



Materials de formació

Aplicacions de les TIC a la Física i Química

Bartomeu Bonet Oliver
Antoni Jordà Real
Antoni Salvà Salvà

Juny 2005



Govern de les Illes Balears

Conselleria d'Educació i Cultura

Direcció General d'Ordenació, Innovació i Formació del Professorat

CONVENCIONS

Els símbols utilitzats en aquest text són:



Reforç



AJUDA



Activitats d'introducció

Activitats completament guiades amb exposició gradual de continguts, que permetin assegurar els continguts mínims de la programació del mòdul de formació.

Activitats de consolidació i reforç:

Aquestes activitats presenten una dificultat un poc superior ja que no són tan guiades i permetran un millor domini dels temes estudiats.

Activitats de lliurament obligat

Les activitats que venen marcades per aquesta icona s'hauran d'enviar obligatòriament a la tutoria per tal de poder superar el curs de formació.

Activitats opcionals

Activitats d'ampliació de coneixements que permeti aprofundir en la temàtica tractada. No són obligatòries i no s'han de fer si es veu que hi haurà dificultat per seguir el ritme aconsellat per al curs.

Recomanacions o comentaris

Recomanacions o comentaris que permetran una millor realització de les activitats encomanades

Ajuda

Per algunes activitats, si la seva resolució presenta problemes, es podrà consultar l'ajuda que donarà pistes per facilitar la seva realització.

Recursos addicionals

Per poder ampliar els coneixements, es posa a la disposició dels alumnes una documentació complementària de consulta o d'ampliació.

1 APLICACIONS AMB EL FULL DE CàLCUL.....	5
1.1 Adquisició i consolidació de conceptes.....	5
1.2 Resolució gràfica de problemes.....	11
1.3 Simulació gràfica d' experiments.....	13
1.4 Tractament de les dades numèriques d' un experiment.....	16
2 DIBUIX DE MUNTATGES DE LABORATORI.....	17
3 PROGRAMARI ESPECÍFIC DE L' ÀREA.....	19
3.1 Laboratori Virtual de Química. ChemLab.....	20
3.2 Disseny de molècules en 2D.....	23
3.3 Disseny i visualització de molècules en 3D.....	35
3.4 Formulació inorgànica.....	47
3.5 Programari de Física.....	48
4 LA FÍSICA I LA QUÍMICA A INTERNET.....	49
4.1 Configuració del navegador: plug-ins.....	49
4.2 Estratègies de recerca.....	51
4.3 Estructuració i programació dels accessos a Internet: Els entorns virtuals d' aprenentatge.....	53

PROGRAMARI UTILITZAT EN EL CURS:

Full de càlcul: En aquest tutorial, treballam amb l'openoffice.calc (versió 1.10), però la major part de les activitats es poden realitzar pràcticament amb qualsevol altre programa de full de càlcul.

Navegador d'internet

Programa de **dibuix vectorial**: l'Openoffice.org Draw pot servir perfectament

BKChem(inclòs als materials del curs)

PyMOL (inclòs als materials del curs)

Chemlab (inclòs als materials del curs)

Plug-in **CosmoPlayer** i **Chime** (CosmoPlayer inclòs als materials del curs)

Compressor de fitxers (es pot instal·lar el Winzip del Cd de materials de formació)

SEQÜENCIACIÓ DELS MÒDULS

Encara que els mòduls són gairebé independents, està previst realitzar-los en l'ordre que figura en aquest tutorial. El darrer mòdul, d'Internet, té una part de recerca a la xarxa que implica el treball en grup, i que necessita un termini de temps més dilatat que els altres mòduls. Per això, independentment del ritme que es dugui amb els altres mòduls, començarà cap a la tercera setmana i s'estendrà fins al final del curs. A l'agenda podeu veure el calendari en detall.

1 APLICACIONS AMB EL FULL DE CÀLCUL

La gran capacitat de manejar nombroses dades i de representar gràfics que tenen els programes de full de càlcul els fan aplicables a molts camps dins de l'ensenyament de la Física i Química. El límit està més en la imaginació i en el domini que es pugui tenir del programa que no en les seves limitacions. Proposam, entre d'altres, l'aplicació a:

- Processament de dades numèriques obtingudes a les pràctiques de laboratori
- Adquisició i consolidació de conceptes
- Resolució gràfica de problemes
- Simulació d'experiments

Per poder seguir els exemples del curs i poder fer els exercicis proposats és aconsellable tenir uns coneixements bàsics del maneig d'un full de càlcul. Les mancances en aquest sentit es poden suplir començant pels primers exercicis, explicats pas a pas; és aconsellable, també, recórrer al curs d'OpenOffice.calc que hi ha dins els materials de formació del mateix Weib:

<http://weib.caib.es/Formacio/distancia/Material/oocalc/guia.htm> . Així mateix, en els fitxers *Open1* i *Open2* de la carpeta *Full de càlcul* inclosa en els materials del curs, hi ha els exercicis resoltos per a tothom que s'hagi d'iniciar en aquest programa.

L'aplicació dels fulls de càlcul amb l'alumnat està pensada a partir d'uns fulls ben dissenyats i molt controlats. Deixar aquests fulls optimitzats requereix uns coneixements un poc més elevats. Un altre factor a tenir en compte és el fet que un exercici tot sol no omple, en general, una hora sencera de classe; per això s'hauria de disposar d'una bateria d'exercicis relacionats, que es poden crear a partir de les activitats d'aquest curs. El fitxer *Física4ESO* inclòs en els materials del curs, n'és una mostra. Si encara no es té prou domini del programa, o no es disposa de prou exercicis, es poden utilitzar fulls menys elaborats, com a complement de les explicacions, experiments...

1.1 Adquisició i consolidació de conceptes.

Aquest apartat pretén mostrar alguns exemples de com, amb l'ajut de les representacions gràfiques, es poden fer més accessibles alguns continguts i procediments. La facilitat amb què queden reflectits a les gràfiques els canvis que es fan en les dades d'origen, pot ajudar a entendre la influència d'aquella dada en el concepte estudiat.



Activitat d'introducció 1

Estudi del moviment uniformement accelerat (Full MRUA del fitxer Open1)

Representau les gràfiques posició-temps i velocitat-temps d'un moviment uniformement accelerat, en funció d'unes constants del moviment que es puguin modificar. Per això, a un llibre nou, dissenyau un full tal com aquest: (llegiu les instruccions de més avall)

	A	B	C	D
1	Constants del moviment			
2				
3	v inicial	0		
4	acceleració	9,8		
5				
6	temps	posició	velocitat	
7	0	$=B\$3*A7+(B\$4*A7^2)/2$	$=B\$3+B\$4*A7$	
8	1	$=B\$3*A8+(B\$4*A8^2)/2$	$=B\$3+B\$4*A8$	
...	
17	10	490	98	

A les cel·les A1, A3 i A4 entreu els textos corresponents. A les cel·les B3 i B4 donau un valor concret a la velocitat inicial i l'acceleració (0 i 9,8 respectivament).

A les cel·les A6, B6 i C6 entreu els textos dels encapçalaments de temps, posició i velocitat.

Per crear els valors de temps, escriviu 0 a la cel·la A7; seleccionau aquesta cel·la i arrossegau amb el ratolí fins la cel·la A17, anau al menú “Edició/ Emplena/ Sèries” i escolliu “en columnes, lineal, argument 1 i límit 10”. Quan pitgeu acceptar, veureu com la columna de temps es genera automàticament.


A la cel·la B7, entreu la fórmula de la posició del MRUA. Les fórmules han de començar amb un signe igual i contenen operadors matemàtics (+ - * / ^), funcions i referències a les cel·les que contenen les dades amb les quals es vol operar; així, per cridar velocitat inicial i l'acceleració, escriviu **\$B\$3** i **\$B\$4** respectivament (el símbol \$ davant la lletra de columna i/o el nº de fila en una fórmula, fixa la referència a la cel·la quan s'estén la fórmula a altres cel·les). En canvi, per cridar el temps, heu d'entrar **A7** (sense \$ perquè en estendre la fórmula per avall, s'ha de convertir en A8, A9...): Escriviu **=B\$3 * A7 + (B\$4 * A7^2) / 2** (l'elevat es fa amb l'accent ^) i pitjau Intro.

Ara heu de seleccionar la cel·la B7, posar el cursor sobre el controlador d'extensió (el petit quadre negre que hi ha a la part inferior dreta del contorn de la cel·la) i arrossegar per avall fins arribar a B17. En amollar el botó del ratolí, la fórmula s'haurà estès a totes les cel·les adaptant-se a cada posició. Ho podeu comprovar fent clic sobre una de les cel·les i mirant l'estructura de la fórmula.

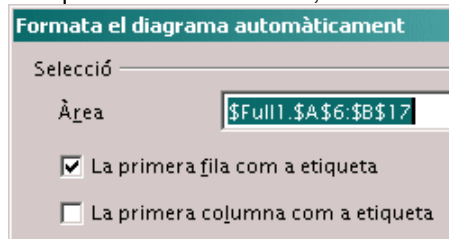
Amb la velocitat heu de fer exactament el mateix: **=B\$3+B\$4*A7** a la cel·la C7 i arrossegar amb el controlador d'extensió fins la cel·la C17.

Un cop creat el full, provau de canviar la velocitat inicial o l'acceleració i comprovau com varien els valors de posició i velocitat de la taula (si cal, haureu d'augmentar el rang de valors de temps per incloure-hi instants significatius del moviment)

Per crear els gràfics, seleccionau el rang de cel·les **A6** fins **B17** (seleccionau la primera i arrossegau amb el ratolí fins la darrera) ; Escolliu l'opció *Insereix/Diagrama* del menú o

pitjau el botó corresponent de la barra d'eines vertical de l'esquerra  i arrossegau l'àrea que voleu que ocupi el gràfic. Això inicia l'assistent de creació de gràfics:

La primera finestra de l'assistent ens mostra l'àrea de dades escollida. Si hem seleccionat adequadament les cel·les, no caldrà modificar-hi res:



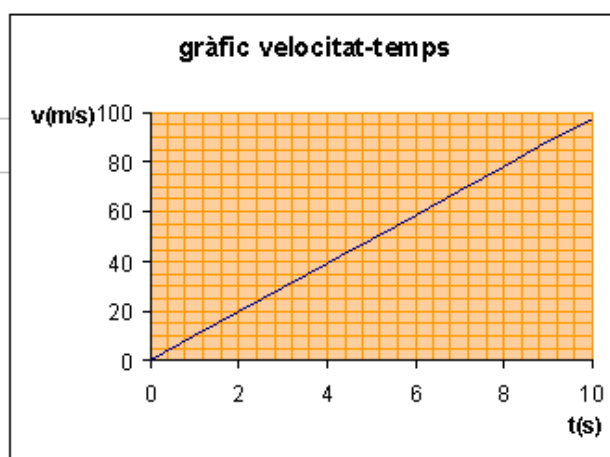
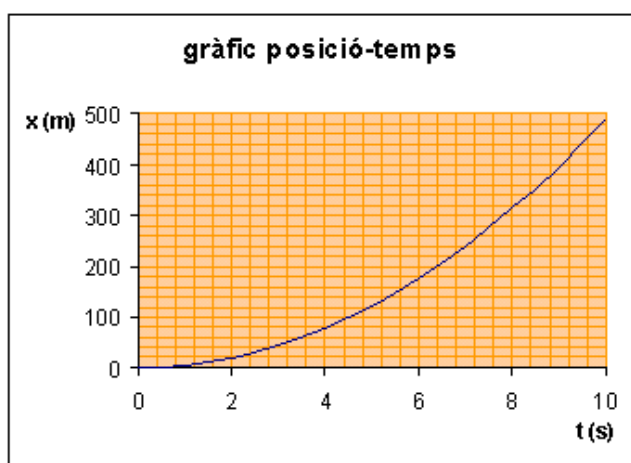
Pitjau el botó *Següent* i escolliu el tipus XY, a continuació, el subtipus només línies suavitzades i activau l'opció *Línies de quadrícula de l'eix X* i pitjau *Següent*. Posau els títols adequats al diagrama i als eixos, desmarcau la llegenda i pitjau *Crea*.

Podeu moure el gràfic a una altra posició simplement arrossegant-lo amb el botó esquerre del ratolí. També podeu canviar-ne la mida arrossegant els punts del seu contorn.

Ara seleccionau el rang **A6** fins a **A17** i, mantenint la tecla Ctrl pitjada, arrossegau per seleccionar des de **C6** fins a **C17** (el mode de selecció es pot canviar clicant sobre la zona corresponent de la barra d'estat: STD, EXT o ADD), i feis el gràfic velocitat-temps de manera anàloga a com heu fet l'anterior.

Guardau el fitxer amb el nom **cinemàtica1**

Un cop fets els gràfics, feis canvis en la velocitat inicial i l'acceleració per comprovar l'efecte que tenen sobre el gràfic. És interessant que proveu acceleracions negatives.



Per omplir una sèrie numèrica, basta entrar els dos primers valors, seleccionar-los i a continuació utilitzar el controlador d'extensió per allargar la sèrie tant com vulguem. D'aquesta manera podríem allargar el rang de temps.

En el gràfic, es poden fer canvis a zones concretes. Per això, primer hem d'estar dins l'edició del gràfic (s'hi entra fent doble clic a sobre); a continuació hem de seleccionar l'element que volem canviar i fer clic a sobre amb el botó dret del ratolí per accedir al menú contextual o anar al menú *Formata* i escollir l'element; així, podem fer canvis de colors de fons, de text, línies, orientació del text, títols, escala dels eixos... Així, podeu intentar que els gràfics quedin semblants als de les figures.

Si es vol utilitzar el full de càlcul amb l'alumnat, perquè pugui fer canvis a les condicions inicials, convé delimitar els valors permesos a fi que no se surtin dels marges representats a les gràfiques. Per això, disposam, d'unes quantes possibilitats; la **validació de dades** és probablement la més senzilla; si volem més control, podem recórrer a les **macros**. A continuació trobareu una petita explicació de totes dues tècniques.



AJUDA

La **validació de dades** és una eina molt útil per controlar les entrades de dades a algunes cel·les del full de càlcul. El seu ús no és gaire complicat. Es tracta d'imposar la condició que volem que compleixin les dades entrades a la cel·la.

Per això, seleccionam la cel·la o rang de cel·les i escollim en el menú *Dades/Validesa*. A la fitxa *Valors* hem d'escollir el tipus de dades, la condició (valor major/ menor/ entre uns límits...) i el valor de referència. A la fitxa *Avís d'error* hem de marcar la casella *Mostra un missatge d' error ...* el tipus d'acció *Atura*.


La resta és optatiu, però convé com a mínim posar un text per al missatge d'error que orienti a l'alumnat sobre quins són els valors permesos. Si s'entra un valor no permès, surt el missatge d'error.


Al full MRUA del fitxer Open1 es pot veure aquesta aplicació. Si seleccionau la cel·la de velocitat inicial o la d'acceleració i escolliu *Dades /Validesa* veureu la seva configuració.



Una altra manera de poder limitar l'entrada de dades, i de controlar moltes més coses, és utilitzar les macros associades a algun control de formulari. A diferència d'altres programes com l'Excel, aquesta opció implica haver d'escriure codi de basic. Malgrat això, es poden crear uns botons per controlar els canvis de les dades amb una programació bastant simple. Al full **control d'entrades** del llibre **Open1** hi ha una mostra de com es pot aplicar a l'estudi del MRUA. També podeu veure exemples d'aplicació als fulls del fitxer Fisica4ESO. Aquests fulls estarien acabats per emprar-los amb l'alumnat.

Anem a veure com es poden crear aquests controls amb el mateix full de l'activitat d'introducció 1: farem que els canvis a la velocitat inicial i a l'acceleració només es puguin fer amb els botons.

A la barra d'eines, hi trobam el botó de controls de formulari. Si el mantenim pitjat, es desplega i ens permet seleccionar el botó per activar l'edició del formulari ; si el tornam

a pitjar la desactivam. Dins la barra d'eines de formulari, hem d'escollir el control *Botó* . Un cop seleccionat, podem dibuixar el botó arrossegant l'àrea que volem que ocupi. Podem canviar el seu aspecte si feim clic amb el botó dret a sobre i escollim l'opció *Control*. Per exemple, podem canviar l'etiqueta del botó, el tipus, mida i color de lletra... Situau-lo, un poc més amunt de la velocitat inicial i posau-li, com a etiqueta, dos símbols de menor per indicar que servirà per disminuir el valor (<<). Creau-ne un altre a la seva dreta amb l'etiqueta (>>)

Ara hem de crear les macros que permetran que, quan pitgem els botons, el valor de la velocitat inicial augmenti o disminueixi. Per això, anam al menú *Eines / Macros / Macro ...* A la finestra que s'obre, hem de seleccionar el nostre fitxer a la llista de l'esquerra (estarà al final) i pitjar el botó *Nou* per crear un mòdul nou amb el nom que vulguem, per exemple *mrua* (També podríem escollir *Este Libro* o un full concret i pitjar *Editar*). En acceptar, entrem a la finestra d'edició de basic i ens trobam amb dues macros, *main* i *macro1*. Podem canviar el nom a *macro1* i li posam, per exemple *MinvaVel*. Es tracta ara de copiar literalment el següent codi que està en negreta, que comença amb l'obertura del procediment (*Sub MinvaVel*) i acaba amb el seu tancament (*End Sub*). En podeu veure un de semblant si obriu l'editor de macros del full *control d'entrades*.

Sub MinvaVel

```
fullcinem=ThisComponent.Sheets(0) // 0 indica el primer full del fitxer; si és el segon cal posar 1...  
if fullcinem.getCellRangeByName("B3").value>0 then  
fullcinem.getCellRangeByName("B3").value=fullcinem.getCellRangeByName("B3").value-1  
endif
```

End Sub

Aquest codi permetrà que cada cop que es pitgi el botó (<<) el valor de la velocitat baixi una unitat, sense permetre valors negatius. Si volem valors negatius, basta canviar el >0 per >(-10) per exemple.

Per al botó (>>) el codi és molt semblant:


Sub PujaVel

```
fullcinem=ThisComponent.Sheets(0)  
if fullcinem.getCellRangeByName("B3").value<30 then  
fullcinem.getCellRangeByName("B3").value=fullcinem.getCellRangeByName("B3").value+1  
endif
```

End Sub

En aquest cas, el botó farà que la velocitat inicial augmenti una unitat fins a un màxim de 30 m/s.

Ara hem de tancar la finestra d'edició de macros, seleccionar el botó (<<), fer clic amb el botó dret per accedir al menú *Control* i, dins la fitxa *Esdeveniments*, a *S'ha premut el botó*

del ratolí, pitjar el botó , escollir del mòdul que hem creat dins el document, la macro *MinvaVel* i pitjar *Assigna* i *D'acord*. Amb l'altre botó hem de fer el mateix però amb la seva macro. Si pitjam el botó per desactivar l'edició del formulari, podem provar si els botons funcionen. Ara podríem fer el mateix per canviar l'acceleració. Dos botons igual i les macros corresponents, que serien molt semblants, només hauríem de canviar la cel·la B3 per B4 i posar-hi els límits inferiors i superiors que volguéssim

Encara quedarien alguns detalls com la protecció del full perquè l'alumnat només en pugui tocar els botons. Per defecte, totes les cel·les del full de càlcul estan protegides. La protecció no actua si no es protegeix el full (Menú *Eines/Protegeix el document/Full*). Abans, però, cal desprotegir les cel·les sobre les quals actuen els botons perquè aquests les puguin canviar. Dins les opcions de format de cel·la hi ha la fitxa *Protecció de cel·la* on hem de desmarcar l'opció *Protegit*. Si ho feim amb les cel·les B3 i B4, ja podem protegir el full i provar-lo.

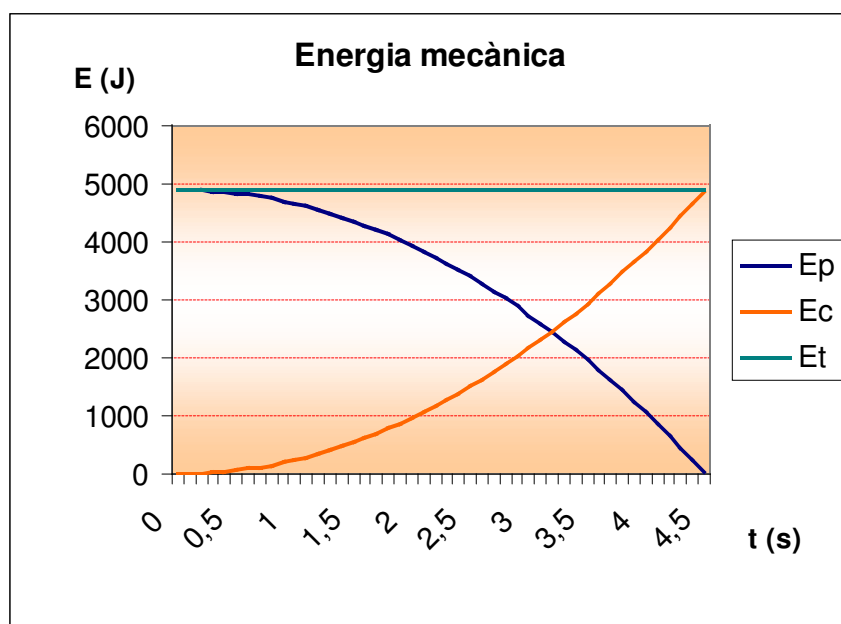


Activitat de reforç 1

Estudi de l'energia mecànica d'un cos en caiguda lliure (full energia d'Open2)

Creau un full de càlcul per estudiar les variacions d'energia cinètica i potencial gravitatòria d'un cos que cau lliurement. Entrau la massa del cos a una cel·la i l'altura a una altra. Creau una taula de valors de temps, posicions i velocitats durant la caiguda. És important **control·lar els valors que doneu al temps**, per tal que inclogui tota la caiguda per a qualsevol valor de l'altura. Això es pot fer calculant primer el temps que dura el moviment; a continuació es divideix en 20 parts, per exemple, i es creen 20 valors de temps: el primer seria el 0, el segon seria igual a l'anterior més la vintena part calculada abans, i la resta s'obtenrien arrossegant la fórmula per avall 19 cel·les més. A continuació afegiu tres columnes, una de l'energia potencial gravitatòria, una altra de l'energia cinètica i una tercera de l'energia mecànica total. Creau les fórmules que calculin totes aquestes magnituds.

