

## DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÁNICA

Tutorial sobre [CheMagic Virtual Molecular Model Kit](#)  
Herramienta Web de modelado molecular, de la Illinois State University (USA)  
<https://chemagic.org/molecules/amini.html#>

Juan Gil Rubio

Este sitio permite trabajar con modelos 3D de moléculas orgánicas e inorgánicas de tamaño pequeño o medio. Las moléculas se pueden construir desde cero o bien importar modelos ya existentes desde bases de datos (ficheros mol, PDB, CIF, etc.) o desde el ordenador del propio usuario. Permite calcular algunas propiedades moleculares (dependiendo del formato de fichero del modelo) y buscar datos experimentales de la molécula en bases de datos de la web.

La herramienta contiene un gran número de funciones y, en muchas de ellas aparece una breve explicación de su uso. También contiene tutoriales (a los que se puede acceder pinchando en el botón [Help/Actions](#)) y una presentación de diapositivas que explica los pasos más básicos, que se puede ver pinchando en [Show Help Slides](#) en la parte superior de la pantalla.

A continuación, veremos lo necesario para poder empezar a utilizar la herramienta, y haremos un breve repaso de las funciones más importantes.

La pantalla inicial que encontramos es la siguiente:

The screenshot shows the CheMagic Virtual Molecular Model Kit interface. At the top, it states: "The CheMagic Virtual Molecular Model Kit (Vmol) is powered by JSmol, JSME, PubChem, and NIH/NCI CIR". Below this, there are three main panels:

- Atom and Bond Edit:** A grid of buttons for selecting atoms (H, B, C, Si, N, P, O, S, F, Cl, Xx, inv) and bond types (Q+, Q-, redo, undo). It also includes buttons for bond orders (Single, Double, Triple) and styles (Xatm, Xbnd, Xmol, Wire, Ball, Space, sp, sp2, sp3).
- Load Models:** Buttons for "Name" and "Draw", and "CheMagic" and "File".
- Other Model Actions:** A grid of buttons for various actions: Charge, Dipole-Net, vdW, MO, Correct H, Dipoles, Energy, MEP, CIF Symop, Optimize, Model Zoom +, Model Zoom -, Length, Angle, Torsion, Mark - Stereo, Mass, Calculator, Rotate Bond, Move, Duplicate, Compare, Put Share, Get Share, Share ID, FB Share URL, Save Mod, Restore Mod, Review Mods, Save PNG, NIST Google, NIST Direct, SDBS Google, Google, PubChem, NMRDB, Wikipedia, Activity Menu, Get Identifiers, Get Model File, Jmol Console, Local Storage, Help/Actions, Stereo On/Off, Add/Erase Text, Clear/Reset, Home, Info-Email.

At the bottom, there is a navigation bar with "Send a Comment" and "Start New Model" buttons, and a zoom control bar with "Tablet Browser Zoom Info" and buttons for -2, -1, 0, +1, +2.

Podemos importar un modelo de varias maneras, que aparecen en [Load Models](#):

- Name.** Escribimos el nombre de la molécula y ésta se carga desde alguna de las bases de datos que aparecen. El modelo aparece a continuación en la ventana.

The CheMagic Virtual Molecular Model Kit (Vmols) is powered by JSmol, JSME, PubChem, and NIH/NCI CIR

**CheMagic Model Kit: Load Model from Data Sources**

Enter:

A name to load from PubChem (e.g. aspirin)  
 An ID to load from Protein Data Bank (e.g. 1smd)  
 An ID to load from COD database (e.g. 1000118)  
 \$SMILES, \$InChI, or \$InChIkey to Load from CIR (e.g. \$C=CC)

The entire model window can be optimized and reloaded by using the Optimize CIR links L(large), M(medium), or S(small). This optimization also orders multi-molecular windows diagonally.

Check this box to append model to model(s) already in window.

aspirin

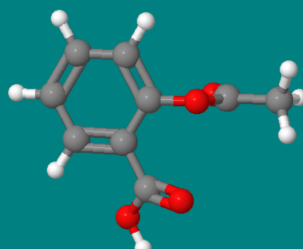
Cancel OK

Atom and Bond Edit: H, B, C, N, P, O, F, Cl, Xx, Q+, Q-, redo, Single, Double, Triple, Xatm, Xbnd, Xmol, Wire, Ball, Space, sp, sp2, sp3, Load Models, Other Model Actions, Send a Comment, Start New Model, CIR Reload L M S ?

