedit.



Taller de VISUALIZACIÓN y MODELADO MOLECULAR

PI: "Visualización y Modelado Molecular de Macropolímeros Orgánicos de Interés Industrial"
Cátedra Química Orgánica Ic
Junio de 2010

2. EJERCICIOS

VISUALIZACIÓN DE MOLÉCULAS USANDO BIBLIOTECAS Y CONSTRUCCIÓN DE MOLÉCULAS USANDO GABEDIT

1. Ver moléculas disponibles en la biblioteca del Gabedit (Hidrocarburos, Alcoholes, Aldehídos, Cetonas y Ácidos Orgánicos)
2. Visualizar el Etano y explorar los comandos Operations, Labels, Render
3. Capturar pantalla y guardar la imagen de la molécula
4. Exportar la imagen como archivo pdf
5. Buscar en internet el Pentano (formato pdb) y visualizar (<http://elchem.kaist.ac.kr/jhkwak/okanaganpdb97/molecule/alkane.htm>)
6. Editar archivo xyz
7. Medir parámetros conformacionales y energía

Hidrocarburos

8. Visualizar alcanos de la biblioteca del Gabedit
9. Construir el Pentano:
 - a) cadena 5 C; agregar H; ángulos C-C-C=112°; distancia enlace C-H: 1.087 Å; ángulos diedros = 0°; optimización
 - b) agregar C al Butano; agregar H; optimizar
10. Visualizar hidrocarburos obtenidos de internet (<http://elchem.kaist.ac.kr/jhkwak/okanaganpdb97/molecule/molecule.html>)
11. Visualizar el trans Ciclo Hexano de la biblioteca del Gabedit
12. Obtener el cis Ciclo Hexano y el trans Ciclo Hexano
13. Analizar el diagrama Energía vs ángulo diedro para el Etano
14. Analizar el diagrama Energía vs ángulo diedro para el Butano

Alcoholes

15. Visualizar alcoholes de la biblioteca del Gabedit
16. Construir alcoholes: Etanol, Propanol, Butanol y Fenol
17. Visualizar alcoholes obtenidos de internet

Aldehídos

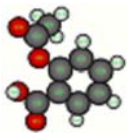
18. Visualizar aldehídos disponibles de la biblioteca del Gabedit
19. Construir aldehídos: Etanal, Propanal, Butanal.
20. Visualizar aldehídos obtenidos de internet

Cetonas

21. Construir aldehídos: Propanona, Butanona
22. Visualizar cetonas obtenidas de internet

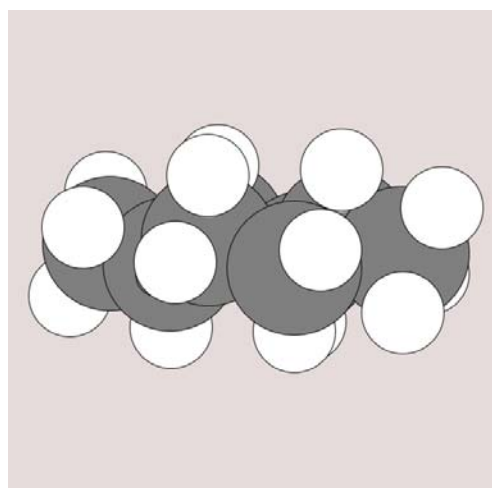
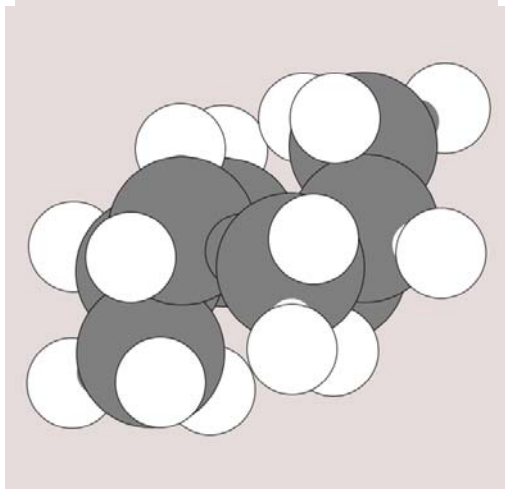
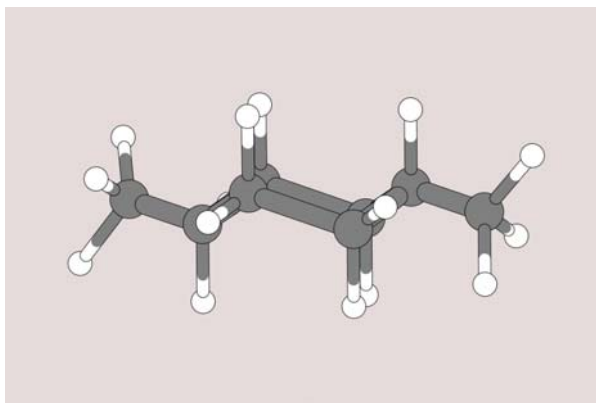
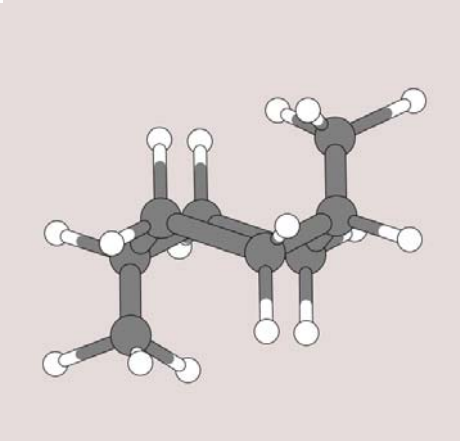
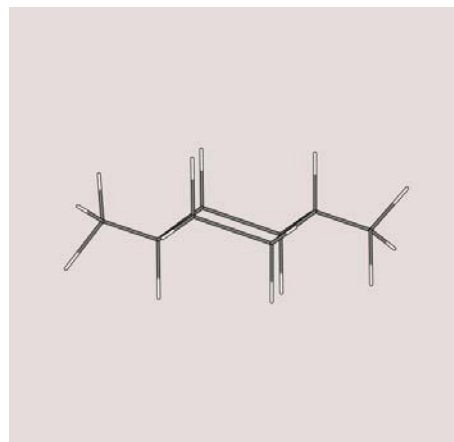
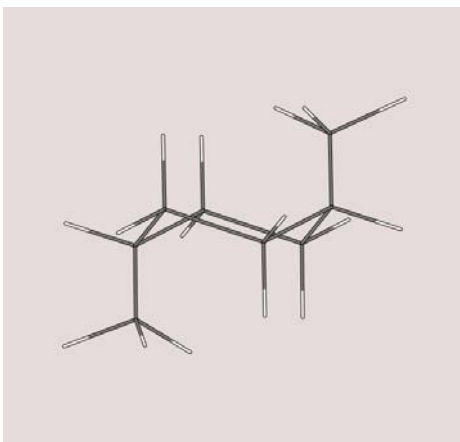
Ácidos orgánicos

23. Visualizar el Ác. Metanoico de la biblioteca del Gabedit
24. Construir ácidos orgánicos: Ác. Acético, Ác. Oxálico
25. Visualizar ácidos orgánicos obtenidos de internet



Taller de VISUALIZACION y MODELADO MOLECULAR

PI: "Visualización y Modelado Molecular de Macropolímeros Orgánicos de Interés Industrial"
Cátedra Química Orgánica Ic
Junio de 2010



trans 2,4 Dimetil Hexano

cis 2,4 Dimetil Hexano