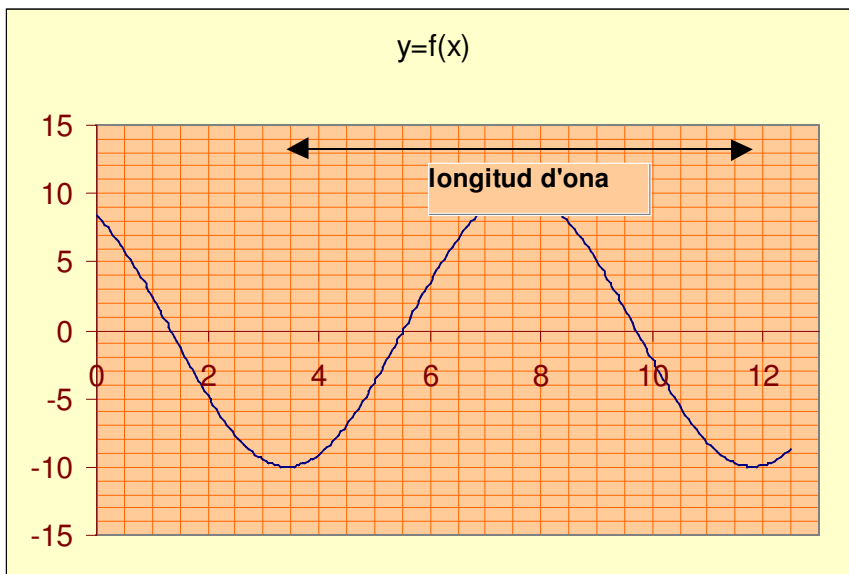
Representau gràficament les tres energies en funció del temps. Donau format al gràfic perquè quedi més clar. Guardau el fitxer com **Energia**



Activitat opcional 1

Estudi gràfic de la doble periodicitat d'un moviment ondulatori (full mov ondulatori d'Open2)

L'expressió d'una equació d'ona és $y(x,t) = A \cdot \sin(\omega \cdot t - kx)$. Dissenyau un full on hi figurin les característiques de l'ona (A , ω , k), una taula de valors de temps i posició x i la corresponent posició y . Creau les gràfiques $y-t$ per a una posició x fixa i $y-x$ per a un temps fix.



1.2 Resolució gràfica de problemes.

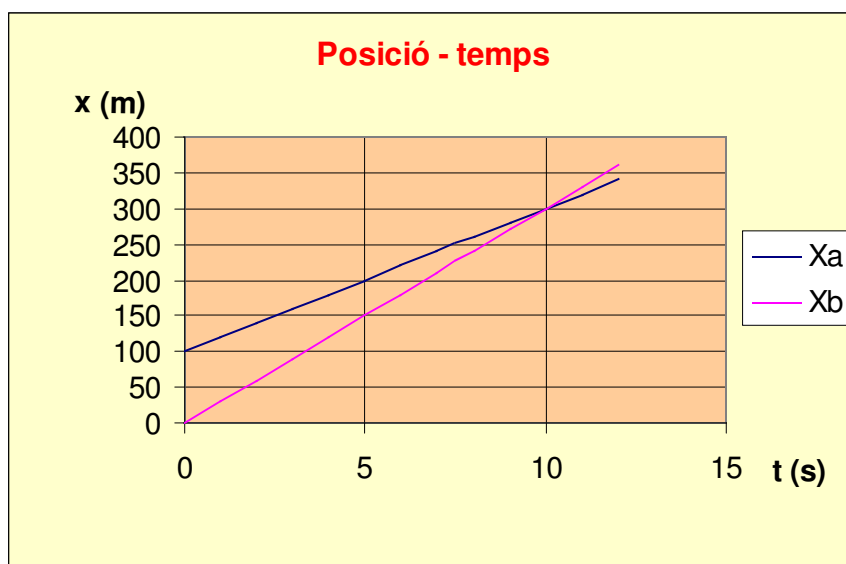
En aquest apartat, plantejarem com utilitzar el full de càlcul per a la resolució de problemes, de forma gràfica o utilitzant la funció de “Cerca de l'objectiu”.



Activitat d'introducció 2

Resolució d'un problema de dos mòbils que s'han de trobar (full dos mòbils d'Open1)

Considerau el problema de dos mòbils que parteixen al mateix temps de dues posicions inicials distintes, tots dos amb velocitat constant. Construïu un full on hi figuri la velocitat de tots dos mòbils i les seves posicions inicials. Creau una taula de valors de temps i posició per a cada mòbil. Representau a una mateixa gràfica les posicions dels dos mòbils en funció del temps. Guardau el fitxer com a **cinematica2**.



Prova de canviar les condicions inicials del problema, velocitats, posicions... i comprovau el resultat a la gràfica. El podeu veure acabat a Física4ESO.



Activitat opcional 2

Tir parabòlic (Full objectius d'Open1)

L'Open disposa de funcions que permeten, a partir de dades relacionades per una fórmula, cercar el valor d'alguna d'elles per tal que s'obtingui un valor determinat a una altra. Una d'aquestes funcions és "Cercar Objectiu".

L'activitat proposada ofereix un mètode molt ràpid per calcular, per exemple, l'angle que caldria, en un tir parabòlic, per tenir un determinat abast o l'angle perquè l'altura màxima tenguí un determinat valor..

Heu de crear un full on hi figurin la velocitat inicial, l'angle i les fórmules per calcular l'abast, l'altura màxima, el temps de vol...

	A	B	C	D
1	v_0	200	abast	$=B1^2/9,8*\sin(2*(B2*PI()/180))$
2	•	30	altura màxima	$=(B1^2*(\sin(B2*PI()/180))^2)/(2*9,8)$
3			temps de vol	$=2*B1*\sin(B2*PI()/180)/9,8$
4				
5				

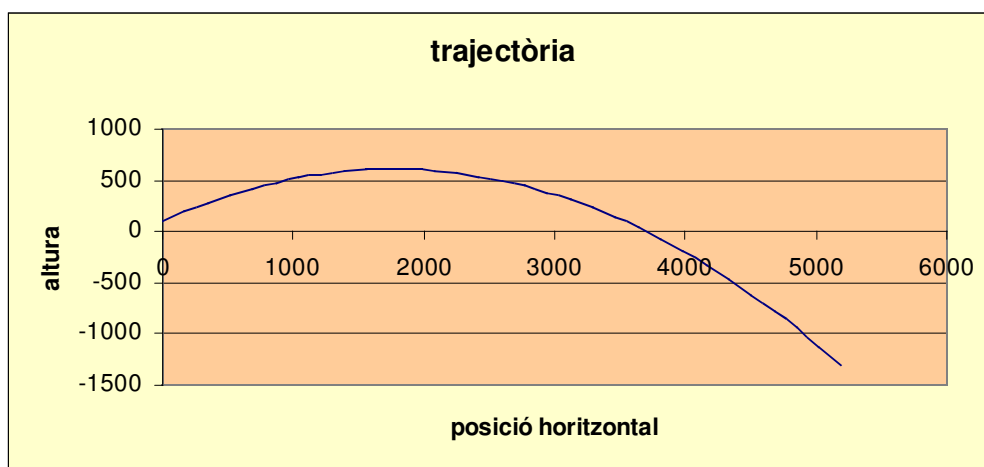
Accediu a les funcions del menú *Eines/ Cerca d'objectiu*. Aquesta funció ens permet, a partir d'unes cel·les lligades per una fórmula, calcular quin valor ha de tenir una cel·la perquè s'obtingui un determinat valor a una altra. Provau, per exemple, de calcular l'angle que caldria per obtenir un valor concret de l'abast o qualsevol altra combinació que vos pugui ser d'utilitat.

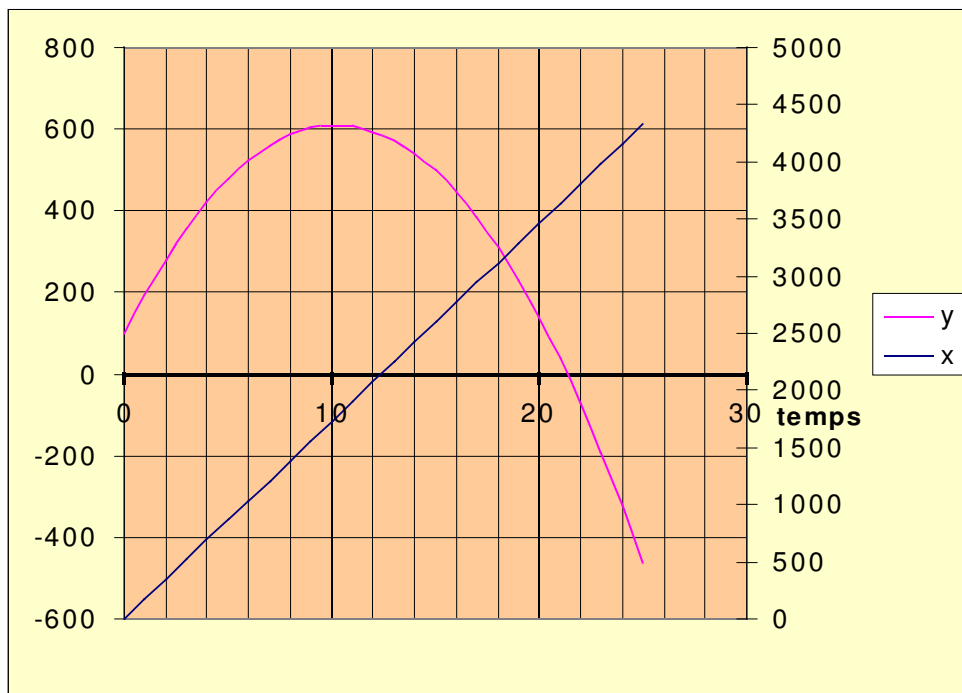


Activitat d'entrega obligada 1

Estudi d'un tir parabòlic

Dissenyau un full de càlcul per poder representar l'equació de la trajectòria, i les equacions de la posició i velocitat d'un tir parabòlic a partir d'una velocitat inicial, un angle i una altura inicial que siguin posteriorment modificables. **Agafau uns valors de temps que estiguin d'acord amb les dades inicials** (vegeu activitat de reforç 1). **La modificació de les dades inicials és recomanable que es faci amb botons de formulari** (vegeu les recomanacions que segueixen a l'activitat d'introducció 1). Donau un format adequat als gràfics i afegiu els elements que cregueu convenients per millorar el full. És important que els gràfics es vegin gairebé complets sense haver-se de desplaçar pel full. Guardau el fitxer com a **tir.xsc** i trameteu-lo a la tutoria. Enviau un correu a la tutoria per avisar que heu realitzat l'activitat.





1.3 Simulació gràfica d'experiments.

Un cas interessant d'aplicació consisteix en simular un experiment complet, fins i tot gràficament. A la següent activitat s'intenta simular una caiguda lliure, estudiada com si es disposés d'algun dispositiu que permeti fixar les posicions cada cert temps. Aquest dispositiu podria ser de tipus elèctric (un vibrador d'un timbre que copeja una cinta de paper autocopiable) o de tipus òptic (una càmera fotogràfica amb l'obturador obert mentre es dispara un flaix estroboscòpic de freqüència coneguda) ... Amb el full de càlcul podem suplir la manca d'aquests aparells i obtenir exactament allò que ens donaria l'aparell.



Activitat d'introducció 3

Representació d'una caiguda lliure (*Full caiguda lliure d'Open1*)

Dissenyau un full per poder representar gràficament totes les posicions que té un objecte en caiguda lliure cada cert temps com si es tractés d'una foto d'exposició múltipla.

Per aconseguir-ho, haureu de dissenyar, a un full nou (pot ser del mateix llibre de l'activitat 1) una taula de valors posició-temps semblant a la de l'activitat 1. Aquesta vegada, la representació gràfica l'haureu de fer utilitzant una sèrie constant, que no ha de sortir al gràfic. El resultat ha de ser semblant al gràfic següent:

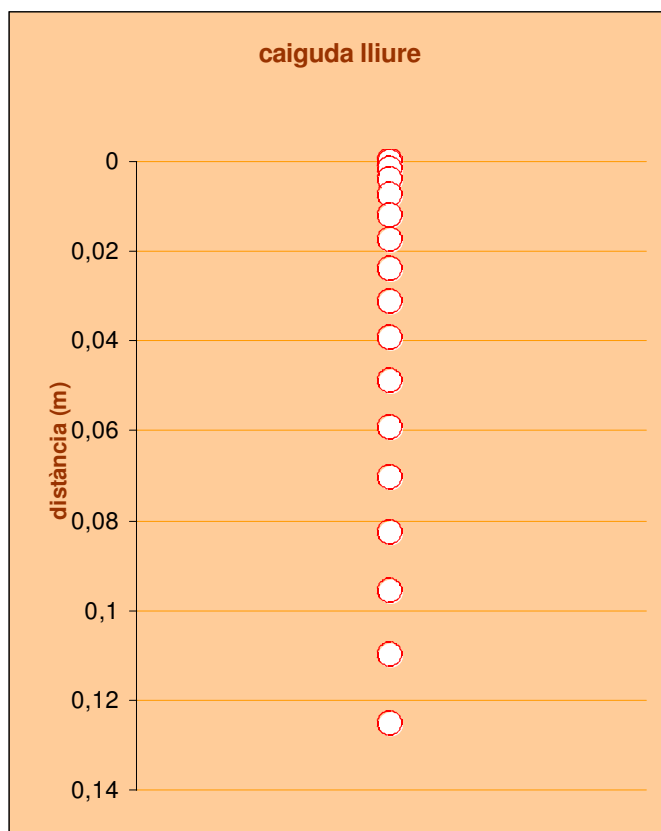


Aquest gràfic està fet utilitzant un interval de temps de 0,01 s.

El tipus de gràfic és XY.

Per aconseguir la forma de la bola que cau, heu de canviar el format de la sèrie de dades representades i escollir un marcador personalitzat de la forma i la mida que considereu més adequades....

Perquè els valors de posició comencin amb el zero a dalt, les distàncies estan calculades com a números negatius, amb un format que ho dissimuli (*Format de cel·la/Número/Personalitzat/ 0;0,00*)



Reforç

Activitat de reforç 2**Estudi de la flotabilitat dels cossos** (*Full Arquimedes d'Open2*)

Creau un full de càlcul per estudiar la dependència del volum submergit d'un cos de la seva densitat i de la densitat del líquid sobre el qual sura. Per això dissenyau una taula on es puguin entrar la densitat del líquid i la densitat d'uns quants cossos que surin dins el líquid. Creau les fórmules que calculin el volum submergit i emergit dels cossos (suposau un mateix volum constant per a tots ells).

Representau gràficament els volums emergits i submergits dels cossos amb un gràfic de columnes apilades.

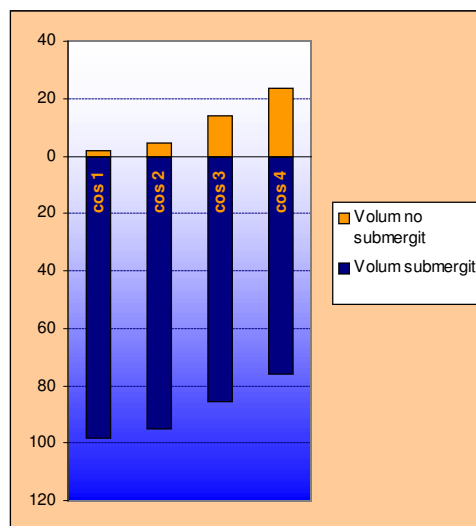
	A	B	C	D	E
1	La flotabilitat dels cossos.				
2					
3	Volum (comú a tots els cossos)			Densitat líquid	
4	100			1,05	
5					
6		cos 1	cos 2	cos 3	cos 4
7	Densitats cossos:	1,03	1	0,9	0,8
8	Volum submergit	=-\$A\$4*B\$7/\$D\$4	95	86	76
9	Volum no submergit	=\$A\$4+B\$8	4,8	14,3	23,8



Per poder simular la part submergida i l'emergida, es calcula el volum submergit com a número negatiu (se li dóna format per amagar el signe) i el volum emergit positiu.

És convenient controlar l'entrada de dades d'alguna manera per assegurar que la densitat del líquid superi la de qualsevol dels cossos. El millor sistema és emprar botons de formulari i les macros associades a ells. Podeu veure aquesta aplicació al full corresponent del fitxer Fisica4ESO

Quan tengueu el full dissenyat amb el gràfic, podeu provar de canviar densitats i veureu els efectes sobre el gràfic



Activitat opcional 3

Corba de valoració àcid-base forts (Full A-B forts d'Open2)

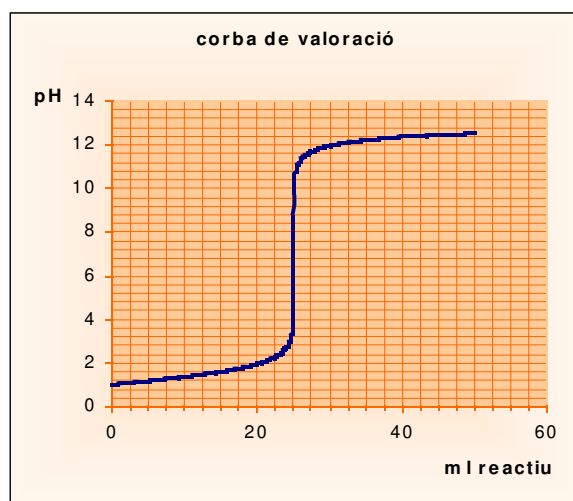
Dissenyau un full on hi figurin la concentració i el volum inicials d'un àcid fort, la concentració de la base forta que s'utilitzi com a reactiu d'anàlisi i una taula de valors **volum de reactiu-pH**.

Heu de tenir present que, en el càlcul del pH hi haurà tres zones diferenciades: quan l'àcid està en excés, quan hi està la base i quan estan en la proporció estequiomètrica justa. Per poder estendre una única fórmula a totes tres zones, haureu de recórrer a funcions condicionals enllaçades del tipus

=IF(condició1;7; IF(condició2;fórmula2;fórmula3))...

La condició 1 comprova si s'ha arribat al punt d'equivalència. Si és certa, posarà 7; si no ho és, la condició2 comprova quin està en excés i aplica la fórmula adequada.

A continuació representau gràficament el pH en funció del volum de reactiu



1.4 Tractament de les dades numèriques d'un experiment.

El procés de les dades obtingudes a partir d'un experiment pot resultar llarg i poc motivador. Un full de càlcul ens pot facilitar la tasca, reduint el temps necessari i oferint moltíssimes possibilitats per donar i analitzar els resultats.

Per reforçar els procediments relacionats amb aquest procés de dades, podem utilitzar el full de càlcul; en aquest cas, farem que, fins i tot ens generi les dades d'un hipotètic experiment amb un cert grau d'error aleatori.



Activitat d'introducció 4

Obtenció i procés de dades d'un experiment: la caiguda lliure (*Full Caiguda amb estadística d'Open1*)

Dissenyau un full de càlcul per poder obtenir dades de temps en un experiment de caiguda per un pla inclinat, afectades per un cert error aleatori, però controlat.

Suposau un pla inclinat un cert angle respecte a l'horitzontal (entreu-lo a la cel·la B1), amb unes marques de distància cada 0,25m fins a 3m. (Creau el conjunt de distàncies a partir de la cel·la A4 fins a A16).

Calculeu l'acceleració teòrica de caiguda pel pla a partir de l'angle (escriu a la cel·la B2 $=9,8 \cdot \sin(B1 \cdot \pi / 180)$); a continuació calculeu els temps teòrics de pas per cadascuna de les posicions. A la cel·la B4 entreu $= (2 \cdot A4 / B2)^{0,5}$ i estireu-la fins a la cel·la B16.

Utilitzant la funció `RANDOM()` que retorna un valor aleatori entre 0 i 1 o la funció `RANDBETWEEN(A,B)` que retorna un valor enter aleatori entre A i B, genereu tres temps afectats d'error per a cada temps de pas. Per això podeu sumar o restar un error aleatori a cada temps teòric. Una possibilitat seria utilitzar la funció condicional `IF` combinada amb la funció `RANDOM`. A la cel·la C5 entrariéu

$=B5 + IF(RANDOM() > 0,5; +RANDOM() \cdot 0,05; -RANDOM() \cdot 0,05)$

d'aquesta manera afectaríeu el temps amb una incertesa màxima de $\pm 0,05$ s.

Amb la funció `RANDBETWEEN`, podem posar $=RANDBETWEEN(B5-0,5; B5+0,5)$. L'únic problema que ens trobarem és el fet que retorni únicament nombres sencers. També ho podem solucionar escrivint:

$=RANDBETWEEN((B5-0,5) \cdot 10; (B5+0,5) \cdot 10) / 10$ si volem un decimal; si en volem dos, hem de posar 100 en comptes de 10.

Si arrossegau la fórmula dues cel·les més a la dreta i després per avall fins estendre-la a tot el rang de temps, tendreu la columna de temps que necessiteu per poder processar estadísticament les dades (vegeu les recomanacions d'un poc més avall).

Un cop generats els valors, heu de fer les mitjanes dels temps: a la cel·la F4 cal escriure $=AVERAGE(C4:E4)$ i estirar la fórmula per avall. Ara heu de fer la gràfica posició-temps. Un cop comprovat que es tracta d'una paràbola, podríem passar a fer la gràfica $x-t^2$, que serà una recta i ens permetrà calcular l'acceleració a partir del seu pendent. Per això, entreu a la cel·la G4 $=F4^2$ i esteneu la fórmula per avall. Si seleccioneu les cel·les des de A4 a A16 i G4 a G16, podreu fer la gràfica. El programa col·locarà t^2 a ordenades i x a abscises. Per poder canviar això, hem de duplicar els valors de posició a la dreta dels valors de t^2 (a partir de la cel·la H4) i fer el gràfic amb les cel·les de G4 a H16.

Amb l'edició de la gràfica activada, podeu fer aparèixer la recta de regressió si escolliu del menú *Insereix / Estadística, Correlació lineal*.

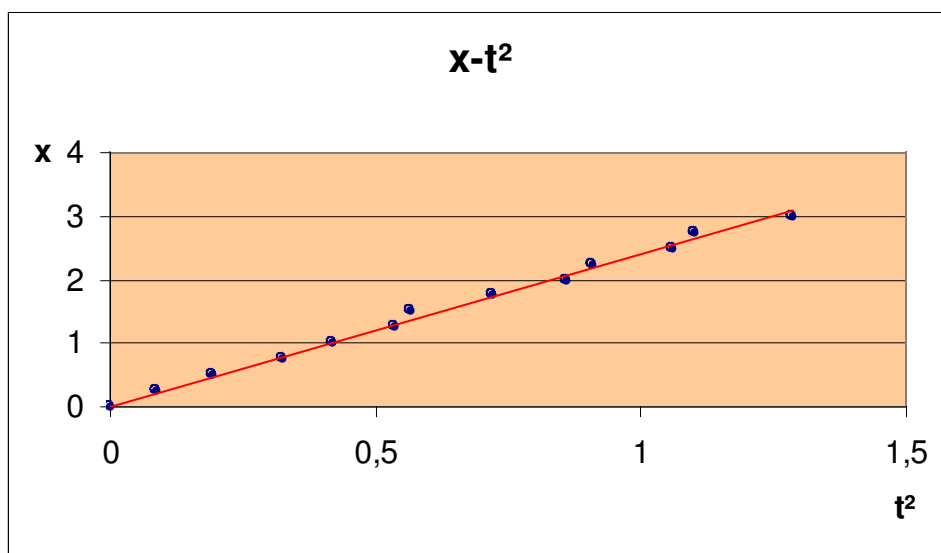
	A	B	C	D	E	F
1	angle	30				
2	accel	=9,8*SIN(B1*PI()/180)				
3	posició	Temps teòric	valors de temps afectats d'error			t _m
4	0	=(2*\$A4/\$B\$2)^0,5	=\$B5	=\$B5	=\$B5	
5	0,25	=(2*\$A5/\$B\$2)^0,5				
6	0,5	...				
				