The CheMagic Virtual Molecular Model Kit (Vmols) is powered by JSmol, JSME, PubChem, and NIH/NCI CIR

H	B	C	Si
N	P	O	S
F	Cl	Xx	inv
Q+	Q-	redo	undo
Single	Double	Triple	
Xatm	Xbnd	Xmol	
Wire	Ball	Space	
sp	sp2	sp3	

Show Help Slides



Model Zoom +	Model Zoom -
Length	Angle
Torsion	Mark - Stereo
Mass	Calculator
Rotate Bond	Move
Duplicate	Compare
Put Share	Get Share
Share ID	FB Share URL
Save Mod	Restore Mod
Review Mods	Save PNG
NIST Google	NIST Direct
SDBS Google	Google
PubChem	NMRDB
Wikipedia	Activity Menu
Get Identifiers	Get Model File
Jmol Console	Local Storage
Help/Actions	Stereo On/Off
Add/Erase Text	Clear/Reset
Home	Info-E-mail

Send a Comment | Start New Model

CIR Reload L M S ? Tablet Browser Zoom Info -2 -1 0 +1 +2


- b) **Draw**. Dibujamos la molécula y pulsamos en Load para que se cargue en el visor de modelos. Si pinchamos en **Append** la molécula dibujada aparece junto con la que ya existía en el visor.

Screenshot Enlargement = 1.0 (Scale button rotates 7 values with 1.0 or 1.2 best for editing)

Turn Reaction Mode On PubChem Query URLs & Reload Options Clean Structure Editor Help

NEW X R Z Undo Redo X Rotate FG

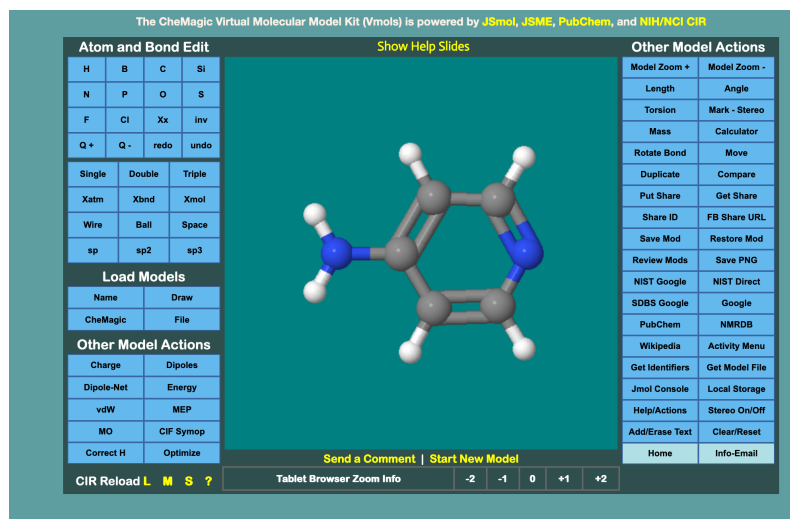
C N O S F Cl Br I P X



H2N

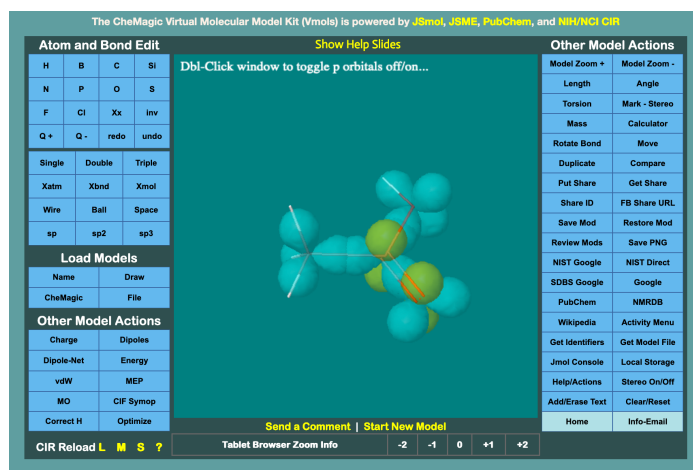
Draw a structure or structures to load in the model window.

Load Model	Append Model	Model to Draw	Put Share	Get Share
Save Draw	Restore Draw	Review Draw	Scale	Close Editor



- c) **CheMagic**. Nos permite cargar modelos de una lista larga de modelos ya existentes en la misma página web, entre los que hay plantillas, ficheros Spartan, ficheros CIF tutoriales de la CSD, y otros.
- d) **File**. Podemos cargar un fichero desde nuestro ordenador, por ejemplo, un fichero CIF.