16	3,0	=(2*\$A16/\$B\$2)^0,5				



L'ús de la funció **RANDOM** té un problema pràctic i és que genera nous valors a cada operació que fa el full de càlcul. Per tant, haureu de fixar el conjunt de valors per poder-los processar. Per això, seleccionau els valors de C4 a E16, pitjau *Copia*, posau el cursor a la primera cel·la C4 i escolliu *Edició/ Enganxament especial*. Si només enganxau els nombres (no enganxeu les fórmules), els valors quedaran fixats.

Per calcular el pendent de la gràfica, podem emprar la funció **LINEST()**, una funció matricial a la qual haurem d'entrar la col·lecció de valors Y i la col·lecció de valors X. En concret, per al nostre exemple seria =LINEST(H4:H16;G4:G16) que podeu entrar a qualsevol cel·la buida.

Per facilitar l'ús del full per part de l'alumnat, haureu d'amagar algunes columnes o files per tal que només siguin visibles aquelles cel·les amb les quals ha de treballar. Al menú format, columnes/ files hi ha l'opció d'amagar-les.



2 DIBUIX DE MUNTATGES DE LABORATORI

A l'hora de preparar el guió d'una pràctica, un llistat d'activitats... ens trobam amb la necessitat d'haver d'incloure muntatges de laboratori. Les figures per al muntatge les podem treure de diverses fonts, des de dibuixar-les de zero fins enganxar imatges baixades d' Internet escanejades. Si volem controlar totalment les figures i millorar-ne la presentació, podem emprar un programa de dibuix vectorial com l'openoffice.draw i basar-nos en imatges vectorials que es poden descarregar d'Internet. En aquest apartat volem aprendre a dibuixar un muntatge de laboratori que tenguí una certa complexitat. Per a obtenir les imatges, hem d'anar a l'adreça: <http://www.computerhuesca.es/~fvalles/matdelab/matlab.htm>, descarregar els fitxers zip i descomprimir-los dins una carpeta (els trobareu també al CD-ROM dins la carpeta de materials del curs). Ens trobarem amb un conjunt de peces independents, en format vectorial, que podrem combinar per crear gairebé qualsevol muntatge.



Activitat d'introducció 5

Muntatge per a una valoració.

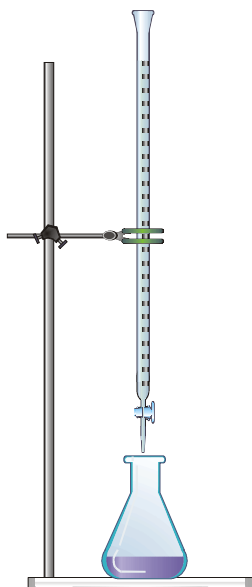
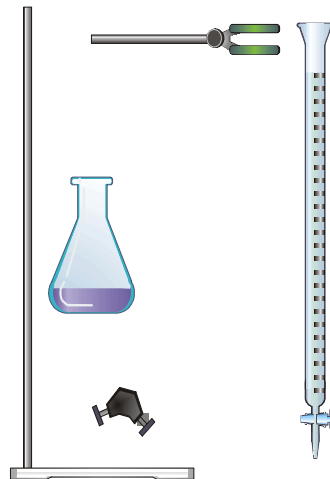
Combinau els elements adequats per dibuixar un muntatge per dur a terme una valoració. Amb el programa de dibuix de l'OpenOffice, escolliu l'opció del menú *Insereix / Gràfics* i, de la carpeta on heu descomprimit les imatges, inseriu les imatges "soporteL"; "Nuez", "PinzaL", "erlenme" i "bureta".

Per poder-les combinar, caldrà a) canviar-ne la mida per tal d'adaptar-les totes a la mateixa escala; b) moure-les a la posició adequada; c) decidir en quin ordre se superposen i d) agrupar-les una vegada col·locades perquè no se separin en el futur.

- Per canviar la mida, basta que seleccioneu la peça i arrossegueu un dels seus marcadors (amb la tecla Maj pitjada si voleu conservar les proporcions).
- Per aconseguir col·locar la peça a la posició adequada és important treballar amb un zoom bastant elevat. A la barra d'estat, si clicau amb el botó dret a sobre del zoom (o hi feis un doble clic), podeu canviar-lo fàcilment.
- Per canviar l'ordre en què se superposen les imatges (per defecte, queden superposades en l'ordre en què les inserim), heu de seleccionar la imatge i escollir l'opció adequada del menú *Modifica/Organitza*. Així, per exemple, podeu aconseguir que la pinça estigui per sobre de la bureta i la nou per sobre la pinça.
- Per agrupar unes quantes peces, primer les heu de seleccionar: si manteniu la tecla Maj pitjada podeu clicar sobre més peces i s'afegeixen a la selecció; també podeu agafar l'eina de selecció i arrossegar una àrea que inclogui totes les peces a agrupar. Després escolliu l'opció *Modifica/Grup* i tot el conjunt es comportarà com una única imatge. Si heu de fer una modificació a una peça concreta, heu de seleccionar el grup i escollir *Edita el grup* del menú contextual. Per tornar a agrupar, basta escollir *Surt del grup*.

També podeu afegir-hi rètols, fletxes... emprant les eines estàndard de dibuix. El resultat hauria de ser semblant a la figura següent.

Guardau el fitxer amb el nom **valora.sxd**.





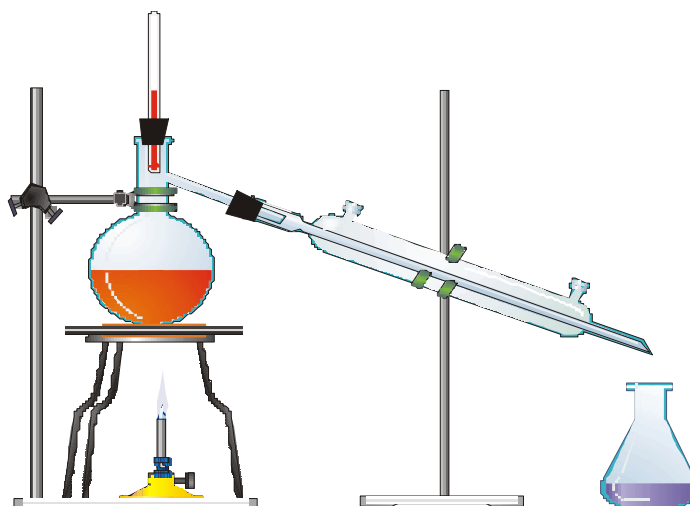
Activitat d'entrega obligada 2

Muntatge per a una destil·lació.

Combinau els elements adequats per dibuixar un muntatge per dur a terme una destil·lació. Amb el programa de dibuix de l'OpenOffice, escolliu l'opció del menú *Insereix / Gràfics* i, de la carpeta on heu descomprimit les imatges, inseriu les imatges "soporteL"; "tripode"; "rejilla"; "termome"; "SoporteF"; "Nuez"; "PinzaL"; "pinzaF45"; "taponP"; "tapon45"; "matrazdest"; "mechero"; "refrigR45";



Feis les operacions necessàries perquè el resultat sigui semblant a la figura següent. Guardau el fitxer amb el nom **destila.sxd**. Enviau aquest fitxer a la tutoria. Comunicau a la tutoria el seu enviament.



3 PROGRAMARI ESPECÍFIC DE L' ÀREA

En aquest mòdul veurem el funcionament d'alguns programes que són específics de la nostra àrea, i que són o bé de codi lliure o bé disposen d'alguna versió gratuïta que poden descarregar d'Internet. En concret, de química utilitzarem un simulador de laboratori de química, un programa per dibuixar molècules en 2D, un altre per visualitzar molècules en 3D que també permet dissenyar-ne i un programa d'ajuda a la formulació inorgànica. A l'apartat de física, no hem trobat programes que simulin un laboratori de física o que abastin un tema general, per això, només comentarem un conjunt de petits programes que permeten visualitzar fenòmens físics amb una certa interactivitat, així com els applets, que analitzarem més a fons en el darrer mòdul del curs.

Aquests programes tenen una evident utilitat com a eines per al professorat per preparar classes, activitats, fulls de formulació, pràctiques... i també poden ser aplicats a l'aula sense massa complicacions, seguint activitats semblants a les d'aquest mòdul. En una hora a l'aula d'informàtica, per exemple, es poden

fer una o fins i tot dues pràctiques de laboratori –virtuals- o practicar la formulació i nomenclatura orgànica, visualitzar les formes tridimensionals de les molècules... amb un mínim de preparació per part del professorat. Alguns programes estan en anglès, però el seu ús és prou senzill perquè aquest fet no sigui un impediment per poder-los aprofitar.

Els programes es poden baixar de les següents adreces, encara que, per evitar haver de fer moltes descàrregues, els teniu dins el Cd del curs.

Chemlab: <http://modelscience.com>

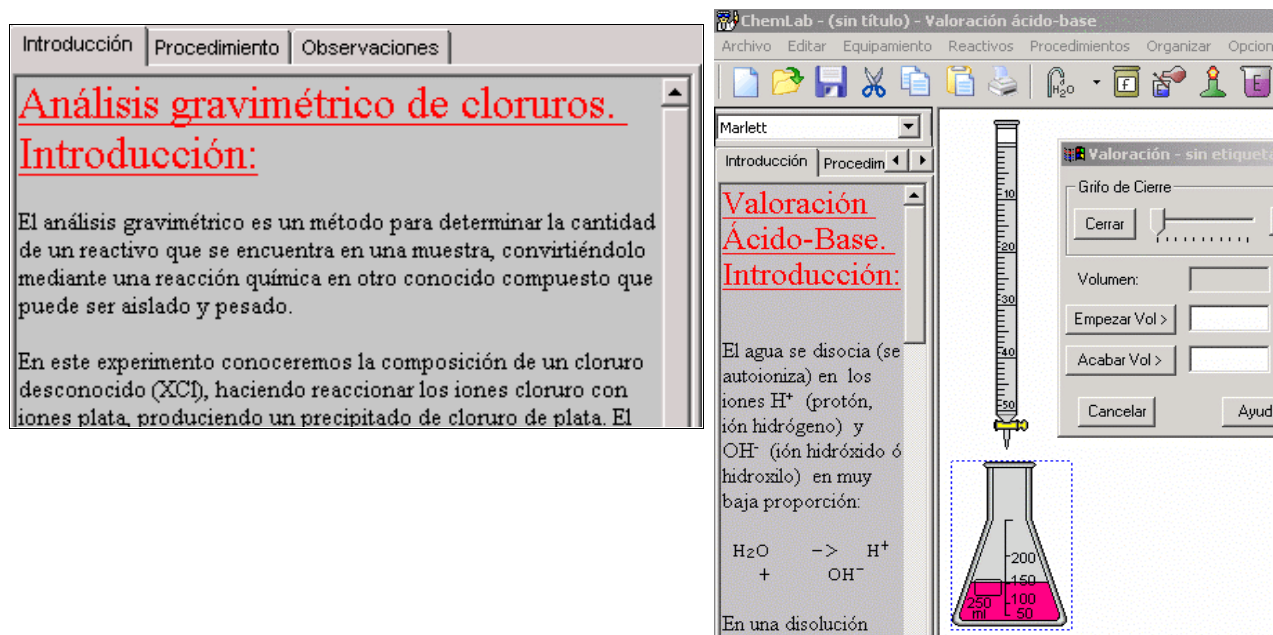
BkChem: http://bkchem.zirael.org/download_en.html

Pymol: <http://pymol.sourceforge.net/obtaining.html>

Formulació: http://www.juntadeandalucia.es/averroes/recursos_informaticos/programas/quimica_1.php3.

3.1 Laboratori Virtual de Química. ChemLab

Es tracta d'un simulador de laboratori, que permet fer algunes pràctiques: volumetria, gravimetria, precipitació fraccionada, calorimetria... La versió que es pot baixar d'Internet no té tots els mòduls del programa, però així i tot, és prou completa per poder-li treure el suc. En el moment de la revisió d'aquest document, la darrera versió en castellà és la 2.3.a a la qual corresponen les imatges.




Quan iniciem el programa, hem d'escollir el mòdul amb què volem treballar. Si no n'hem escollit cap, ho podem fer anant al menú *Opciones/ Experiencias*. Alguns d'aquests mòduls canvien segons la versió del programa que tinguem instal·lada. Cada mòdul disposa d'una introducció teòrica, d'un guió de la pràctica i d'un full d'anotacions. Podem amagar o obrir aquesta part de la finestra des del menú *Opciones/Solo Laboratorio*.

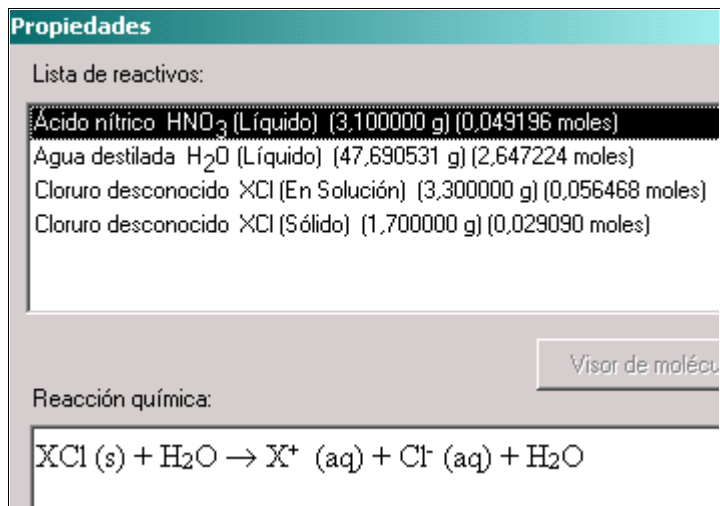
Per fer la pràctica només cal seguir les instruccions del guió. El material el seleccionam amb la icona corresponent o, si en volem controlar més detalls, des del menú *Equipamiento* de la barra de menús o del menú contextual.






Per posar un reactiu dins un aparell, primer cal seleccionar-lo; a continuació hem de pitjar la icona  o anar al menú *Reactivos/ Conjunto de reactivos*. Surt una finestra de diàleg que permet escollir la substància desitjada i la quantitat que en volem abocar. Els reactius concrets dependran del mòdul que hem escollit. Per exemple, a l'anàlisi volumètrica àcid-base, podem escollir àcid clorhídric, hidròxid sòdic i alguns indicadors

Si tenim un aparell seleccionat i escollim *Propiedades químicas* del menú contextual, podem veure exactament tot allò que hi ha dins l'aparell

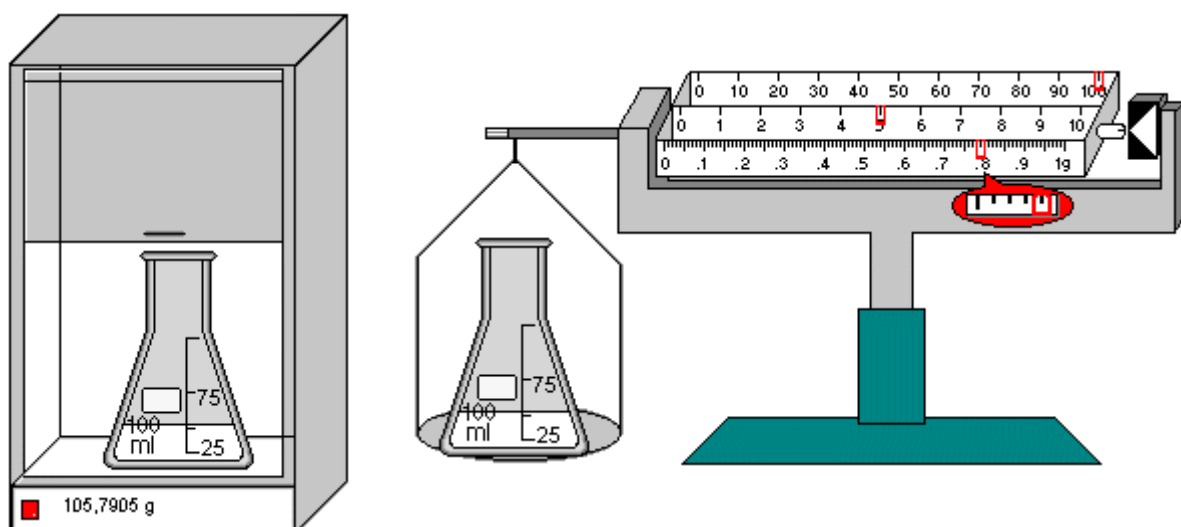


Per abocar el contingut d'un estri dins un altre, cal col·locar el primer sobre el segon (un poc més amunt) i escollir *Verter/decantar* o pitjar la icona . Si no funciona, hem de moure lleugerament l'estri.


Si necessitam una bureta, haurem d'obrir la finestra de valoració que ens permet controlar la velocitat amb què abocam el contingut de la bureta



Si necessitam pesar, disposam de diverses opcions: si escollim l'opció *Mostrar peso* del menú contextual sobre l'estri seleccionat, el programa ens mostra la massa del contingut de l'estri; si volem simular una pesada real, podem escollir un del tipus de balança i posar-hi l'estri a sobre.



Un altre dels procediments que podem emprar és la filtració: hem d'escollir i seleccionar el recipient que

rebrà el filtrat i escollir *Embudo buchner* del menú contextual o pitjar la icona . Ara podem abocar la mescla a filtrar sobre el buchner. A continuació, retirem el buchner amb la mateixa icona i el programa ens avisarà que el filtre conté una substància i ens deixarà transvasar-la a un altre recipient per pesar-la.



Activitat d'entrega obligada 3 Realització d'una pràctica amb Chemlab

Instal·lau el Chemlab a partir del fitxer comprimit. Obriu el programa i escolliu el mòdul de valoració àcid-base.

Donau un cop d'ull a la introducció, el procediment i el full d'observacions. Aquesta part de la pantalla pot amagar-se. Seguiu les instruccions del procediment i intentau completar l'anàlisi. Observau que, als apartats 5e i 6e, el programa suggereix repetir la valoració emprant un pHmetre per detectar el punt d'equivalència. Seguiu les indicacions i enregistrau les dades de pH en funció del volum de reactiu abocat. Podeu escollir entre veure el gràfic o la taula de valors.

Quan hagueu acabat, anotau els resultats al full d'observacions i guardau el fitxer amb el nom **acid_base** (el programa hi posa l'extensió .lab). Enviau el fitxer a la tutoria i avisau del seu enviament.



El programa té un mòdul per poder crear noves pràctiques, però en la versió d'avaluació no permet guardar les noves pràctiques creades.

Es poden posar etiquetes al material que es va emprant. Proveu-ho i comprovau com el programa les utilitza per fer referència al material.



Activitat opcional 4

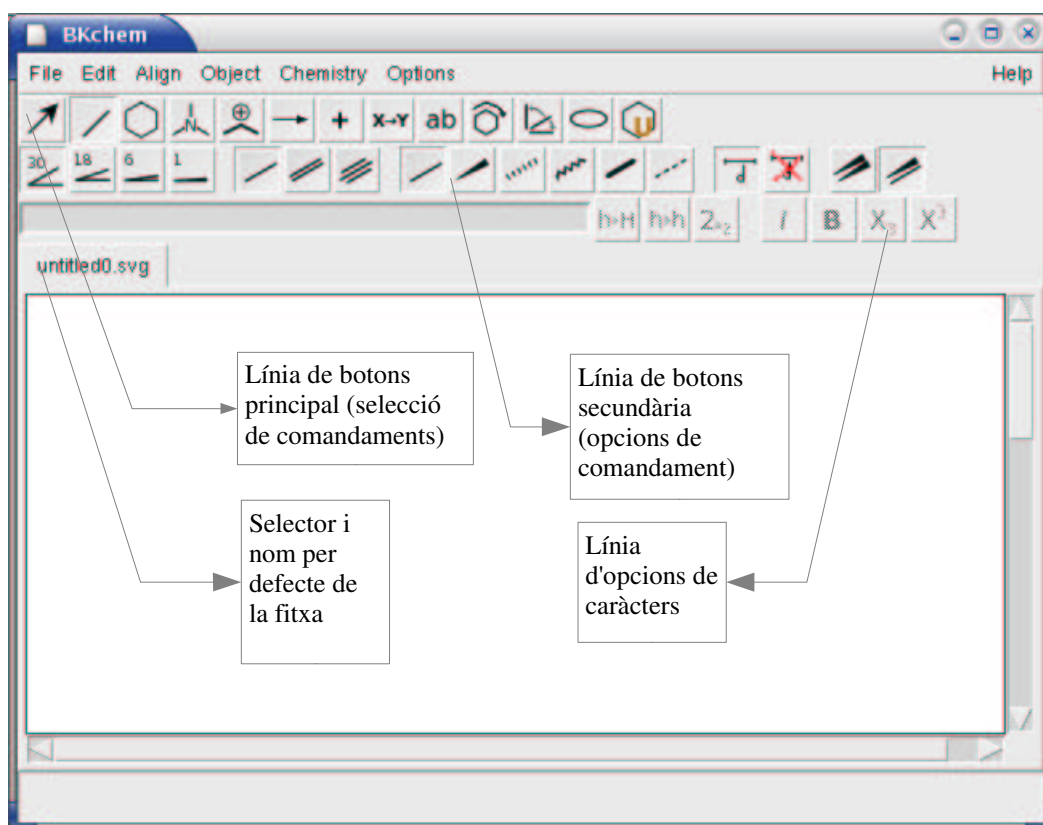
Proveu algunes de les altres pràctiques que té el programa per tal de conèixer les seves possibilitats. Si voleu fer algun comentari, ho podeu fer enviant-lo a la tutoria.

3.2 Disseny de molècules en 2D

Com a programa per dibuixar estructures químiques en dues dimensions farem servir BKchem en la seva darrera versió estable en el moment de la redacció d'aquest tutorial. BKChem porta al nom les inicials del seu creador, Beka Kosata. Es tracta d'un programa escrit en el llenguatge de programació Python i distribuït sota llicència GNU/GPL. Això significa que és un programa de lliure distribució amb el codi font disponible per realitzar les modificacions, traduccions i adaptacions que un usuari amb coneixements de programació trobi adients. La versió que treballarem en aquest tutorial té la interfície en llengua anglesa. A més de distribuir el codi font del programa, al lloc web (<http://savannah.nongnu.org/projects/bkchem>) es troben versions d'executables d'aquest programa compilades per a Linux i en format de Microsoft Installer (.msi) per poder executar aquest programa en entorn Windows. Les captures de pantalla corresponen a la versió 0.9.0, però en el moment de tancar aquest tutorial, la darrera versió que es pot descarregar és la 0.10.1, que està dins dels fitxers del curs.

Amb aquest programa podrem dibuixar i modificar estructures de molècules orgàniques i esquemes de reaccions. La sortida d'aquest programa pot exportar-se com a arxiu d'OpenOffice.org Draw, en format .pdf i en format de coordenades atòmiques .mol. És especialment interessant l'exportació en format gràfic, la qual cosa ens permetrà inserir aquest esquema en documents de text, presentacions o com a arxius gràfics en format .html.


L'execució d'aquest programa ens proporcionarà la següent pantalla inicial. Hi ha una barra de menús superior i un seguit de botons, agrupats per files:











Cada vegada que es vol crear un esquema nou ens apareix una fitxa ("tab") corresponent a un nou esquema. L'estructura o esquema que es creï dins d'aquesta fitxa es podrà desar com a arxiu independent, que porta el nom per defecte "untitled0.svg". És possible treballar amb diversos esquemes i copiar de l'un a l'altra estructures amb l'operació de "copiar/enganxar" ("Edit-copy/Edit-paste"). Més endavant, a més del format propi del programa, veurem les opcions d' exportació de l' esquema en un format d' arxiu diferenciat.



Cada cop que seleccionem una opció del programa, la interfície gràfica proporciona indicacions d'ajuda de la funció seleccionada (en anglès) que apareix per davall de les barres de desplaçament de la finestra. Addicionalment, en passar el ratolí sobre els distints botons apareix el títol de la funció. Aquestes són les


úniques funcionalitats d'ajuda del programa, no obstant això, l'ús del programa és força intuïtiu quan s'ha assolit una certa pràctica.

La primera línia de botons, que el programa anomena "mode" inclou en primer lloc l'eina o funció principal d'edició . Amb aquesta eina es poden seleccionar tots els objectes que s'insereixen a l'esquema per

modificar-los posteriorment (posició, mida, propietats). Quan es fa clic sobre un objecte de l'esquema amb l'eina d'edició seleccionada, en fer clic amb el botó de la dreta del ratolí ens apareixerà un quadre amb les opcions d'edició disponibles per a aquest objecte. Amb la resta de botons d'aquesta primera fila se seleccionen els distints objectes que es poden incorporar a l'esquema. Aquests objectes són:


- enllaços ("mode draw") . Aquesta és l'eina principal per al dibuix d'estructures d'hidrocarburs lineals i ramificats. Com hem esmentat, és l'eina que ens apareix seleccionada per defecte quan cream un nou esquema.
- patrons d'estructures cícliques .
- àtoms . Aquesta eina permet canviar l'àtom per defecte de la cadena principal (C) per un heteroàtom.
- marcadors de càrregues i de radicals . Aquesta addició és químicament significativa ja que, com veurem, en tenir habilitat per a un àtom l'opció de mostrar els hidrògens, la incorporació de la marca de càrrega modifica de forma automàtica el número d' hidrògens al centre.
- els elements per a la creació d'esquemes de reacció (sagetes , el signe "+"  i d'altres elements per representar una reacció ).
- Els patrons d'estructures definits per l'usuari, que se seleccionen amb el botó . Veurem que és possible desar una estructura que haguem creat com a patró definit per l'usuari. D'aquesta forma es pot complementar el llistat de patrons d'estructures disponibles.

En la mateixa línia es troben eines de rotació d'objectes  i de reflexió respecte a un pla .

Les diverses opcions de cada una d'aquestes funcions principals es troben a la segona línia de botons. Així, en obrir el programa, l'objecte seleccionat és el d'enllaç , i a sobre es troben les distintes opcions de dibuix d'enllaç, que per a aquest objecte són la resolució de l'angle d'enllaç (desplaçaments de 30, 18, 6 i 1 grau), l'ordre de l'enllaç, estereoisomeria, establiment de longitud fixa, longitud variable i opcions de perspectiva per enllaços dobles.

Veurem l'ús d'aquestes opcions de forma bàsica tot seguit, per tal de conèixer la mecànica d'aquest programa. De forma general, es tracta de crear una estructura base (per a una molècula orgànica serà una cadena carbonada principal) i, tot seguit, fer modificacions per tal d'introduir cadenes carbonades laterals, heteroàtoms i funcionalitats; de forma que puguem arribar a construir l'estructura de la molècula. El programa està especialment dissenyat per a estructures de compostos orgànics. No obstant això, es pot fer servir per dibuixar estructures de Lewis de molècules inorgàniques en base a l'aplicació de la regla de l'octet.

Creació d' una estructura lineal

Suposem que volem dibuixar una cadena lineal d'un hidrocarbur saturat (l'n-decà, per exemple). Hem de tenir seleccionat l'eina d'enllaç . Les opcions per defecte d'aquesta eina són les d'un enllaç carboni-carboni d'ordre 1. Més endavant es podrà modificar l'ordre d'enllaç per crear alquens i alquins.

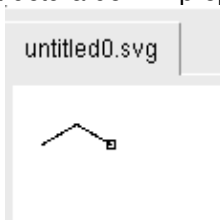
En fer un clic amb el botó de l'esquerra del ratolí (a partir d'aquest moment, si no assenyallem el contrari, tots els clics corresponen al botó de l'esquerra) a una posició de l'àrea de dibuix, ens apareix el primer enllaç, el qual correspondria a l'estructura de l'età:



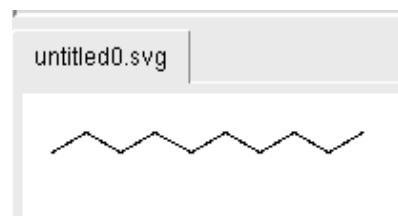
El rotlle és l'origen de l'enllaç i correspon al punt on hem fet clic. A l'extrem, al quadret, tenim el punt d'inserció de nous objectes (es tracta d'entrada d'un nou enllaç, però podria ser una estructura patró o un àtom distint del carboni). Amb l'eina d'enllaç encara seleccionada, posicionam el ratolí sobre el punt d'inserció. Veurem que l'origen del nou enllaç es desplaça en aquest punt (apareix un rotlle) com el de la figura:




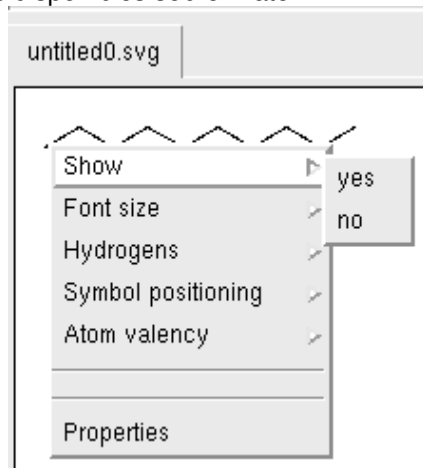
En fer clic amb el botó de l'esquerre sobre el nou origen, afegirem un nou enllaç simple en aquesta posició. Si, en haver fet clic, mantenim pitjat el botó del ratolí, quan apareix el nou enllaç podem modificar l'angle d'aquest enllaç amb l'anterior en desplaçar el ratolí, segons la definició de l'increment que es troba a les opcions de l'eina d'enllaç (per defecte es desplaça de 30 en 30 graus). Un cop inserit el nou enllaç no és possible modificar-ne l'angle. El que sí es pot fer és “desfer” l'operació i inserir de nou l'enllaç amb l'angle correcte. Quan s'ha inserit un objecte o s'ha realitzat qualsevol canvi a un objecte i ens adonam que caldria tornar enrere i repetir la instrucció és molt útil fer servir el comandament “Edit-Undo” (o la combinació de tecles Ctrl-z). El programa enregistra tots els comandaments introduïts, de forma que es pot anar tornant erera en la seqüència d'instruccions que s'han introduït.. Si, en haver fet clic i addicionat el nou enllaç, amollem el botó queda inserit el nou enllaç en un angle de 110 graus respecte l'anterior. Per l'exemple que desenvolupem, ens trobaríem en l' estructura de l' n-propà:



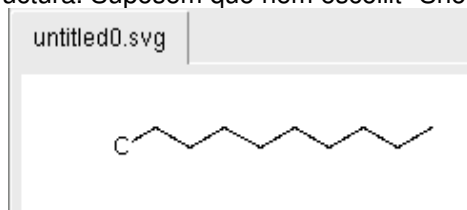
La creació de l'estructura de l'n-decà consistirà en fer successius clics en les posicions finals de cada enllaç afegit fins completar el nombre de carbonis adient. Deixam els angles d'enllaç que apareixen per defecte i el resultat final seria:



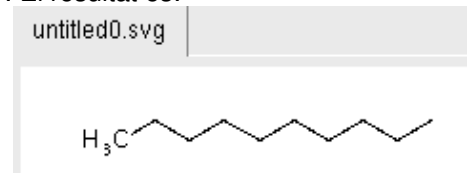
Aquesta estructura és del tipus condensat, és a dir, als vèrtexs es troben els àtoms de carboni i s'ometen els hidrògens. Si ens interessa que apareguin els símbols químics d'un àtom particular i els hidrògens que porta enllaçats, cal canviar al mode d'edició (botó ). Amb el mode d'edició seleccionat, fem clic amb el botó de la dreta del ratolí sobre l' àtom del qual volem que es mostri el símbol. Ens apareixerà un quadre de menú amb les opcions disponibles sobre l' àtom.



Si només volem canviar una característica (per exemple, mostrar el símbol de l'àtom), fem clic a sobre del nom (per exemple, "Show" per mostrar l'àtom) i, al sots-menú que es desplega, seleccionam les opcions disponibles. A l'exemple, podem escollir que es mostri o no el símbol de l'àtom. En haver fet clic a l'opció, aquesta queda reflectida en l'estructura. Suposem que hem escollit "Show/yes":

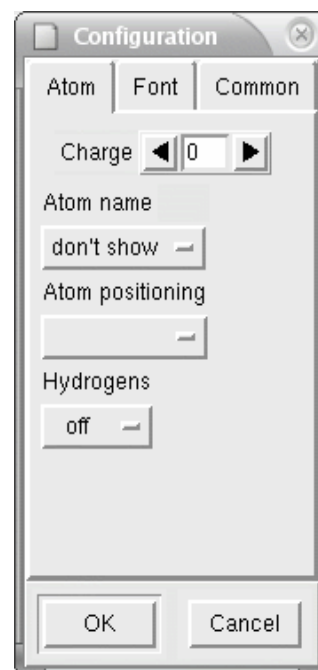
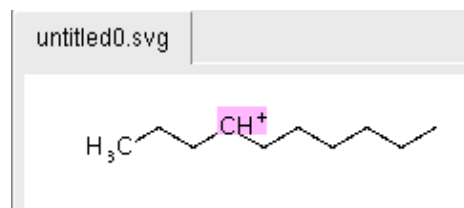


Si volem que, a més, apareguin els hidrògens enllaçats a aquest carboni, cal repetir el procediment i al menú, seleccionar "Hydrogens/on". El resultat és:

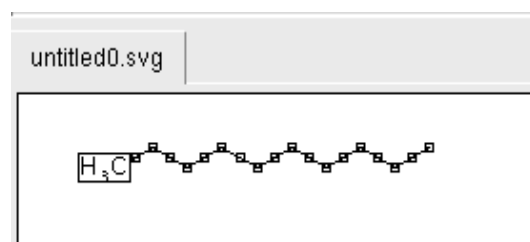


Si es vol canviar més d'una característica, per exemple, seleccionar de cop que es mostri el símbol de l'àtom i els hidrògens sense haver de repetir dues vegades l'acció de seleccionar en mode d'edició l'àtom, a la finestra de menú cal seleccionar "Properties". Apareix una nova finestra "Configuration" amb tres seccions diferenciades:

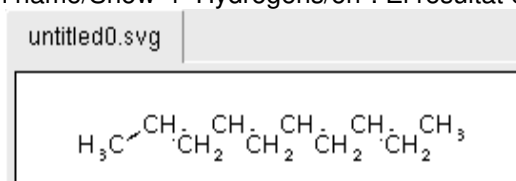
La secció amb més sentit químic és "Atom". En aquesta secció podem establir l'àtom com a catió (càrrega 1, 2, ...) o anió (càrrega -1, -2, ...), mostrar el símbol químic de l'àtom i mostrar els hidrògens enllaçats. Com suggereix el seu nom, a la secció "Font" seleccionam les característiques de format dels caràcters i a "Common" podem escollir un color per al fons de l'àtom o un requadre. Aquesta darrera és útil si volem destacar un àtom específic de l'estructura. A l'exemple que hem creat, podem seleccionar en mode d'edició l'àtom 4 i definir-lo com a carbocatió mostrant els hidrògens que porta enllaçats i destacar-lo de l'estructura amb un fons de color fúcsia. Per això s'estableix a la finestra "Configuration" el valor "Charge" a "1", "Atom name" a "Show", "Hydrogens" a "on" i a la secció "Common" s'ha escollit un color de fons "Area color" amb el codi "#ffb8ff" (el color resultant se selecciona mesclant els canals vermell, verd i blau amb barres de desplaçament). El resultat és:



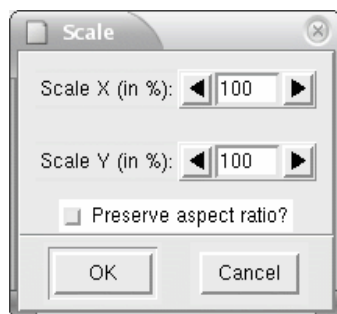
Els canvis a les propietats dels àtoms de l'estructura es poden aplicar de forma col·lectiva a una selecció o a tots els àtoms de l'estructura. Per això, amb el mode d'edició seleccionat, mantenint pitjat el botó esquerre del ratolí, obrim un quadre en el qual seleccionam els objectes pels quals volem fer una modificació global. Per exemple, suposem que ens interessaria mostrar l'estructura de l'n-decà amb tots els símbols dels àtoms de carboni i hidrogen. Podem tornar a l'estructura de l'n-decà per desfer la definició del carbocatió amb el comandament "undo" tres vegades. Fem la selecció de tots els objectes de l'estructura, que queden emmarcats amb un requadre:



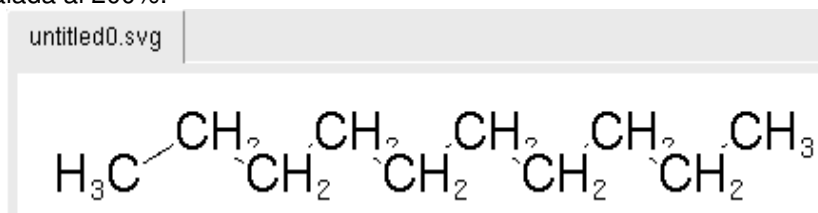
Amb tots els objectes seleccionats, fem clic a sobre l'estructura amb el botó de la dreta i fem clic a "Properties". Seleccionam "Atom name/Show" i "Hydrogens/on". El resultat és:



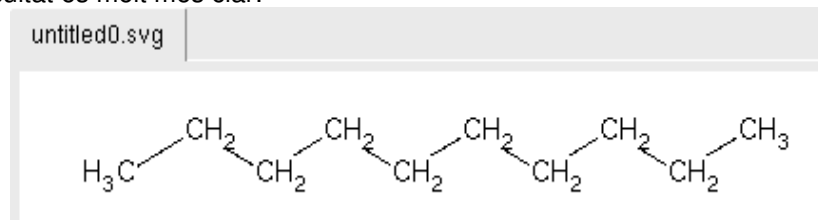
La mida dels caràcters que representen els símbols fa que aquests cobreixin els enllaços. Per millorar l'aspecte de l'estructura, veurem les eines de modificació de l'aspecte de les estructures. Una bona solució consisteix en escalar l'estructura al 200% i, llavors, reduir la mida de la font amb l'eina d'edició. Per escalar l'estructura, cal seleccionar-la sencera amb l'eina d'edició i, llavors, fer clic a "Object-Scale", s'obre la finestra "Scale":



Perquè l'estructura no quedi deformada, convé seleccionar el botó "Preserve aspect ratio?". Amb els botons d'una de les dues dimensions, deixam el factor d'escala a 200. Fem clic al botó "OK" i ens apareix l'estructura reescalada al 200%:




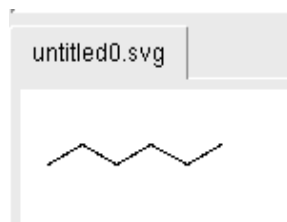
Seleccionam de nou tota l'estructura escalada i escollim com a mida de la lletra ("Font size"), per exemple, 14. El resultat és molt més clar:




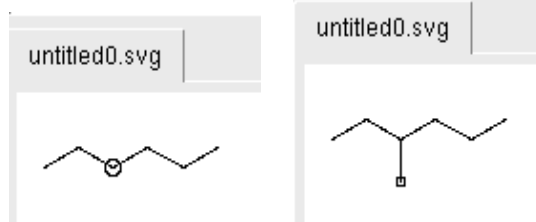
Per moure una estructura sobre el pla del dibuix, és suficient, en mode d'edició, fer clic en qualsevol posició i, mantenint el botó del ratolí espitjat, moure' l a la nova posició.

Incorporar cadenes secundàries

Un cop es tenen cadenes lineals, afegir ramificacions consisteix en inserir nous enllaços en la posició del carboni que vulguem que sigui secundari/terciari. Això s'aconsegueix havent seleccionat l'eina d'enllaç  i fent clic en la posició del carboni de la cadena principal on volem inserir la ramificació. Podem modificar l' angle d' enllaç amb la mateixa tècnica que hem assenyalat per a les cadenes lineals. Així, per a la cadena d' n-hexà:




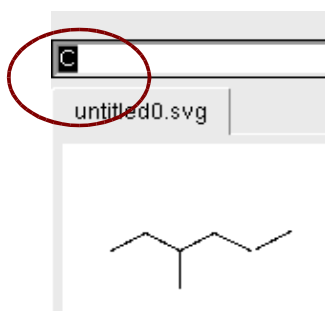
Seleccionam l'eina d'edició , posam el ratolí al carboni 3, per exemple, i ens apareix el rotlle que ens assenyalava on quedarà inserit el nou enllaç. Fem, llavors clic sobre aquest punt i ens apareix un grup metil a la posició 3. Com podem veure, el programa escull l'angle d'enllaç més adient:



De la mateixa forma que per a les cadenes lineals, podem editar les propietats dels nuclis per mostrar el símbol químic de l'element, modificar el seu format i mostrar o no els hidrògens.

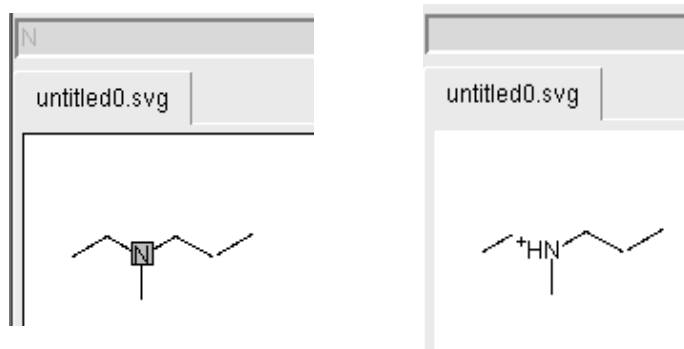
Incorporar heteroàtoms a una estructura

Per modificar els àtoms de les cadenes de forma que tinguem un element distint del carboni, s'han d'anar substituint els àtoms de carboni de la cadena per aquells que vulguem que aparegui. Per exemple, si volem que el 3-metil hexà que hem construït sigui una amina terciària (metil-etil-propil amina) cal substituir el carboni en la posició 3 per un nitrogen. Amb l'estructura disponible, seleccionam l'eina d'àtom  i fem clic sobre l'àtom que volem substituir (en el nostre cas el 3r). A sobre de la fitxa ens apareix un quadre de text en el qual es troba el símbol de l'element corresponent a l'àtom que volem substituir.




Per a l'estructura que hem dibuixat, aquest símbol és, òbviament, el del carboni. Si volem que sigui un àtom de nitrogen, escrivim el seu símbol i pitjam la tecla Enter. D'aquesta forma ja queda construïda l'amina terciària:

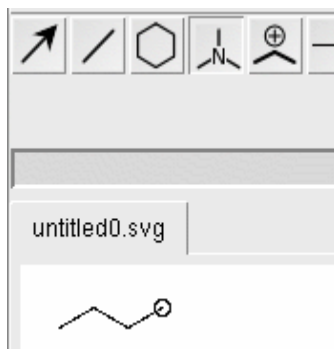
El programa reconeix la valència dels heteroàtoms, de forma que l'assignació d'hidrògens es realitza de forma químicament significativa. Per a aquest exemple, si amb l'eina de selecció seleccionam el nitrogen i, a la finestra de propietats "Properties" modifiquem la càrrega atòmica del N a +1, ens apareix de forma automàtica l'hidrogen:



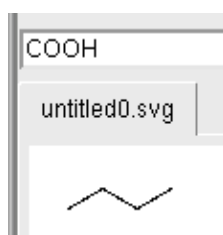
La posició de l'hidrogen respecte de l'àtom al qual està enllaçat es pot escollir amb les opcions "center last letter" (l'hidrogen apareix a l'esquerra, l'opció per defecte) i "center first letter" (l'hidrogen es troba a la dreta). El format dels caràcters alfanumèrics dels símbols dels àtoms també poden modificar-se amb les diferents opcions de la finestra "Properties" a l'apartat "Font".

Afegir grups funcionals. Podem afegir-los sense haver d'explicitar la seva estructura; amb l'eina d'àtoms activada, a la finestra de definició d'àtom es pot posar una combinació d'àtoms que representin el grup

funcional. Amb una cadena carbonada dibuixada, seleccionam l'eina d'àtom  i fem clic a la posició en la qual volem inserir el grup funcional.

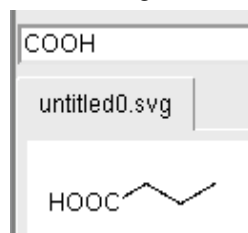
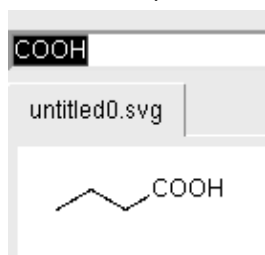


Al quadre de text, per exemple, escrivim "COOH" si el que volem és crear l' estructura d' un àcid orgànic.

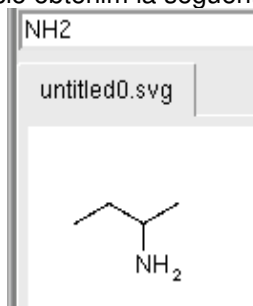


En prémer la tecla "Enter" en el punt d'inserció se substitueix l'àtom original de la cadena, el C, pel grup funcional assenyalat. Apareix, llavors la imatge de l' esquerra:

Si la inserció es fa a la posició del primer àtom de l'esquerra de la cadena, el programa inverteix de forma automàtica la seqüència per deixar l'hidrogen en l'extrem, de forma que es manté la significació química de l' estructura, encara que escrivim "COOH", apareix la imatge de la dreta:



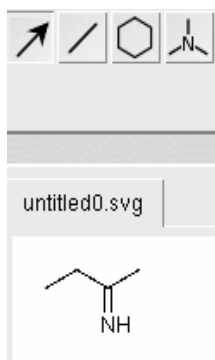
En afegir aquests grups, el programa converteix els nombres en subíndexs. Per exemple, per afegir una amina, en escriure NH2 en el punt d' inserció obtenim la següent estructura:



El **canvi de l'ordre dels enllaços** s'aconsegueix amb l'eina d'enllaç seleccionada en fer un clic sobre l'enllaç, o bé en fer clic sobre el botó corresponent a la fila de botons d'opcions de l'eina d'enllaços. La diferència en l'ús d'un o altre sistema rau en que en fer clic sobre l'enllaç s'alternen els ordres d'enllaç possibles sense alterar la valència dels àtoms que formen l'enllaç, mentre que l'ús dels botons de canvi d'ordre d'enllaç força el dibuix d'estructures amb àtoms hipervalents, en tot cas ens apareix un missatge a la barra inferior de la pantalla amb l' avís "Maximum valence exceeded!"