**Herramientas Atom and Bond Edit**. Permiten construir un modelo en el mismo visor o editar un modelo ya existente. En esta misma ventana podemos cambiar el **tipo de visualización (Wire, Ball, Space)**, o **visualizar los orbitales híbridos de los átomos de la molécula (sp, sp<sup>2</sup>, sp<sup>3</sup>)**. Por ejemplo, en la molécula de ácido acético se muestran los híbridos sp<sup>2</sup> y los orbitales p<sub>π</sub>.



**Other Model Actions** (izquierda, abajo). Pinchando en los botones podemos visualizar:

- Las cargas sobre cada átomo.
- Los momentos dipolares.
- El momento dipolar neto de la molécula.
- La energía de la molécula.
- La superficie de Van der Waals.

- El mapa de potencial electrostático (**MEP**).
- El HOMO y el LUMO (**MO**).

**CIR Reload** vuelve a cargar el modelo que tenemos en pantalla, optimizándolo (para ver más detalles sobre la optimización, pulsar en **?**).

En **Other Model Actions** (derecha, arriba), tenemos las siguientes opciones:

- Aumentar o disminuir el tamaño del modelo.
- **Medir distancias o ángulos de enlace (Length/Angle)**. Para esto hay que hacer clic en dos (distancias) o tres átomos (ángulos) consecutivamente. En **Torsion**, podemos medir ángulos de torsión definiendo cuatro átomos de la misma manera.

- Calcular el peso o la fórmula molecular (**Mass/Calculator**).
- Rotar enlaces (**Rotate Bond**) o mover la molécula o alguno de sus átomos (**Move**).
- Duplicar la molécula (**Duplicate**).
- **Comparar dos modelos** (mol files) situados en pantalla (**Compare**).

The CheMagic Virtual Molecular Model Kit (Vmol) is powered by JSmol, JSMI, PubChem, and NIH/NCI CIR

**Atom and Bond Edit**

H	B	C	Si
N	P	O	S
F	Cl	Xx	Inv
Q +	Q -	redo	undo

Single Double Triple  
Xatm Xbnd Xmol  
Wire Ball Space  
sp sp2 sp3

**Load Models**

Name	Draw
CheMagic	File

**Other Model Actions**

Charge	Dipoles
Dipole-Net	Energy
vdW	MEP
MO	CIF Symp
Correct H	Optimize

These models do not have the same molecular formula!

**Other Model Actions**

Model Zoom +	Model Zoom -
Length	Angle
Torsion	Mark - Stereo
Mass	Calculator
Rotate Bond	Move
Duplicate	Compare
Put Share	Get Share
Share ID	FB Share URL
Save Mod	Restore Mod
Review Mods	Save PNG
NIST Google	NIST Direct
SDBS Google	Google
PubChem	NMRDB
Wikipedia	Activity Menu
Get Identifiers	Get Model File
Jmol Console	Local Storage
Help/Actions	Stereo On/Off
Add/Erase Text	Clear/Reset
Home	Info-Email

Send a Comment | Start New Model

CIR Reload L M S ? Tablet Browser Zoom Info -2 -1 0 +1 +2

- **Compartir el modelo** con otros usuarios (opciones de tipo **Share**; para más información ver en texto que aparece al pinchar cada opción).
- **Grabar el modelo** en la memoria persistente del propio visor o recuperar un modelo previamente grabado (**Save/Restore Mod**).
- **Exportar una imagen** del modelo tal como aparece en el visor en formato .PNG (**Save PNG**).
- Obtener **propiedades** (químicas, físicas, espectros, ...) del compuesto que tenemos en el visor desde bases de datos o buscadores como NIST, SDBS, Google, NMRDB, o Wikipedia.

**NIST** NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY U.S. DEPARTMENT OF COMMERCE **Libro del Web de Química del NIST**

Home Búsquedas ▼ Datos de NIST ▼ Sobre ▼

## Acetic acid

- **Fórmula:** C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub>
- **Peso molecular:** 60.0520
- **IUPAC InChI Estándar:** InChI=1S/C2H4O2/c1-2(3)/h1H3,(H,3,4) InChI v 1.06
- **IUPAC InChIKey Estándar:** QTBSBXVTEAMEQ0-UHFFFAOYSA-N
- **Número de registro CAS:** 64-19-7
- **Estructura química:**



Esta estructura está también disponible como [2d Mol file](#) o como [computed 3d SD file](#).