La resta de botons a la dreta dels tres botons de canvi d'ordre d'enllaç permeten proporcionar una idea de la disposició espacial dels enllaços i són útils per a representacions 2D de molècules estereoisòmeres. Si es fa servir l'alternança de tipus d'enllaç fent clic a sobre l'enllaç, de la mateixa forma que a la resta d'eines d'inserció i modificació d'objectes a les estructures, el nombre dels hidrògens s'ajusta automàticament per complir la valència de l'element, si hem decidit mostrar els àtoms i dels hidrògens. Així, a la 1-metil propanamina anterior, un clic sobre l'enllaç C1-N amb l'eina d'enllaç seleccionada genera automàticament la imina corresponent:





Podem comprovar, a més, que els successius clics sobre l'enllaç no n'augmenten al seu ordre, segons el manteniment de la valència del C i del N. Aquesta eina de dibuix, per tant, es converteix en una eina didàctica per al dibuix d'estructures de Lewis. Per a cada àtom, és possible escollir els valors de valència possibles (per exemple, pel N es troben 3, per amines i imines, i 5 per grups nitro) en seleccionar l'eina d'àtom i fer clic amb el botó de la dreta i, a "Properties", escollir "valence".

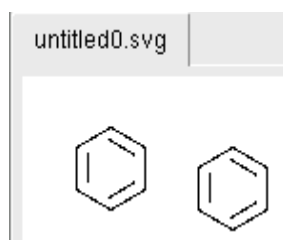
Dibuixau l' estructura de Lewis del 2-nitro butà.

Cicles i plantilles

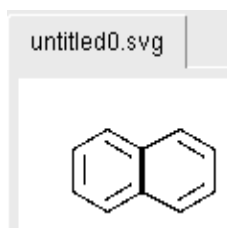
El programa disposa dels cicles més comuns en química orgànica, encara que es poden dibuixar sense gaire dificultats si disposam de forma adequada els angles dels enllaços. Una característica interessant és que en tenir diversos cicles, en posar-los en contacte podem crear estructures bicícliques ja que el programa concatena de forma automàtica els àtoms solapats.

Per exemple, per dibuixar l'estructura del naftalè, seleccionam el comandament per seleccionar patrons d'estructures cícliques ("template")  i, d'entre les estructures disponibles, escollim la del benzè .

Fem, llavors, clic a la posició de l'àrea de dibuix on volem que ens aparegui la molècula i ens apareix l'estructura de l'anell de benzè. Fem, llavors, clic a una altra posició de l'àrea de dibuix per introduir un segon anell de benzè separat del primer:



Ara fem clic sobre qualsevol element (àtom o enllaç) del segon anell de benzè i, sense deixar de prémer el botó del ratolí el traslladam a la vora del primer, de forma que es solapin dos enllaços d'ambdues estructures. El resultat és l'estructura del naftalè. Podem veure que l'alternança de dobles enllaços corresponents a l' estructura aromàtica queda reorganitzada:




Operacions amb les estructures


A més d'escalar l'estructura i modificar el format dels caràcters que representen els símbols dels elements i de l'atomicitat, el programa disposa d'un seguit d'eines per modificar la disposició de l'estructura que hem creat: les eines de rotació i les eines de transformació. És recomanable realitzar aquestes operacions quan ja s'ha ajustat l'escala de l'estructura que tot just hem creat.

Rotació.

La rotació de l'estructura té dues possibilitats: 2D i 3D. La rotació 2D és en torn d'un eix perpendicular al pla de la pantalla i la rotació 3D en torn d'un eix paral·lel a la pantalla. Aquesta darrera es fa servir per proporcionar un cert efecte de perspectiva en l'estructura, tot i que cal ésser conscient que l'efecte de la rotació no té significació estructural, fora del cas de que l'estructura que haguem dibuixat correspongui a una molècula plana. Per al treball amb estructures tridimensionals de molècules farem servir un programari específic més endavant en aquest tutorial. En la rotació d'una estructura (en el mode 2D o 3D) els àtoms assenyalats amb lletres mantenen l'orientació normal de la lectura. Per rotar una estructura basta fer clic al botó de rotació i, llavors, mantenint el botó esquerre del ratolí espitjat, desplaçar el ratolí.

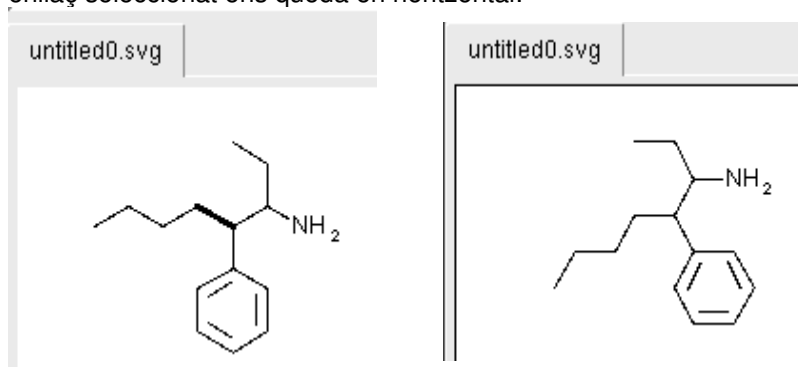
Transformació.

La disposició de l'estructura pot modificar-se per modificar els angles diedres o de torsió, i per realitzar operacions de simetria de reflexió en torn de certs enllaços. Per accedir a aquestes eines, s'ha de seleccionar el botó "transformation mode" . Les opcions de transformació disponible apareixen, llavors, en la segona fila de botons:


1. *Alineació horitzontal i vertical d'un enllaç o línia definida a l'estructura.* Amb aquestes eines podem alinear l'estructura horitzontalment o verticalment. Per això cal seleccionar un enllaç o bé una línia imaginària definida per dos punts de l'estructura. L'estructura sencera es reorienta de forma que l'enllaç o línia seleccionada ens quedi horitzontal o vertical, respectivament. Vegem un exemple per a l'alineació horitzontal de l'estructura respecte un enllaç:
 Seleccionar el botó "transformation mode"  i llavors, el botó "horizontal align" (alineació horitzontal)




Desplaçam, llavors, el ratolí sobre l'enllaç que volem que ens quedi en posició horitzontal. Aquest enllaç ens apareixerà destacat amb una línia amb més gruix. En fer clic es produeix la reorientació de l'estructura i l'enllaç seleccionat ens queda en horitzontal:

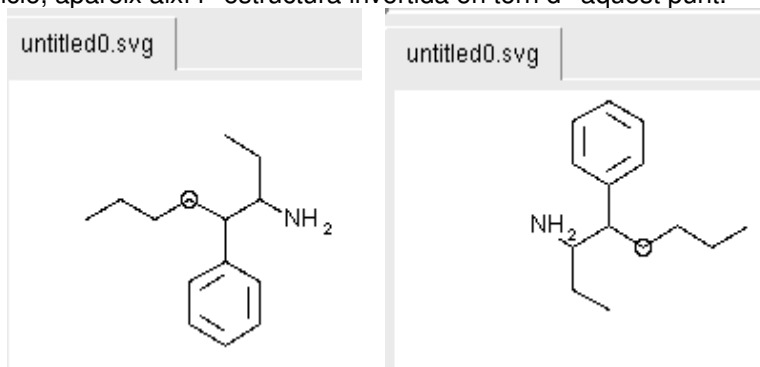


La rotació necessària es porta a terme en el sentit que comporta una rotació menor. Per a totes aquestes transformacions, en cas que els resultats no siguin els esperats, cal recordar l'existència del comandament "desfer", que té la drecera de tecles Ctrl-z.


Les alineacions verticals es realitzen de la mateixa forma, només que s'ha de seleccionar el botó "vertical align"  abans de definir l'enllaç o línia recta respecte a la qual es vol modificar la disposició de l'estructura. Veurem la forma de definir una línia a l'estructura a un exemple de reflexió.

2. *Invertir l'estructura en torn d'un punt.* Aquesta eina es fa servir amb el botó “invert through a point” .

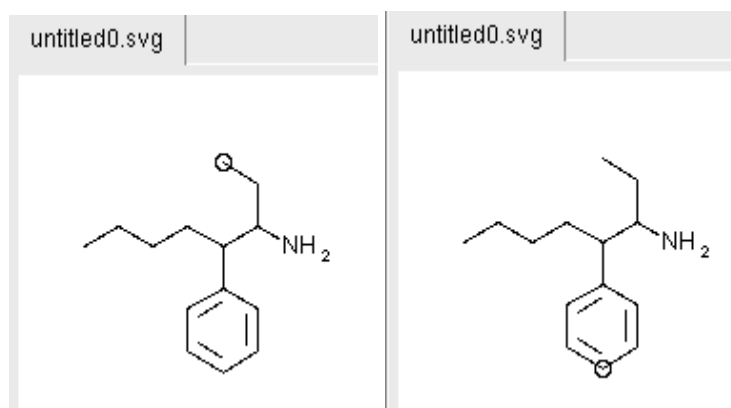
Amb aquest botó seleccionat, fem clic a l'àtom que volem que sigui el punt respecte el qual s'inverteix l'estructura. Sobre l'àtom seleccionat, en desplaçar el ratolí a sobre, ens apareix un rotlle. En fer clic en aquesta posició, apareix així l'estructura invertida en torn d'aquest punt.



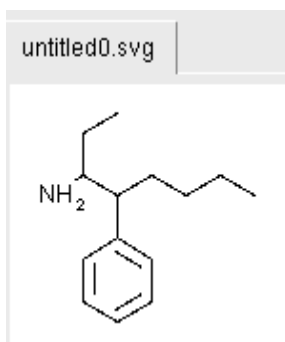
S'escau per a aquesta eina fer el mateix advertiment respecte a la significació estructural d'aquesta operació. Es realitza sobre la disposició plana de l'estructura, de forma que no reflecteix, per exemple, la inversió de simetria en estereoisòmers. Per això, caldrà fer ús d'aplicacions de treball amb estructures tridimensionals.


3. *Reflexió en torn d'una línia.* L'estructura es disposa com a imatge especular en torn d'un enllaç o una línia. Aquesta eina se selecciona amb el botó .


que passa per dues posicions en les quals es troben dos nuclis. Realitzarem un exemple per a aquest darrer cas. La tècnica de definició de línies consisteix en assenyalar un primer àtom i, llavors, un segon. Sobre els àtoms seleccionats apareix un petit rotlle. En fer clic al segon queda definida la línia imaginària i es produeix la reflexió de l'estructura en torn d'aquesta línia, com si aquesta estigués continguda en el pla del mirall.

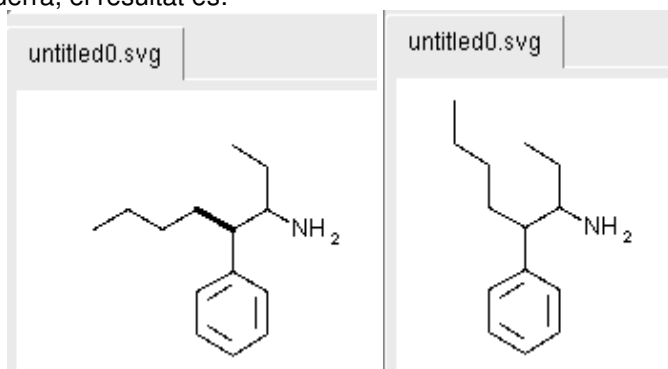


El resultat és:



4. *Canvi de l'angle diedre* (rotació lliure en torn d'un enllaç). Aquesta eina correspon al botó (“free rotation around bond”)  i permet modificar l'angle diedre (torsió) en torn d'un enllaç de l'estructura que s'ha dibuixat. Com que l'estructura és plana, l'ús d'aquest comandament canvia l'orientació relativa dels grups

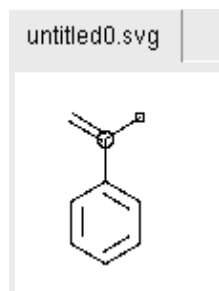
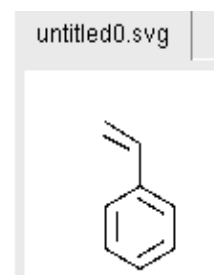
que formen part d'aquest enllaç i només té significació estructural per a alguns en els quals el pla de la pantalla es correspon amb el pla de l'enllaç, de forma que aquest comandament permet l'intercanvi d'una disposició cis a una altra trans. Així, amb el botó  seleccionat, si fem clic sobre l'enllaç que apareix ressaltat a la figura esquerra, el resultat és:




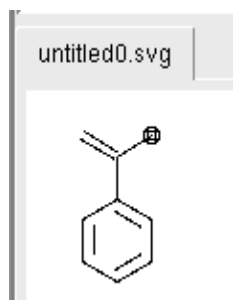
Ús dels patrons d'estructures

El programa permet definir patrons d'estructures definits per l'usuari, que llavors poden ser utilitzats en la màquina en la qual està instal·lada l'aplicació. En un entorn Linux, els patrons personalitzats queden desats a la carpeta de l'usuari `/home/nom_usuari/.bkchem/templates`, mentre que a Windows, es troba als sots-directori `.bkchem/templates` del directori en el qual es troba instal·lat BKchem. Qualsevol estructura creada amb BKchem pot ésser desada en forma de patró d'usuari. Per això, a més de l'estructura en si, caldrà assenyalar quina és la posició o àtom d'enganxament amb altres estructures ("atom template") i l'enllaç que es concatenarà amb el d'una altra estructura quan es solapi amb aquest ("bond template"). Vegem-ho amb un exemple. Suposem que hem dibuixat l'estructura de l'estirè:


Ens pot interessar tenir aquesta estructura per tal de fer-ne modificacions o bé per fer-la servir com a monòmer i així dibuixar un fragment de poliestirè. Per assenyalar l'àtom d'enganxament d'aquesta estructura amb una altra estructura cal crear un enllaç simple l'única funció del qual és assenyalar aquest àtom. En desar el patró, aquest enllaç es crearà automàticament entre l'estructura patró per aquest punt amb una estructura qualsevol. Cream l'enllaç a la posició 1'

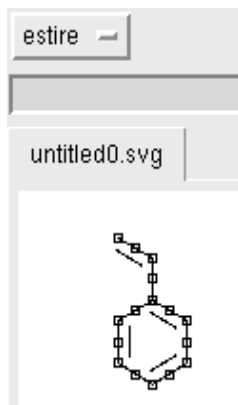


seleccionem l'eina patró  i deixem el ratolí sobre el punt d'enganxament, de forma que ens apareix de la següent forma:



Amb l'extrem d'enganxament seleccionat, premem la combinació de tecles Ctrl-t. Apareix a sota un missatge que ens informa que hem establert l'enllaç del patró "focused atom marked as 'template atom'". Recordem que aquest enllaç només assenyalava el punt d'enganxament amb una altra estructura. Per definir l'enllaç del patró, amb l'eina de patró seleccionada posam el ratolí sobre un enllaç i tornem a prémer la combinació Ctrl-t. Per últim, seleccionem tota l'estructura amb l'eina d'edició i seleccionem "Object/Set object name" i donem un nom per a l'estructura. Aquest nom serà per poder identificar el patró d'estructura personalitzat d'una llista desplegable. Un cop definit aquest nom anem a "File/Save as template" i proporcionem un nom per a l'arxiu del patró. Aquesta estructura estarà disponible com a patró personalitzat al menú en tornar a iniciar una nova sessió amb BKchem. Si volem fer-lo servir tot d'una, cal sortir i tornar

entrar al programa. Per inserir a una posició d'una estructura o a l'àrea de treball una de les estructures que hem definit com a patrons personalitzats fem clic al botó . Apareix un botó de menú amb el nom del primer patró, per ordre alfabètic, que tinguem definit. Si volem escollir un altre patró d'estructura fem clic sobre el botó i es desplegaran els disponibles. Un cop seleccionada l'estructura patró, en fer clic sobre l'àrea de treball apareixerà dibuixada l'estructura.



La posició d'inserció és la predeterminada en el patró de l'estructura i la posició de concatenació d'estructures predeterminada és també la de l'enllaç que s'ha definit en el patró de l'estructura.

El menú “Arxiva” (“File”)

Aquest apartat del menú ens permet de desar l'esquema o estructura, carregar esquemes ja desats i l'accés a les funcions d'exportació/importació de les estructures o esquemes a/d'altres formats.

El format nadiu de les estructures en BKChem és el .svg. Aquests arxius fan servir la convenció del format xml (“Extended Markup Language”), un desenvolupament del codi html que fa servir la mateixa filosofia del codi font de les pàgines web i que fa servir marcadors específics que reconeix una aplicació concreta (en aquest cas el BKChem). Si obriu un arxiu amb l'extensió .svg amb un editor de text trobareu marcadors “químics” com <atom> i <bond>.

Una característica més interessant de BKChem és la possibilitat d'exportar les estructures i els esquemes en format .pdf i, especialment, en el OpenOffice Draw, el mòdul de dibuix del paquet ofimàtic OpenOffice. Aquesta compatibilitat és deguda al fet que el mateix OpenOffice.org fa servir també la convenció .xml. Poder exportar l'esquema o estructura creat amb BKChem com a arxiu de Draw (amb extensió .sxd) ens obre la possibilitat de convertir l'esquema o dibuix en tots els formats gràfics que el Draw té al seu abast. Aquestes imatges, encara es poden manipular gràficament amb un programa de tractament d'imatges, com el GIMP. Tot plegat fa que, per elaborar fulls d'exercicis o presentacions en l'OpenOffice, BKChem sigui una opció que no requereix complicades tasques d'exportació i conversió d'arxius.

La capacitat d'importació/exportació de formats específics d'estructures químiques, com l'SMILES, que incorpora informació d'estereoisomeria, i el MOL, que tradueix l'estructura en coordenades en tres dimensions, no està resolt de forma satisfactòria en aquesta versió. Així l'exportació a SMILES no està habilitada i l'exportació a MOL crea estructures completament planes amb una longitud d'enllaç errònia. El programa està encara en desenvolupament (la versió 1.0.0 està en període de proves) i aquestes prestacions sembla que estaran implementades. No obstant això, la funcionalitat del programa, a efectes de l'ensenyament de la Química a l'ensenyament secundari i a Batxillerat és més que suficient.



Activitat d'entrega obligada 4

Elaboració d'un document amb estructures del BKchem.

Elaborau, amb l'OpenOffice.org Writer, un full d'exercicis de nomenclatura orgànica o de compleció de reaccions orgàniques senzilles en els quals hi heu inserit esquemes o estructures elaborades amb BKChem. Desau els arxius d'estructures amb extensió .svg i exportau els esquemes o estructures al format .sxd (dibuix de OpenOffice.org Draw). Desau el document d'OpenOffice.org Writer amb el nom **estructures2D**.

Enviau alguns dels fitxers svg i el document *estructures2D* a la tutoria i avisau del seu enviament.

3.3 Disseny i visualització de molècules en 3D

Per treballar amb l'estructura tridimensional d'una molècula a la pantalla de l'ordinador necessitam un programa de visualització que converteixi les coordenades d'un espai de tres dimensions de cada un dels àtoms en una imatge bidimensional en la qual hi apareguin els enllaços que s'estableixen. Per això, aquestes aplicacions incorporen efectes d'il·luminació, d'ombreig i perspectiva sobre la imatge estàtica, que proporcionen un efecte de profunditat. Addicionalment, les imatges poden voltejar-se en torn d'un o més eixos, es poden fer aproximacions ("zoom") i desplaçar-se sobre el pla de visualització. Com veurem, es poden escollir diverses convencions per a la visualització de la imatge de l'estructura de la molècula, incorporar amidaments de distàncies interatòmiques, angles d'enllaç i angles diedres, mostrar els radis de van der Waals, la polaritat, ... L'ús més avançat d'aquests programes correspon a l'execució de seqüències d'ordres ("scripts") amb les quals es poden generar, per exemple, animacions per il·lustrar canvis en les estructures o reaccions químiques ("molecular morphing").

Les capacitats actuals dels equips informàtics de sobretaula i, especialment, de les targetes de vídeo permeten que es puguin substituir els models moleculars pel treball amb la visualització d'estructures químiques sense limitació de la mida de la molècula. És possible veure des d'estructures de molècules orgàniques i inorgàniques senzilles fins a macromolècules. En aquest tutorial farem esment en l'ús bàsic d'un d'aquests visualitzadors i proposarem alguns exemples per a la seva aplicació a l'aula.

Alguns dels programes de visualització, com el que farem servir en aquest tutorial, permeten la "construcció" d'una estructura d'una molècula partint de zero, en un procés similar al que seguiríem si volguéssim construir un model molecular "clàssic". D'aquesta forma, les distàncies i els angles d'enllaç són els estàndard. Farem servir aquesta eina, que és vàlida, a la pràctica, per a molècules no molt grans i per exercicis que comporten el reconeixement de la connectivitat de cada un dels àtoms. No obstant això, per investigar les característiques estructurals de molècules "reals" és molt útil recuperar de la Internet la descripció de l'estructura tridimensional de les molècules que puguin ser del nostre interès. Aquesta informació està continguda en arxius, normalment en format de text planer, que es llegeixen per part del programa de visualització. Aquests arxius poden tenir formats molt distints, molts d'ells són propis de programes específics o corresponen a les sortides de paquets de programari per a la realització de càlculs basats en l'aplicació de la Mecànica Quàntica sobre molècules. El format d'intercanvi d'estructures tridimensionals de molècules per excel·lència és el **pdb**.

L'extensió .pdb correspon a les sigles "Protein Data Bank" que es pot traduir com a "banc de dades de proteïnes". El format d'aquest arxiu es va dissenyar inicialment com a mitjà d'intercanvi dels resultats entre els distints grups de recerca que resolien l'estructura tridimensional de les proteïnes mitjançant difracció de rajos X. En l'actualitat segueixen complint aquest mateix propòsit, tot i que s'ha generalitzat el seu ús no només per a la descripció de l'estructura tridimensional de proteïnes i altres macromolècules orgàniques sinó també per a molècules més petites. La majoria de programes que treballen amb estructures tridimensionals tenen l'opció d'exportar les coordenades atòmiques a aquest format i de llegir aquest tipus d'arxiu.

Els arxius amb aquesta extensió tenen el format de text planer en el que cada línia porta un encapçalament amb una paraula clau que estableix el significat de la línia. D'aquesta forma, a més de les coordenades tridimensionals dels àtoms es poden afegir comandaments específics per als visualitzadors. Per exemple, els arxius .pdb de proteïnes assenyalen el nom i número d'aminoàcid al qual pertany un àtom individual, les unitats de la seva estructura secundària (llàmines o hèlix alfa) de les quals en forma part cada un dels residus i d'altres detalls estructurals. Aquestes informacions que es troben contingudes a l'arxiu .pdb permeten al visualitzador generar l'estructura tridimensional de la proteïna d'acord amb distintes convencions i en diversos nivells de detall.

En la seva forma més simple, per a molècules senzilles, als arxius .pdb és obligatori que hi hagi una línia per a cada àtom amb les seves coordenades cartesianes. Per exemple, a l'estructura de l'AZT (el primer fàrmac desenvolupat per a malalts de la SIDA), les primeres línies de l'arxiu són:

COMPND	(+) -3' -AZIDO-2' -DEOXYTHYMIDINE, AZT					
AUTHOR	DAVE WOODCOCK 96 12 20					
ATOM	1	C	1	-3.508	0.030	-1.831
ATOM	2	O	1	-4.825	-0.086	-2.183
ATOM	3	N	1	-2.782	1.085	-2.246
ATOM	4	C	1	-1.497	1.244	-1.872
ATOM	5	O	1	-0.855	2.382	-2.273
ATOM	6	N	1	-0.857	0.315	-1.075
ATOM	7	C	1	-1.562	-0.755	-0.647
ATOM	8	C	1	-2.907	-0.939	-1.019
ATOM	9	C	1	0.492	0.569	-0.557
ATOM	10	C	1	1.272	-0.672	-0.173
ATOM	11	C	1	2.700	-0.181	-0.104
ATOM	12	C	1	2.678	1.089	-0.946
ATOM	13	O	1	1.372	1.184	-1.462
ATOM	14	H	1	-3.248	1.835	-2.869

El significat de les paraules clau de cada línia s'explica per si mateix. La línia amb la capçalera `COMPND` ens dona el nom de la molècula, `AUTHOR` ens dona el nom (i de vegades el contacte) de la persona que ha generat l'arxiu. Tot seguit apareixen les línies per als àtoms de la molècula que comencen amb la paraula `ATOM`. La primera columna és el número d'ordre de cada àtom, la segona el símbol de l'element i, després d'una columna d'1 (que assenyalava que tots els àtoms pertanyen a una mateixa molècula) es troben les coordenades cartesianes. Podria haver dues columnes addicionals, una per a la càrrega atòmica i l'altra per al radi de van der Waals de l'àtom.

A la Internet es poden trobar i descarregar arxius `pdb` de molècules senzilles, macromolècules i proteïnes. En general, l'ús de qualsevol cercador amb el nom de la molècula (recomanable en anglès) seguit de `pdb` ens proporcionarà un seguit de llocs web d'on es poden descarregar aquests arxius. Una opció distinta és fer servir un plugin de navegador web, com el Chime, que veurem més endavant, per visualitzar de forma interactiva estructures de molècules en una pàgina web. En aquest apartat, el que veurem és el funcionament bàsic d'un visualitzador d'estructures tridimensionals de molècules i la forma en que podem construir estructures tridimensionals senzilles.

El visualitzador que farem servir és el `pymol` en la seva versió 0.98 (The PyMOL Molecular Graphics System), un programa creat per Warren L. DeLano (DeLano Scientific LLC, San Carlos, CA, USA.) i que es troba disponible per a Linux i per a Windows a <http://www.pymol.org>. Es tracta d'un programa distribuït segons la filosofia del "codi obert amb suport de l'usuari". Com podrem llegir a la presentació del programa, l'autor distribueix lliurement el programa i el seu codi font i, a canvi, espera que els usuaris participin en el seu finançament.

Des d'un punt de vista tècnic, el programa està creat amb el llenguatge de programació Python. A Linux, la instal·lació consisteix en la compilació d'una versió executable adaptada al sistema. Per això, atès el funcionament d'aquest sistema operatiu, el qual es basa en la compartició de llibreries, cal que les següents peces de programari estiguin instal·lades al sistema (dependències). Són les següents:

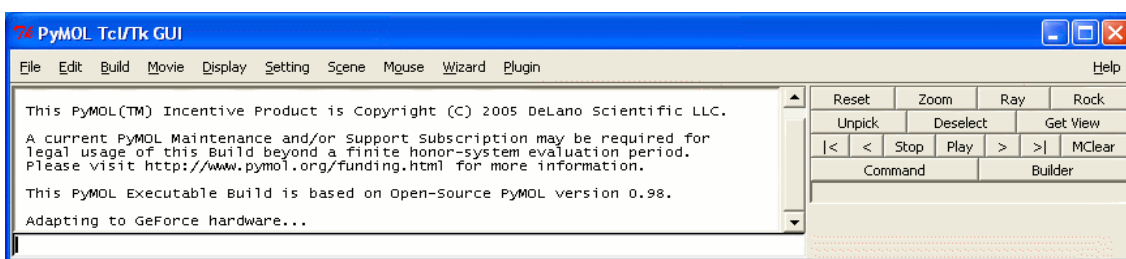
1. OpenGL
2. La llibreria compartida GLUT per a OpenGL
3. Python (v 1.5.2 o superior)
4. libpng (per tal de poder desar imatges en format .png)
5. Tcl/Tk (recomanable)
6. Numerical Python (recomanable)
7. Python megawidgets (Pmw) necessaris per a l'execució de la interfície gràfica.

El principal entrebanc per a la instal·lació d'aquest programa en entorn Linux és la disponibilitat de les llibreries gràfiques OpenGL, les quals no estan suportades per la totalitat de fabricants de targetes gràfiques.

A Windows, s'instal·la un executable que porta incorporades les llibreries necessàries i no requereix de cap més ajust que la correcta instal·lació dels "drivers" de la tarja gràfica per tal que aquesta funcioni amb la màxima resolució i rendiment. És recomanable que la tarja de vídeo tingui la seva pròpia memòria RAM.

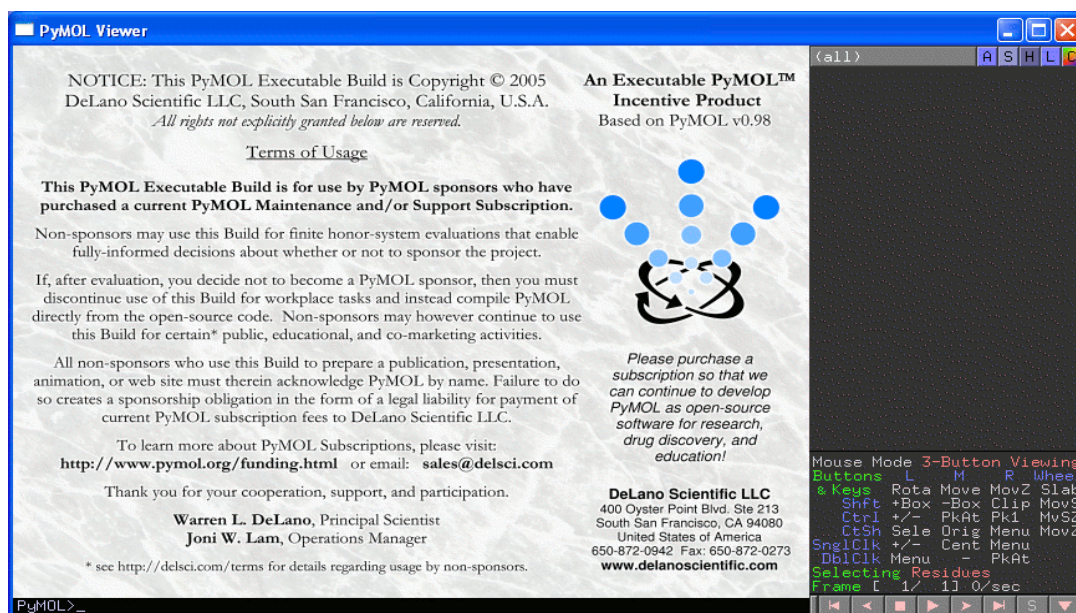
L'arrencada del programa ens proporciona l'entorn gràfic de treball amb dues finestres: una amb els comandaments (Tcl/Tk Gui) i una altra amb la finestra de visualització i les opcions de visualització dels diferents elements (PyMOL Viewer). La finestra de l'entorn gràfic permet l'execució de comandaments que afecten el comportament general del programa, mentre que a la finestra de visualització es troben els controls de visualització de l'estructura molecular.

PyMOL és un programa que funciona mitjançant la introducció de comandaments. La interfície gràfica el que fa és generar aquests comandaments a partir de les finestres que es despleguen per a cada opció a la barra de menú i als botons que es troben a la dreta:



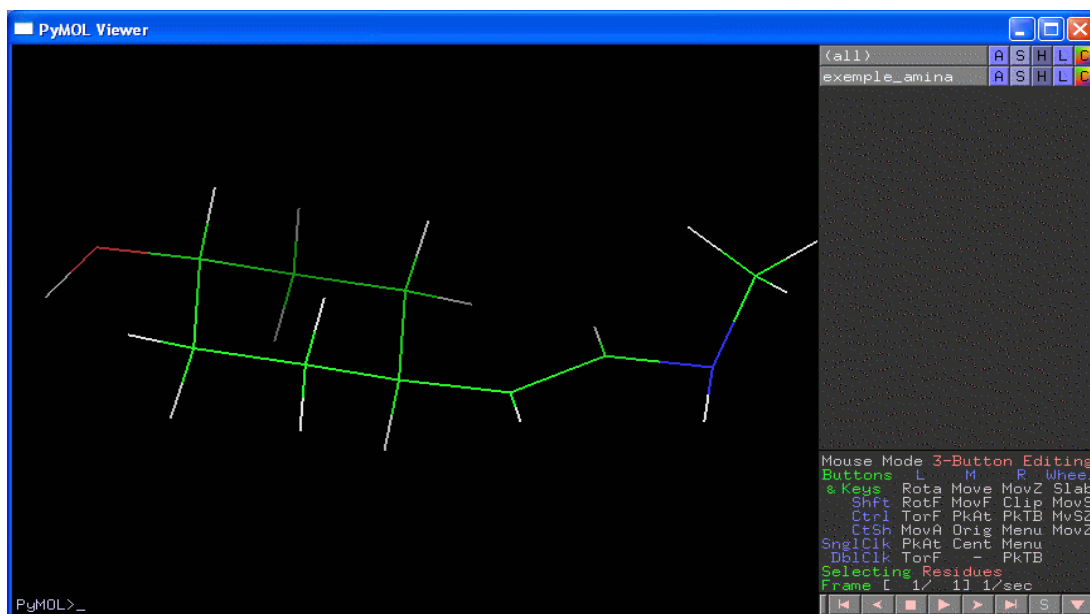
A l'àrea central de la finestra de la interfície gràfica apareixen els comandaments que s'han introduït al llarg del treball amb el programa. Finalment, a la línia de text inferior es poden introduir directament els comandaments en mode de text.

Quan s'ha llençat el programa, a la finestra de visualització ens trobam amb una pantalla amb informació sobre el programa i una referència a les condicions d'ús del programa. La pantalla que es mostra correspon a l'executable per a Windows en la seva versió 0.98. Com es pot llegir al text de la informació, l'ús de l' executable sense obligació de contribuir al programa està autoritzat per a finalitats educatives.



En fer clic a l'àrea de visualització desapareix aquesta informació i ens queda amb el color de fons per defecte (el negre). A la part inferior de l'àrea hi ha també una línia d'introducció de comandaments (encapçalada per `PyMOL>_`) que fa la mateixa funció de la que es troba a la finestra de la interfície gràfica. En trobar-se el cursor a l'àrea de visualització, prémer la tecla Esc ens mostra l'històric dels comandaments que s' han introduït. Per tornar al mode gràfic, es torna prémer Esc. Al quadre inferior dreta hi ha un resum de les operacions que es poden dur a terme amb el ratolí.

Per veure el funcionament del programa, obrirem un arxiu .pdb. Per això, a la finestra de la interfície gràfica, seleccionam "File/Open". S'obre una finestra de navegació d'arxius i anam a la carpeta on es troben els arxius de pràctiques del curs. Obrim l'arxiu `exemple_amina.pdb`. A la finestra de visualització ens surt l' estructura d' aquesta molècula:



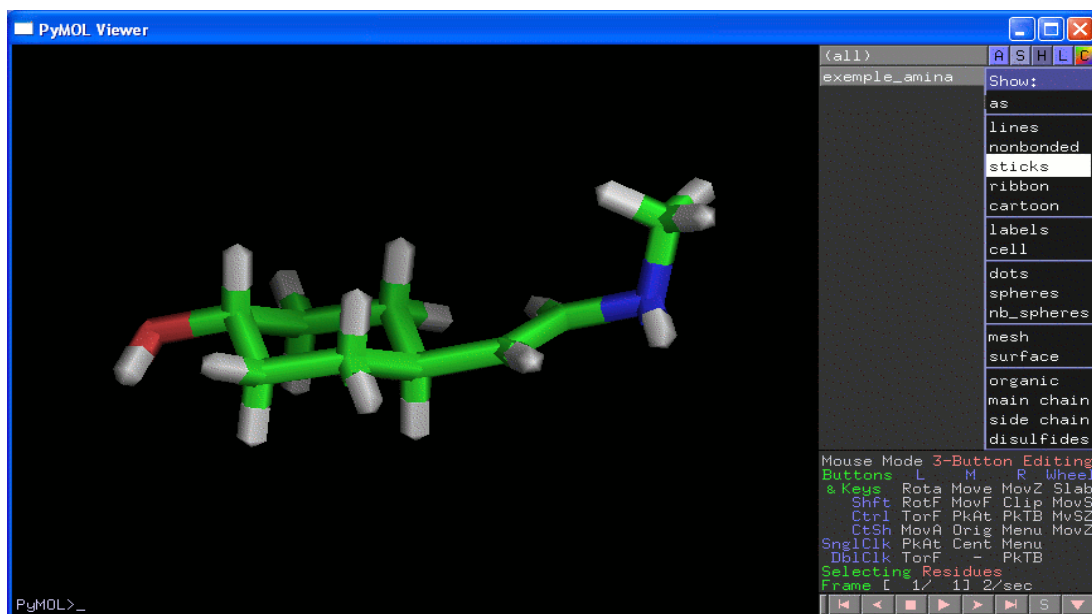
Quan s'ha obert un arxiu d'estructura tridimensional d'una molècula, a la part superior dreta es troba una línia amb l'etiqueta de la molècula (exemple_amina) i els botons A, S, H, L i C. En fer clic sobre cada un d'aquests botons es despleguen un seguit d'opcions de visualització que afecten a la molècula en conjunt, o bé sobre un àtom o uns àtoms en particular si abans han estat seleccionats. Veurem primer les operacions de visualització que afecten a tota la molècula i, de totes les possibles que permet el programa, les més bàsiques. El botó **A** correspon a procediments automatitzats ("Actions"), el **S** és el menú de mostra ("Show"), **H** és el menú per ocultar ("Hyde"), **L** el menú d'etiquetes ("Label") i **C** el menú de codis de color ("C"). Com veurem, hi ha moltes opcions, encara que la majoria només es troben habilitades per arxius .pdb d'estructures de proteïnes que contenen informació adicional sobre estructures secundàries.

La molècula ens apareix com a estructura de línies, en la qual cada vèrtex o terminació és un àtom diferenciat. El codi de color per a aquesta estructura (que es pot canviar a l'àrea de menú "C/Color:By element") és el verd per a àtoms de C, vermell per a O, blanc per a H i blau per al N. Aquest conveni per representar l'estructura és el que comporta menys càrrega de la capacitat gràfica de l'ordinador i el recomanat per a l'operació bàsica de visualització. Aquesta es porta a terme amb les funcions del ratolí que es troben al quadre inferior dreta. Les funcions són per a un ratolí estàndard de dos botons i rodeta central que actua com a botó d'enmig.

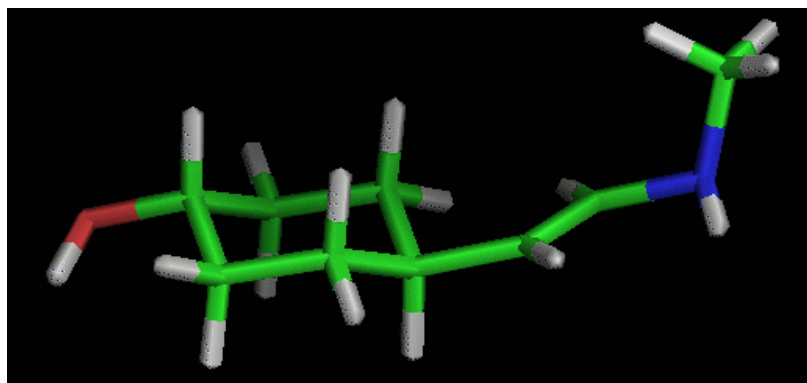
Mouse Mode 3-Button Viewing				
Buttons	L	M	R	Wheel
& Keys	Rota	Move	MovZ	Slab
Shift	+Box	-Box	Clip	MovS
Ctrl	+/-	PkAt	Pk1	MvSZ
CtSh	Sele	Orig	Menu	MovZ
SnglClk	+/-	Cent	Menu	
DblClk	Menu	-	PkAt	

- Per rotar la molècula ("Rota" en el resum de funcions del ratolí), mantenint pres el botó esquerre del ratolí ("L") i movent-lo. Notarem que, per proporcionar un efecte de profunditat, l'estructura de la molècula que es troba en primer pla es troba més il·luminada que la que es troba al fons. Aquest efecte d'il·luminació el podem modificar movent la roda del ratolí ("Slab").
- Moure la molècula en l'àrea de visualització ho fem mantenint pitjat el botó central del ratolí (la rodeta en la configuració d'exemple) i movent el ratolí a una nova posició.
- L'efecte de "zoom" ho aconseguim amb el botó dret del ratolí pitjat i movent-lo cap a dalt per ampliar i cap avall per obtenir l'efecte contrari.

La resta d'operacions modifiquen l'estructura (disposició dels àtoms, angles d'enllaç i de torsió) i les esmentarem més endavant. Un cop tenim l'estructura ben orientada, amb la mida adient a la finestra de visualització i correctament situada, podem modificar el seu aspecte i generar, al final, una imatge amb alta resolució. Per mostrar l'estructura en forma de "pals" ("sticks"), anam a les opcions de visualització "S" i, al menú que es desplega, escollim "sticks". Ens apareix, llavors:

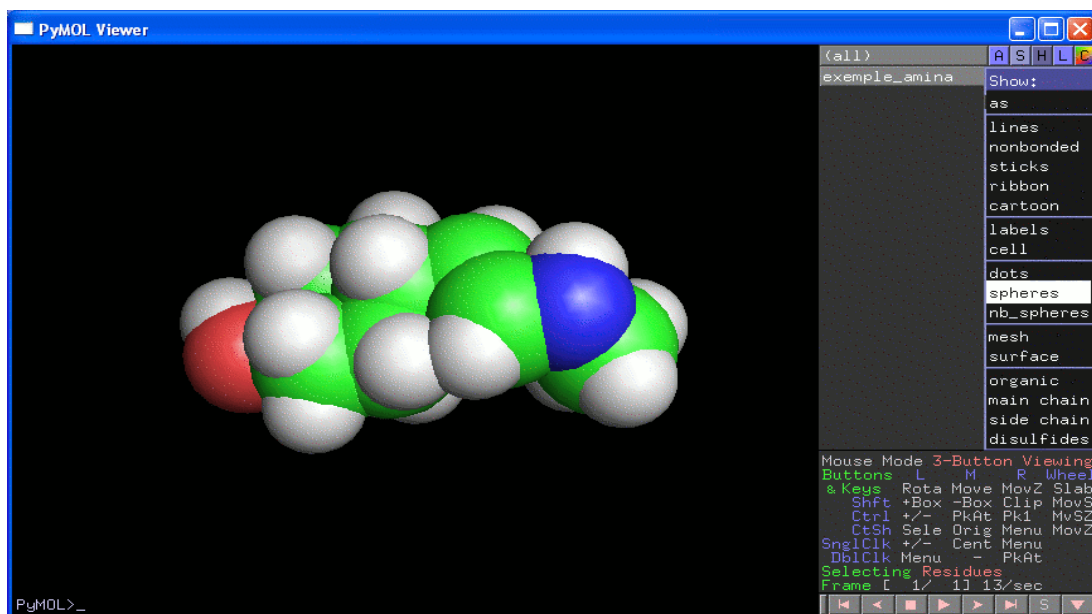


Els formats de visualització són completament configurables. Per exemple, per disminuir el gruix dels “pals” a aquesta estructura, a la finestra de la interfície gràfica seleccionam “Setting/Edit All”. Ens trobam un llistat alfabètic de totes les definicions de format dels objectes que pot reproduir el programa. Seleccionam l'opció “Stick radius”, que té per defecte el valor 0,250, fem clic a “Edit” i a la finestra d'edició, proporcionam un nou valor per al radi del pal (per exemple 0,150, després de la qual cosa fem clic a “Set”. A la finestra del llistat d'opcions fem clic a “Done” i la mateixa estructura tindrà el següent aspecte, amb els pals més fins:

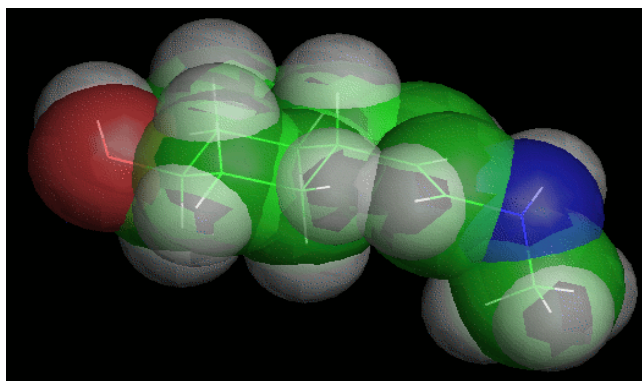


L'estructura amb aquest conveni de visualització encara es pot rotar, moure o modificar l'ampliació amb les funcions del ratolí que hem comentat més amunt. No obstant això, aquesta operació pot ésser lenta si les capacitats gràfiques de l'ordinador són limitades. En funció d'aquestes capacitats, és necessari, arribats al punt en què anirem millorant la visualització de l'estructura, ajustar la qualitat de les imatges que s'obtenen. Això s'aconsegueix seleccionant, a la barra de menú de la finestra de la interfície de l'usuari, “Display/Quality”. Les quatre opcions van de “Maximum performance” (amb una qualitat gràfica a nivell d'esborrany) fins a “Maximum quality” (amb imatges de qualitat fotogràfica). Evidentment, a més qualitat de la imatge, més esforç computacional requereix el maneig de les estructures. A la secció de la barra de menú “Display” s'estableixen les característiques generals de visualització. L'extensió i propòsit d'aquest tutorial no permeten veure-les totes, però la seva funció s'explica amb el mateix nom i recomanem que les aneu provant. A partir d'aquest punt, les imatges que apareixen pels exemples successius estan realitzades amb l'opció de qualitat de “Maximum quality”.