- **Isoánálogos:**
  - [Acetic acid-d4](#)
- **Otros nombres:** Ethanoic acid; Ethylic acid; Glacial acetic acid; Methanecarboxylic acid; Vine Azijnzuur; Essigsaeure; Octowy kwas; Acetic acid, glacial; Kyselina octova; UN 2789; Aci-jel; SF
- **Información en esta página:**
  - [Notes](#)
- **Otros datos disponibles:**
  - [Datos de fase gaseosa](#)
  - [Datos de fase condensada](#)
  - [Datos de cambio de fase](#)
  - [Datos termodinámicos de reacción: reactions 1 to 50, reactions 51 to 79](#)
  - [Datos del ley de Henry](#)
  - [Datos de energética de iones on fase gaseosa](#)
  - [Datos de agregados iónicos](#)
  - [Espectro de IR](#)
  - [Espectro de masa \(ionización del electrón\)](#)
  - [Espectro de UV/Visible](#)

- En el botón **Activity Menu**, se encuentran links a otras actividades o páginas web de los mismos autores de CheMagic.

Tablet View Resize Info    -2   -1   0   +1   +2

## Liberal Arts Chemistry

**Essay, Video, & Activity Pages**

This page is the index to a CheMagic work in progress. The CheMagic authors managed the Liberal Arts Chemistry course at Illinois State University for more than two decades. The links below lead to essays, videos, and model kit activities that represent our attempt to translate the pedagogic spirit of the book into useful contemporary chemistry teaching resources.

Demo Videos (DV) and Home Lab Activities (HL)	Topic Essays (ES) and Model Kit Activities (MK)
<a href="#">The Fun of Mixing-HL</a>	<a href="#">The Math of Basic Chemistry-ES</a>
<a href="#">Acid Base Indicators-HL</a>	<a href="#">A Molecule We Never Made-MK</a>
<a href="#">Chemical vs Physical Change-HL</a>	<a href="#">A Molecule That Changed Pharma-MK</a>
<a href="#">Generation of Pure Oxygen-HL</a>	<a href="#">Molecules with a Nice Smell-MK</a>
<a href="#">Analysis of Vitamin C-HL</a>	<a href="#">Molecule That Likes to Explode-MK</a>
<a href="#">Experiments with a Penny-HL</a>	<a href="#">Chemistry Double Speak-MK</a>
<a href="#">Heat of Melting of Ice-HL</a>	
<a href="#">Static Electricity-HL</a>	
<a href="#">Electrolysis-HL</a>	
<a href="#">Gold Penny-HL</a>	
<a href="#">Measurement of O<sub>2</sub> in Air-HL</a>	
<a href="#">Sympathy for the Alchemist-DV</a>	
<a href="#">Combustion in Oxygen-DV</a>	
<a href="#">pH Indicators-DV</a>	

CheMagic is Otis Rothenberger & Jim Webb, Illinois State University

- En **Identifiers** podemos ver los identificadores químicos del compuesto que tenemos en el visor.

The CheMagic Virtual Molecular Model Kit (Vmoljs) is powered by JSmol, JSME, PubChem, and NIH/NCI CIR

### CheMagic Model Kit: Chemical Identifiers

The SMILES URL can be copied to reload this model. Id's not in PubChem are marked **Not Found**. The spreadsheet tab-delimited data (**scroll down**) is in the following order: IUPAC | InChI | InChIKey | Non-sterio SMILES | PubChem CID | Jmol Stereo SMILES | Molecular Formula | Molecular Mass.

```

StereoSMILES: CC(O)=O
NoStereoSMILES: CC(O)=O
Name: acetic acid
StdInChI: 1S/C2H4O2/c1-2(3)/h1H3,(H,3,4)
InChIKey: QTBSBXVTEAMEQO-UHFFFAOYSA-N
Molecular Formula: H 4 C 2 O 2
Molecular Mass: 60.05

JME File: 5 4 C 0.537 1.5 C 1.4 1 O 2.27 1.5 O 1.4 0 H 2.81 1.19 1 2 1 2 3 1 2 4 2 3 5 1

```

[Open the NCI/CADD Resolver list of model names in new window.](#)

OK

- **Get Model File** descarga un fichero del modelo en formato Spartan.
- **Help/Actions** nos permite modificar el aspecto del modelo (color del fondo, formato de los átomos, etc.) y también ver varios **tutoriales** para aprender el manejo del visor 3D.
- **Stereo On/Off** activa la visualización en 3D, para lo que se necesitan unas gafas con un cristal rojo y otro azul.
- **Add/Erase Text** nos permite añadir texto a la ventana del visor (por ejemplo, comentarios).