Un altre conveni de visualització de models d'estructures és el de “bolles” o esferes (“spheres”). Aquestes esferes engloben cada un dels àtoms de l'estructura i les seves dimensions són proporcionals als radis atòmics. Per mostrar les esferes, a les opcions de visualització de l'objecte, escollim “S/spheres”, el resultat és quelcom semblant a:

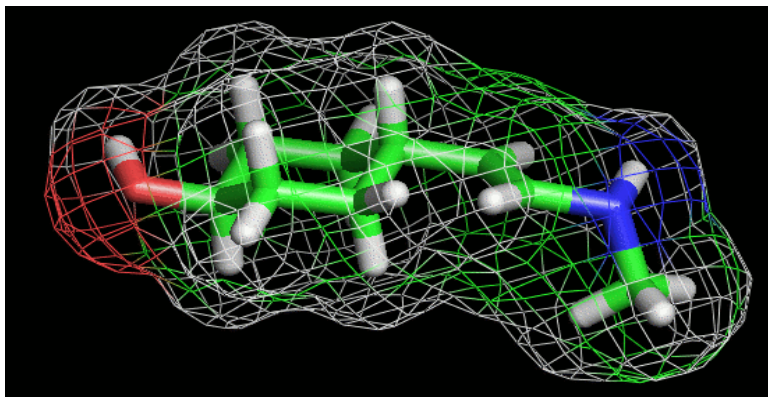


Aquesta vista dóna una bona idea dels impediments estèrics i del volum molecular, però es perd la visió de l' esquelet de l' estructura. Podem millorar la informació que proporciona la imatge si definim les bolles com a transparents. Per això, a la interfície de l'usuari, seleccionam a la barra de menús "Setting/Transparency/Spheres/40%". Amb això hem seleccionat un 80% de transparència, de forma que ens permetrà veure l' estructura de línies "interna":

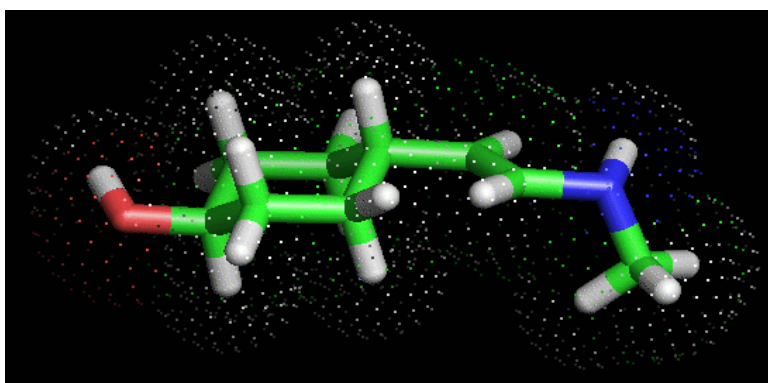


La qualitat de la transparència depèn de les capacitats gràfiques de l' ordinador.

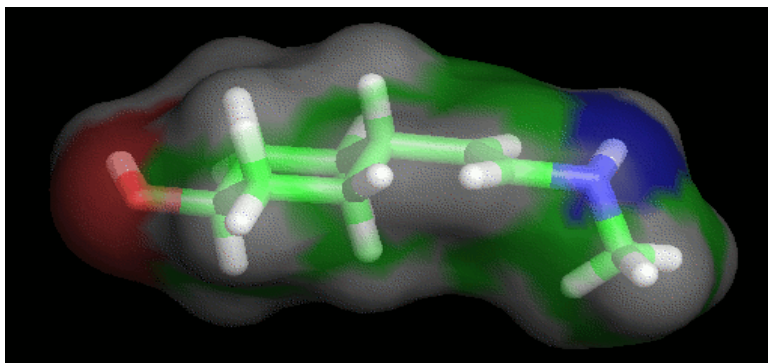
El volum de la molècula i la disponibilitat dels possibles grups funcionals es pot avaluar mitjançant una graella ("mesh") que té dimensions proporcionals als radis de van der Waals de cada àtom. Això s'escull amb l'opció de visualització "S/mesh". Si a més, s'escull la visualització de l'estructura com a "stick" s'obtenen imatges similars a:



Un efecte similar s' obté escollint un recobriment de punts ("dots") ("S/dots"):

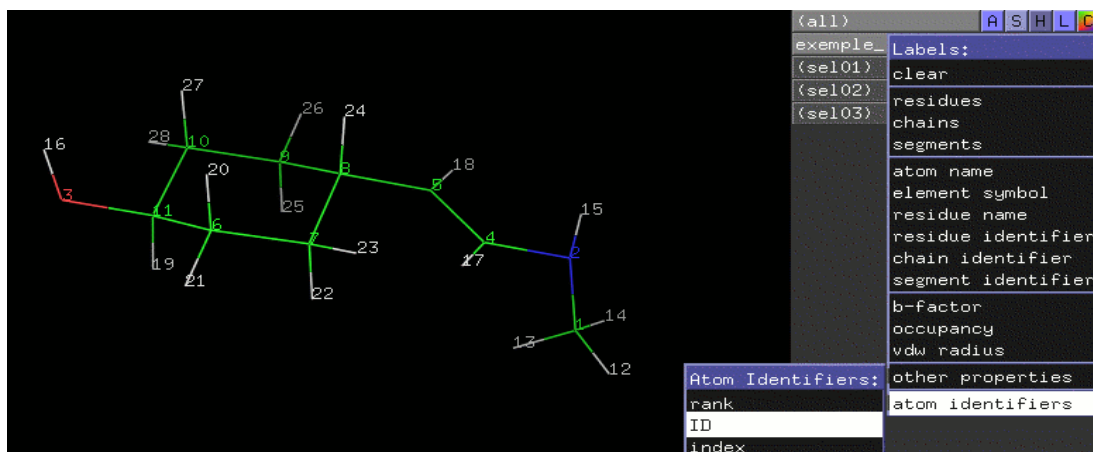


Si les capacitats gràfiques de la màquina ho permeten, es pot afegir una superfície ("S/Surface"), a la qual es pot definir un efecte de transparència ("Setting/Transparency/Surface/40%"). S'obtenen imatges com:



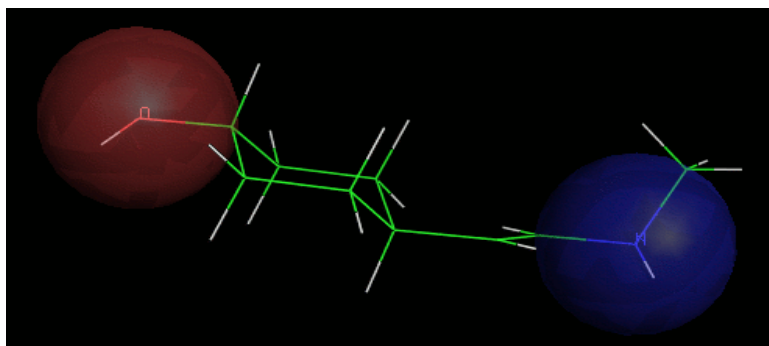
L'addició de superfícies a les estructures afavoreix la identificació dels punts de la molècula amb caràcter polar/apolar i proporciona indicacions per raonar sobre la seva reaccionabilitat i la interacció amb dissolvents.

A aquestes imatges es poden afegir etiquetes, com l'element i el número d'ordre dels àtoms. Per exemple, per afegir la numeració a tots els àtoms de l'estructura, a les opcions de visualització seleccionam "L" i a la finestra "Labels/atom identifiers/ID". Vora cada àtom apareixerà el nombre assignat a cada àtom segons la numeració de l'arxiu .pdb. Cal notar que aquesta numeració no és la de la nomenclatura de molècules orgàniques, sinó que es llegeix directament de l'arxiu. Per tal de tenir l'estructura amb la numeració IUPAC, cal reordenar les línies de la definició dels àtoms en el mateix fitxer .pdb. El resultat d'aplicar etiquetes només és visualment acceptable per a l'estructura en forma de línies o per als pals ("stick") si aquests són d'un radi inferior a 0,100. Per a l'exemple que estam treballant obtendriem quelcom semblant a:



Per ocultar les etiquetes, a les opcions de visualització de l'objecte seleccionem "H" (menú per a ocultar) i a la llista disponible fem clic a "labels"

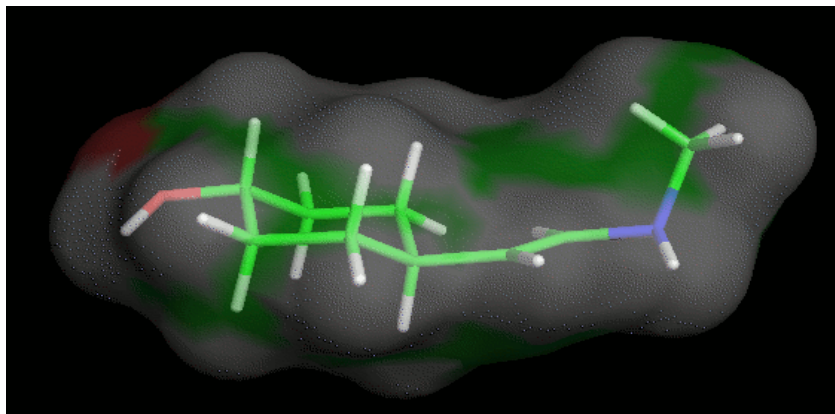
Qualsevol de les opcions de visualització i assignació d'etiquetes pot aplicar-se a un sol àtom de l'estructura. Això s'aconsegueix fent clic amb el botó de la dreta del ratolí sobre un àtom en particular. Apareix, llavors un menú desplegable en el qual es poden seleccionar les opcions, les quals s'aplicaran només a aquest àtom en particular. Aquesta operació es pot repetir per a tots els àtoms que puguin ésser d'interès, encara que cal tenir en compte que si els àtoms es troben pròxims (hi estaran per a qualsevol molècula petita) la definició de visualització s'estendrà per a tota l'estructura, és a dir, podrem crear una graella o una superfície en torn d'un sol àtom, però probablement si escollim un segon àtom la graella o superfície apareixerà per gairebé tota l'estructura. Per exemple, si a l'anterior estructura volem destacar cada un dels heteroàtoms, fem clic amb el botó de la dreta sobre l'oxigen (àtom 7), i seleccionem "atom/Show/sphere". Repetim, llavors, la mateixa operació per al nitrogen (àtom 2). Podem, a més afegir un efecte de transparència a cada esfera i una etiqueta (com l'element) amb la mateixa tècnica: fer clic amb el botó de la dreta sobre l'àtom, i al menú desplegable seleccionem "atom/Show/label/ID". El resultat és:



Exportació de la finestra de visualització com a imatge.

A diferència d'altres aplicacions que només generen una captura de pantalla de la finestra de visualització, pymol porta incorporat un motor de generació d'imatges d'alta resolució PovRay. Aquest generador crea efectes d'il·luminació i ombreig, la qual cosa permet obtenir imatges de qualitat fotogràfica que es poden desar en format .png. Per obtenir la imatge PovRay de l'àrea de visualització, al quadre de botons de la finestra de la interfície gràfica seleccionem el botó "Ray". A l'àrea de visualització apareix una barra de progrés i, en funció de la capacitat de l'ordinador, apareix la imatge d'alta resolució a la pantalla de l'ordinador. Per desar la imatge, a la barra de menús de la interfície de l'usuari, seleccionem "File/Save as image".

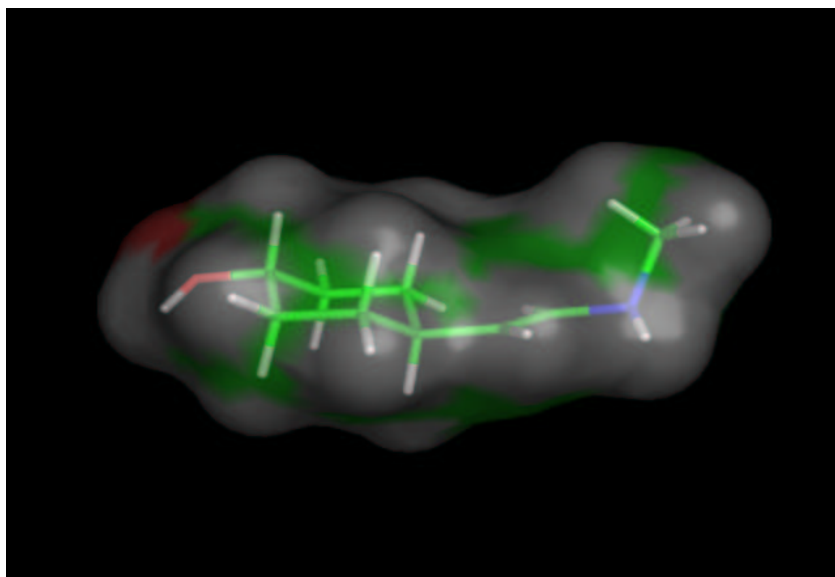
Vegem el següent exemple de diferència de qualitat d'imatges. Per a la imatge de l'àrea de visualització (amb l'opció de "Display/Quality/Maximum performance") obtenim:



Fem clic al botó “Ray” de l' àrea de botons de la interfície gràfica:



El resultat és la següent. Aquesta imatge és la inserció del fitxer .png obtingut de la generació PovRay de la finestra de visualització anterior:



Activitat d'entrega obligada 5

Visualització d'una molècula amb PyMOL i exportació de la seva imatge.

Cercau a la Internet l'arxiu pdb d'una de les següents molècules: vainilina, cafeïna, AZT (el primer medicament per a malalts de la SIDA), tetrahidrocannabinol. Obriu els arxius amb el PyMOL i genereu una imatge que incorpori una graella o una superfície. Desau-la com a arxiu gràfic .png amb el nom **molecula3D**. Enviau aquest fitxer a la tutoria. Comunicau a la tutoria l'enviament, juntament amb un comentari sobre aquesta eina.

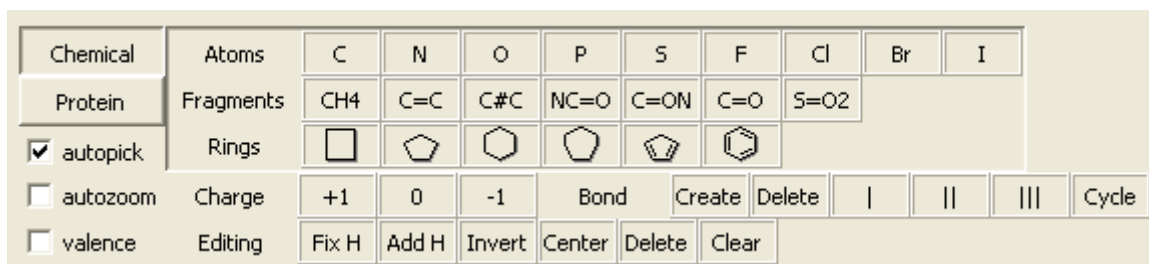
Ús del mode “Builder”


Per a estructures senzilles, la versió 0.98 de PyMOL incorpora un mòdul de construcció de molècules en tres dimensions que reproduïx, en la virtualitat, el mateix procediment de treball que es porta a terme per construir models moleculars “reals”.

S' accedeix al mòdul fent clic al botó “Builder” de l' àrea de botons de la interfície gràfica del programa:




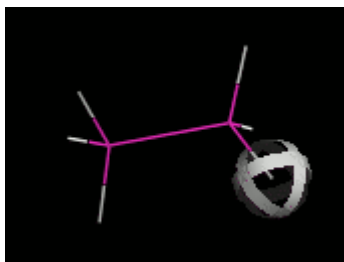
L'àrea d'històric dels comandaments desapareix i ens surt una àrea de botons per a la construcció d' estructures tridimensionals. Als efectes d' aquest tutorial, el treball el realitzarem amb la secció “Chemical”:




Per partir de zero, cal introduir un fragment a partir del qual anirem construint la molècula. Suposem que ens interessa construir el 1,2-dicloroetà per poder veure l'efecte d'una conformació alternada i eclipsada. Començam amb la incorporació del fragment CH₄ a l'àrea de visualització. Fem clic sobre el botó  i ens apareix:

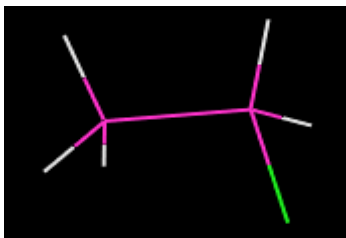


L'esfera centrada en l'hidrogen és la posició en la qual podem intervenir amb el següent comandament del quadre de botons de construcció de molècules. Així, si fem clic a alguns dels botons de la fila “Atoms” el resultat serà substituir l'hidrogen per un l'àtom seleccionat, mentre que si fem clic a un dels botons de la fila “Fragments” introduïrem el grup en aquesta posició. Com que volem construir l'età, el més lògic és inserir un nou fragment CH₄ en aquest punt. Tornam fer clic al botó  i ens trobam amb l'età, amb una nova posició d' inserció:



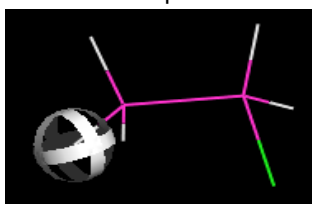
Arribats a aquest punt, per construir el 1,2-diclorometà hem de substituir dos dels hidrògens per dos àtoms de clor. Per això, amb el mateix punt d'inserció a sobre d'un hidrogen, fem clic al botó corresponent a


l'element clor  a la fila "Atom". Per eliminar el punt d'inserció fem clic a qualsevol posició de l'àrea de visualització o la combinació Ctrl+botó de la dreta del ratolí. L' 1-cloroetà és, llavors:

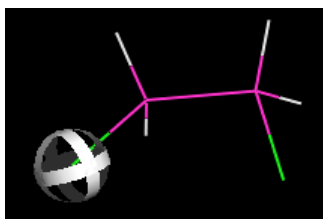


Per canviar un segon àtom d'hidrogen per clor, cal definir el punt d'inserció. Per això fem un clic amb el botó de l'esquerra sobre l'àtom que volem substituir i repetim (qualsevol hidrogen del grup metil) i repetim la seqüència d'operacions anterior:

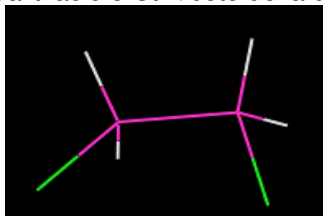
1. Clic amb el botó de l'esquerra per introduir un nou punt d'inserció:



2. Clic al botó de l'element Cl a la fila de botons "Atoms" de la interfície gràfica . Apareix:



3. Clic a qualsevol lloc de l'àrea de visualització o Ctrl+botó de la dreta:




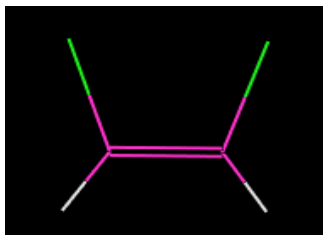
Un cop finalitzada la construcció de la molècula, fem clic al botó "Builder" de l'àrea de botons de la dreta de la interfície gràfica per tornar al mode de visualització. Arribats a aquest punt, podem decidir canviar l'etiqueta de la molècula (que apareix com a "methane", atès que ha estat aquest el primer fragment que hem introduït per construir-la. Per canviar l'etiqueta, anam al menú d'accions de visualització "A" i escollim "rename object". A l'àrea de visualització ens apareix un diàleg per fer el canvi d'etiqueta. Desam, llavors, la molècula que hem construït com a arxiu .pdb. A la barra de menú escollim "File/Save molecule", confirmam l'objecte que volem desar i li proporcionam un nom d'arxiu. Com podem veure, el format per defecte escollit és el .pdb.

En el mode "Builder", el canvi d'ordre d'enllaç (passar d'enllaç senzill a doble i a triple) s'aconsegueix, sobre una estructura, assenyalant els dos àtoms implicats i, llavors, fer clic al botó corresponent del bloc "Bond". Per exemple, per modificar el 1,2-dicloroetà que tot just hem construït en 1,2-dicloroetà, fem el següent. Obrim la molècula d'1,2-dicloroetà i passam al mode "Builder". Seleccionam, llavors els dos àtoms de carboni fent un clic amb el botó de l'esquerra sobre cada un d'ells. Apareixeran marcats de la següent forma:

L'esfera de l'esquerra (formada per traços simples) és el primer àtom seleccionat (el programa l'identifica com a pk1) i el segon (amb traços



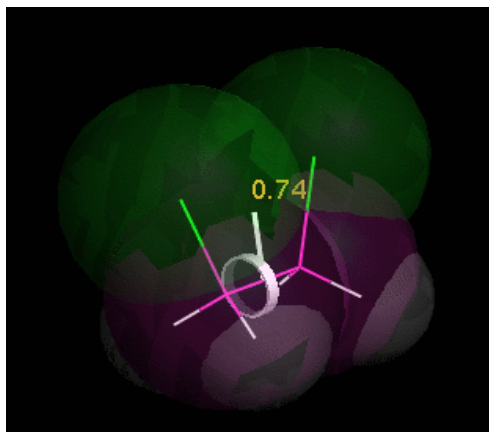
dobles) és el segon àtom seleccionat (pk2). Ara, a la secció de botons "Bond", fem clic a la definició d'enllaç doble: . El resultat és:



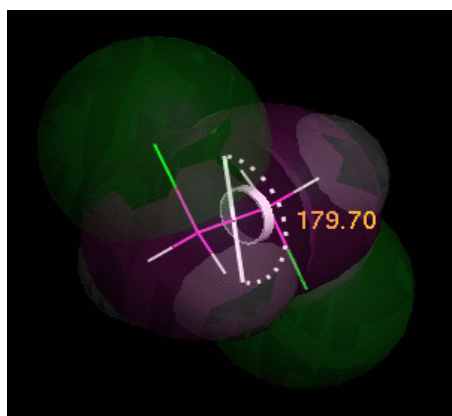
Nota: perquè la representació de línies mostri el doble enllaç, cal que a la barra de menús "Display/Show valences" estigui activada.

Manipulació d' estructures

La geometria de les estructures que es construeixen amb el mòdul "Builder" es fonamenten amb mides estàndard de distàncies i angles d'enllaç. Sense haver de modificar aquests paràmetres de forma arbitrària, el programa permet l'estudi dels efectes de la rotació lliure en torn d'un enllaç (torsió o modificació de l'angle diedre). La molècula que tot just hem construït és especialment adient i correspon a l'exemple de la diferència entre conformació eclipsada i alternada. Per valorar millor l'efecte de repulsió dels dos àtoms de clor, escollim la visualització de les esferes i les dotam amb un 80% de transparència. Llavors, amb la tecla Ctrl pitjada, fem clic amb el botó de l' esquerra del ratolí a l' enllaç C-C. Ens apareix el següent:

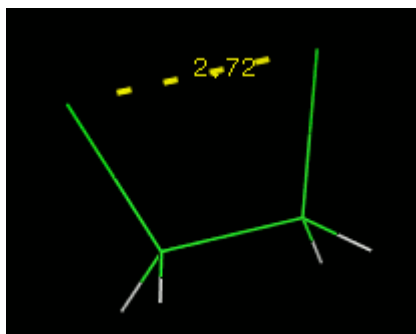


L'angle de $0,74^\circ$ és l'angle diedre format entre els plans Cl-C-C i C-C-Cl i correspon a la conformació eclipsada de la molècula. El mode de visualització de les esferes ens mostra la zona de contacte entre els dos àtoms, la repulsió electrostàtica dels quals comporta una conformació més energètica i, per tant, més inestable. Si mantenim la tecla Ctrl presa i el botó de l'esquerre del ratolí també espitjat i movem el ratolí en sentit vertical, realitzam una rotació lliure en torn de l'enllaç, la qual queda reflectida en el valor de l'enllaç. La conformació alternada ens proporciona la següent imatge:



La disposició dels dos àtoms de clor, que es pot veure amb l'esfera transparent, és la que permet una energia potencial electrostàtica de repulsió menor i, per tant, una conformació més estable.

A més dels angles de torsió o de rotació lliure el programa incorpora un mòdul de mida de distàncies. S'hi accedeix, en mode de visualització, a la barra de menú "Wizard/Measurement". A l'àrea de visualització apareix el missatge "Please click on the first atom". Feu clic sobre l'àtom origen, que quedarà marcat amb un petit rectangle. Per al segon missatge "Please click on the second atom" feu clic a l'àtom final. Apareix, llavors, la distància entre els dos àtoms. Aquesta etiqueta és un objecte més del qual es pot modificar el color, ocultar o mostrar la línia o el valor. Per a la conformació eclipsada del 1,2-dicloroetà veurem:



En aquest punt la interfície ens permet d'introduir un nou mesurament. Si volem sortir del mòdul, fem clic al botó "Done" ("fet").

El programa té moltes més capacitats i, pel fet d'estar dissenyat per executar "scripts" o guions, el grau de sofisticació és considerable. Per veure una mostra d'aquestes funcionalitats, vegeu els guions de demostració que trobareu a la barra de menús "Wizard/demo". Per últim, vos recomanem que obriu un arxiu .pdb d'una proteïna o una macromolècula i experimenteu amb les eines de visualització que hem comentat.



Activitat opcional 5

Construcció d' una molècula amb PyMOL

Construïu la molècula d'àcid cloroacètic i desau-la com a arxiu .pdb. Modificau, llavors, la rotació en torn de l'enllaç C-C i valoreu l'estabilitat relativa dels confòrmers. Podeu incorporar mesures de distàncies interatòmiques. Exportau la imatge de cada un dels confòrmers a format .png.

3.4 Formulació inorgànica.

La formulació inorgànica presenta, especialment durant la seva introducció a 2n, 3r i 4t d'ESO, moltes dificultats procedimentals. Per això, farem una ullada a un programa d'ajuda a la formulació editat per la Junta de Andalusia, que es pot descarregar gratuïtament, permet una certa configuració i disposa d'opcions per al seguiment del treball de l' alumnat.

El programa és pot descarregar de la pàgina

http://www.juntadeandalucia.es/averroes/recursos_informaticos/programas/quimica_1.php3. Es tracta d'un programa fet amb Visual Basic 6, associat a una base de dades d'Access i a uns fitxers rtf editables. El programa és en castellà, però es poden modificar els fitxers associats i traduir tant les explicacions com els noms d' elements i composts.

El programa disposa de teoria, d'exercicis, d'una taula periòdica, permet crear usuaris, editar exàmens, modificar les dades químiques... També es pot descarregar un manual d' ús.

Un cop instal·lat el programa, dins la carpeta d'instal·lació *Quimica* hi trobam els fitxers rtf associats. Dins una carpeta *Common* que s'ha creat dins C:, hi trobam la base de dades *Registros.mdb*. Des del menú d'administrador del mateix programa podem manipular les dades químiques. Si disposam de l'Acces, ho podem fer obrint la base de dades i canviant els continguts de les taules. La taula *Elemento* conté informació sobre els elements del sistema periòdic; la taula *Formula* conté composts i els seus noms... També podem

obrir els fitxers rtf i provar d'editar-los. Els canvis que haguem fet s'han de veure reflectits quan tornem a obrir el programa.



Activitat d'introducció 6 Pràctiques de formulació inorgànica

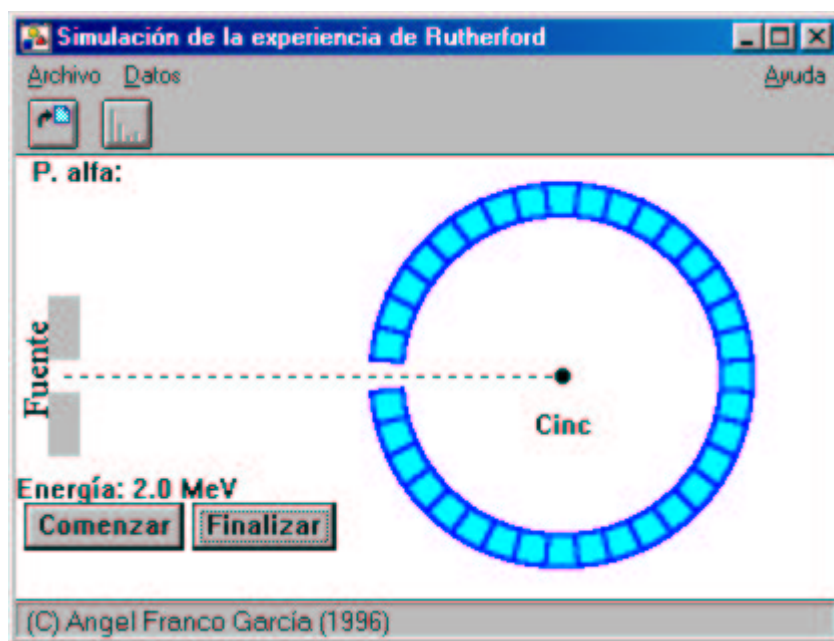
Instal·la el programa de formulació a partir del fitxer comprimit. Obriu-lo i explora les diferents opcions del menú. Cerca alguns dels fitxers auxiliars del programa i comprova com el podeu editar.

Elabora un comentari sobre les possibilitats que veis en l'ús d'aquest programa, en la conveniència d'adaptar-lo... i envia-lo a la tutoria.

3.5 Programari de Física

Per a treballar l'àrea de Física no disposam de programes que abastin temes o procediments generals. Existeixen moltíssims petits programes, executables des d'Internet i fins i tot descarregables, cadascun dels quals per treballar algun aspecte molt concret i que ens poden ajudar a fer més entenedors nombrosos conceptes i procediments. Un exemple és el conjunt de programes fets per Àngel Franco que es poden descarregar de la pàgina: http://www.sc.ehu.es/sbweb/fisica/Introduccion/descarga/descarga_curso.htm. Alguns poden ser indicats per a la física de 2n de batxillerat. Cadascun permet visualitzar i interactuar (com si es tractés d'applets de Java) algun fenomen físic. En general són de nivell elevat, bastants poden ser útils dins la física de 2n de batxillerat i algun fins i tot a nivells inferiors.

Cada programa disposa d'una ajuda que conté els aspectes teòrics del fenomen analitzat i les instruccions per poder-lo visualitzar.

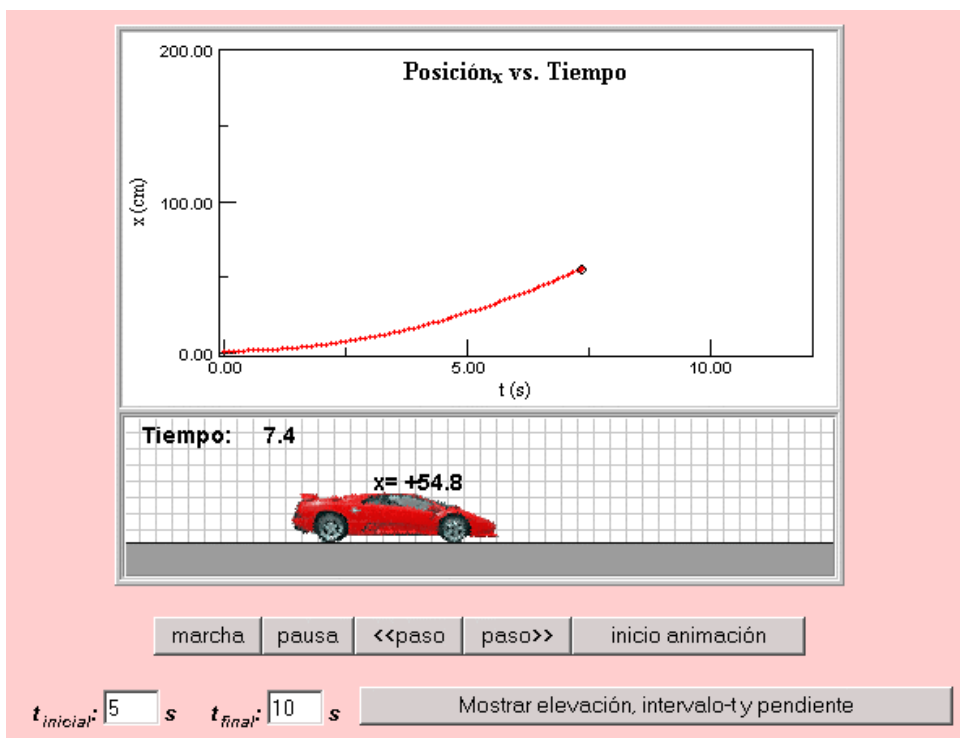


Un altre exemple és el projecte de creació de "Fislets", un projecte molt ambiciós de creació d'applets configurables, del qual podeu trobar informació a <http://fem.um.es/Fislets/CD/index.html>. En general, el seu nivell no és per ESO, però se'n poden trobar alguns que sí ho són. El projecte es diferencia de la simple creació d'applets en què aquests s'executen dins una seqüència d'explicacions o de resolució de problemes que els donen més consistència. Podeu trobar una referència a aquest projecte a la Revista de Física editada per l'IEC en el primer número del 2005.



Activitat d'introducció 7 Visualització d'experiments de física

Accediu a la pàgina dels fislets i provau de seguir el desenvolupament d'algun tema o d' alguna seqüència de resolució de problemes.



4 LA FÍSICA I LA QUÍMICA A INTERNET

Internet és, sens dubte, una font gairebé inesgotable d'informació. El gran volum de pàgines que conté de qualsevol tema, constitueix a la vegada un obstacle a l'hora de treure'n profit. Per a la visualització correcta de les pàgines cal tenir ben configurat el navegador perquè pugui obrir la gran varietat de fitxers que hi podem trobar (flash, java, 3D...). De cara a l'ús directe d'Internet amb l'alumnat, sorgeix una altra dificultat relacionada amb la forma de programar l'accés a les diferents pàgines per part de l'alumnat i també de fer-ne un seguiment.

En aquest mòdul abordarem aquests problemes per trobar les solucions més adients i poder treure el màxim profit de la xarxa. Practicarem les estratègies de recerca en petits grups, per tal d'optimitzar-les. També comentarem la possibilitat de crear nosaltres mateixos petits espais web per suplir mancances. Veurem quins complements del navegador convé tenir instal·lats i com funcionen i també comentarem la possibilitat d'emprar entorns virtuals d'aprenentatge per tal d'estructurar seqüencialment l'accés a les pàgines, controlar-ne el seu ús i poder fer un seguiment dels avenços de l'alumnat.

4.1 Configuració del navegador: plug-ins

Com ja hem vist anteriorment, a Internet podem trobar models tridimensionals de molècules. Si tenim instal·lats els plug-ins adequats, el mateix navegador ens podrà mostrar aquestes imatges tridimensionals i

fins i tot podrem interaccionar amb elles, girant-les, augmentant-les... Un d'aquests plug-ins és el CosmoPlayer, que es pot descarregar gratuïtament de la pàgina <http://ovrt.nist.gov/cosmo/> També el teniu dins els arxius del curs. Si l'installeu al nostre ordinador, podrem visualitzar fitxers en format wrml.



Activitat d'introducció 8 Visualització de molècules

Installeu el plug-in CosmoPlayer (està dins els materials del curs). Accediu a la pàgina <http://www.ill.fr/dif/3D-crystals/salt.html> Aquesta pàgina conté enllaços a distintes estructures cristal·logràfiques. Si feu clic sobre els enllaços, accedireu a la seva visualització amb una sèrie de controls interactius:



el zoom: arrossegant per amunt, acostar la visió i arrossegant per avall la fent enfora



el control de rotació: permet girar en 3D les imatges



aquest control permet moure les imatges



el punter permet acostar-se a un àtom fent-hi clic al damunt



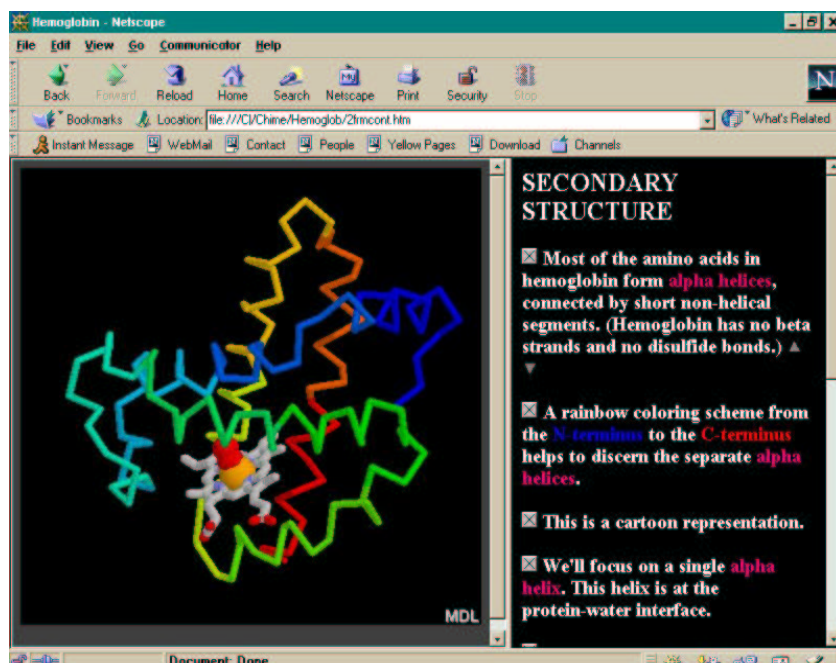
aquest control permet desfer la darrera operació



amb aquest botó s'accedeix a altres controls

Obriu diferents estructures i provau els controls que ofereix el plug-in.

L'altre plug-in, Chime, és un programa propietari de la companyia Elsevier MDL Information Technologies (<http://www.mdl.com/products/framework/chime/>) que es distribueix de forma gratuïta després d'enregistrar-vos. Es tracta d'un "plugin" que funciona dins els navegadors MS Internet Explorer i Mozilla (Windows) i MS Internet Explorer, Mozilla i Opera (McIntosh). Aquest plugin està basat en el RasMol, un veterà programa de visualització de molècules en 3D.



La instal·lació d'aquest plugin a l'ordinador proporciona al navegador web la possibilitat de reconèixer arxius **.pdb** inserits com a objectes a la pàgina web (amb la directiva *embed src*) de forma que en la visualització de la pàgina web les molècules es poden rotar, ampliar, reduir o editar de forma molt bàsica amb les funcions que presenta la barra de menú que es desplega en fer clic al botó de la dreta del ratolí. El plugin admet l'execució de guions o "scripts" basats en els comandaments del programa RasMol. Un exemple de com s'insereix un arxiu .pdb en el codi font d'una pàgina web és el següent:

```
<embed src="nom_arxiu_molecula.pdb" width=250 height=250 spinfps=25
startspin=true name="chimeimage" frank=false script="zoom 100; rotate;" spiny=35
color3d=cpk display3d="ball&stick" bgcolor="#ffffff"
pluginspage="http://www.mdlchime.com/products/framework/chime/index.jsp"
alt="Chime image." zoom=100></embed>
```

En aquest exemple, després dels modificadors de la finestra (width i height), s'inclouen tot un seguit de comandaments de RasMol en forma de guió (les opcions que segueixen a script= entre cometes).

El plugin Chime és una eina que permet dissenyar pàgines web amb molècules manipulables. A la Internet es troben molts llocs web que requereixen un navegador que porti aquest plugin instal·lat i on es poden apreciar les característiques estructurals de les molècules que es descriuen si el navegador porta aquest script.



Activitat d'introducció 9 Visualització de molècules amb Chime

Instal·la el plug-in Chime. Accedeix a la pàgina
<http://jchemed.chem.wisc.edu/JCEWWW/Features/MonthlyMolecules/index.html>.

Selecciona una de les seccions i manipula les molècules que es descriuen.

4.2 Estratègies de recerca

En aquest apartat practicarem diverses estratègies de recerca entre tots i, al mateix temps, elaborarem una guia de pàgines interessants, comentades i classificades segons temari, nivell educatiu... Aquesta guia tindrà una vigència limitada: les pàgines canvien, n'apareixen de noves, també en desapareixen. Així i tot, pot ser una primera passa per a futures col·laboracions en aquest sentit.

Si no es té un cert domini de la navegació i recerca dins Internet, dins els materials de formació a distància hi ha un tutorial de recerca dins Internet (dins el curs d'aprofundiment a les TIC) que pot ser una bona ajuda per començar.

La recerca es pot fer mitjançant cercadors temàtics o cercadors per paraules clau o amb la combinació de tots dos. En els primers, les pàgines estan organitzades en temes generals que donen accés a temes cada cop més concrets. Dins aquesta categoria hi tenim per exemple, Yahoo (www.yahoo.es) que combina també la recerca per paraules clau. Els cercadors per paraules clau, localitzen les pàgines a partir de les paraules que entren dins els seus camps de recerca. Dins aquesta categoria, un dels millors cercadors és el Google (www.google.com) que disposa d'una recerca avançada amb moltes opcions, entre elles l'idioma.

Les recerques dins una àrea específica, també es poden fer a partir de portals temàtics. Per exemple, www.chemedia.com és un portal llatinoamericà especialitzat en ciència que combina la recerca temàtica amb la recerca per paraules clau.



Activitat d'introducció 10

Recerca a Internet

Provau de cercar informació sobre algun tema per comprovar els problemes que sorgeixen. El tema que ens interessa pot ser, per exemple, **Química orgànica**, i més concretament exercicis de formulació. Per això, amb el Google, analitzarem el resultat de diferents opcions de recerca.

Accediu a la pàgina del Google i entrau dins el camp de recerca "organic chemistry", sense posar cap altra restricció. Comprovau com el nombre de pàgines localitzades supera àmpliament el mig milió.

Provau ara d'entrar "quimica organica" (sense accents), "química orgánica", "química orgànica" en tres recerques diferents i comparau el nombre de pàgines ofert i la seva adaptació a l'idioma en què heu entrat les paraules clau i a la seva ortografia.

Manteniu "química orgànica" i seleccioneu l'opció "*recerca en català*". Comprovau com l'adaptació a l'idioma és ara millor.

Accediu ara a la "*recerca avançada*" i, amb la mateixa entrada i idioma, escriviu, dins l'opció "*sense les paraules*", "departament" o "plans d'estudi". Comprovau com es redueix el nombre de pàgines localitzades. (Observau com en el camp de recerca s'han afegit aquestes paraules amb un signe menys al davant)

Afegiu ara al camp de recerca "formulació" i "exercicis", sense més restriccions que l'idioma: "català". Torna a comprovar el resultat de la recerca.

Feis la mateixa recerca amb Altavista, www.altavista.com o amb Yahoo i compareu els resultats amb els obtinguts amb el Google.

Per organitzar la feina de recerca, ens dividirem en grups. Cada grup haurà de cercar i consensuar un conjunt d'adreces relacionades amb un tema. Les estratègies de recerca emprades i les adreces localitzades s'hauran de penjar al fòrum.

Els grups es crearan a partir de les preferències sobre el tema que enviareu a la tutoria i de la coincidència temporal en el moment de començar aquest mòdul. Els temes estaran penjats al fòrum a partir d'aquest moment



Activitat d'introducció 11

Enviau un correu a la tutoria indicant, per ordre de prioritats, quins són els temes que vos interessin més per treballar en grup.

Aviat rebreu la notificació del grup al qual heu estat assignat i del tema que heu de treballar. A partir d'aquest moment s'obrirà un fòrum privat per a cada grup. La primera feina del grup serà anomenar un coordinador. El coordinador ho comunicarà a la tutoria per correu. A continuació, el grup s'ha d'organitzar per poder dur a terme la recerca i l'anàlisi de les pàgines que tinguin relació amb el seu tema.



Activitat d'entrega obligada 6 Aportacions al fòrum privat

En rebre l'avís d'obertura del vostre fòrum privat, podeu començar, a partir de les indicacions del coordinador del grup, a aportar les vostres experiències en la recerca del tema i els comentaris de les pàgines més interessants que hagueu localitzat. Podeu també comentar les aportacions d'altres membres del vostre grup. L'objectiu és consensuar les "top 10" del tema que vos ha tocat, i posar en comú les estratègies de recerca que heu utilitzat. Un cop consensuades les pàgines (han d'estar classificades i comentades d'acord amb uns ítems semblants als següents), i les estratègies, el coordinador del grup les ha d'inserir al fòrum general, perquè siguin accessibles per a tothom. És important que es faci constar quins cercadors s'han utilitzat, quines entrades...

Adreça	Idioma	Temes que inclou	Nivell a què va adreçat	Interactivitat	Comentari

4.3 Estructuració i programació dels accessos a Internet: Els entorns virtuals d'aprenentatge

Quan es planifica l'ús d'activitats a través d'Internet, un dels problemes que es presenten és la forma d'accedir seqüencialment a les diferents pàgines per tal de treure'n el màxim d'aprofitament. Aquest apartat només pretén reflexionar sobre la importància de plantejar correctament aquest ús.

- En el millor dels casos, pot passar que trobem un conjunt de pàgines que formin un bloc ben estructurat i que s'adapti al tema, al nivell i a la seqüenciació que volem. Per exemple, si accedim a alguna de les pàgines del projecte Newton, com la dedicada a calor, veurem que disposa d'una estructura organitzada que facilita la seqüenciació de feines.

<http://newton.cnice.mecd.es/4eso/calor/calor-indice.htm>

- Podem trobar bastants conjunts de pàgines estructurats, però no sempre la seva estructura o el seu nivell s'adapten a la nostra programació. En aquest cas, podem optar, com a solució simple, per crear una pàgina web (podria ser un simple document de text) que tenguim els hiperenllaços a les pàgines a visitar, amb un petit guió que orienti l'alumnat sobre com ha de treballar amb cadascuna de les pàgines. Aquesta pàgina es pot col·locar dins el servidor de la xarxa a una unitat accessible per part de l'alumnat (o a Internet dins l'espai web del centre, enllaçada des de la pàgina del departament) i fer que sigui la pàgina d'inici per encetar el tema. En aquesta mateixa línia, però amb un poc més d'elaboració, es troben els webquests, unes eines per treballar la recerca guiada per Internet. Al Webib, podem trobar un curs a distància per aprendre a dissenyar-ne

<http://weib.caib.es/Formacio/distancia/Material/webquest/guia.htm>

Podem veure un exemple, fruit d'aquest curs, a la pàgina:

http://weib.caib.es/Recursos/enlace_quimico_webquest/inici.htm

A la xarxa, existeix moltíssima informació sobre les webquests. A les anteriors pàgines, hi podeu trobar enllaços.

- Si el treball que volem fer per Internet és més ambiciós, volem controlar millor l'accés de l'alumnat, incloure activitats i poder-les avaluar i fins i tot poder fer el seguiment, podem recórrer a algun entorn virtual d'aprenentatge. A més a més d'alguns portals educatius que ens permeten crear els nostres cursos, existeix la possibilitat d'emprar entorns de formació com el Moodle, amb el qual estam duent a terme aquest mateix curs.

El Moodle ha suposat tota una revolució en el camp de l'ensenyament virtual. Per començar és un programari de codi obert, per tant gratuït. Està traduït a moltes llengües, entre elles el català. Disposa de moltíssimes eines i opcions i està en contínua millora. Moltes administracions educatives (encara no és el cas de la nostra) ofereixen allotjament per als cursos en Moodle per a tot el professorat interessat en dissenyar-ne. Moltes universitats han adoptat aquest entorn per a l'ensenyament a distància. Sembla, idò, que la tendència va en aquesta direcció.

Podeu trobar informació sobre el Moodle a <http://moodle.org/>. Vos hi podeu registrar, podeu descarregar i instal·lar el programa (necessita un servidor web tipus Apache amb suport per Php i MySql), crear els vostres cursos, els grups d' alumnes...

**Activitat opcional 6****L' ús d' Internet per a l' ensenyament de la Física i la Química**

Enviau a la tutoria la vostra opinió sobre les diferents possibilitats d'ús d'Internet amb l'alumnat de la nostra àrea.