

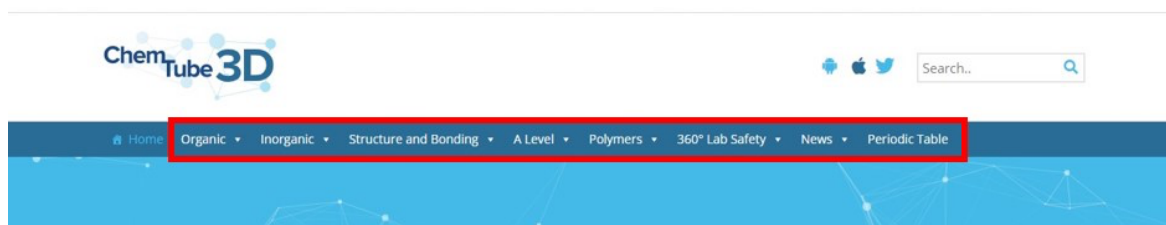
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÁNICA

Tutorial sobre [ChemTube3D](https://Chemtube3d.com)
(Animaciones interactivas de química en 3D-University of Liverpool)
<https://Chemtube3d.com>

Consolación Vicente López

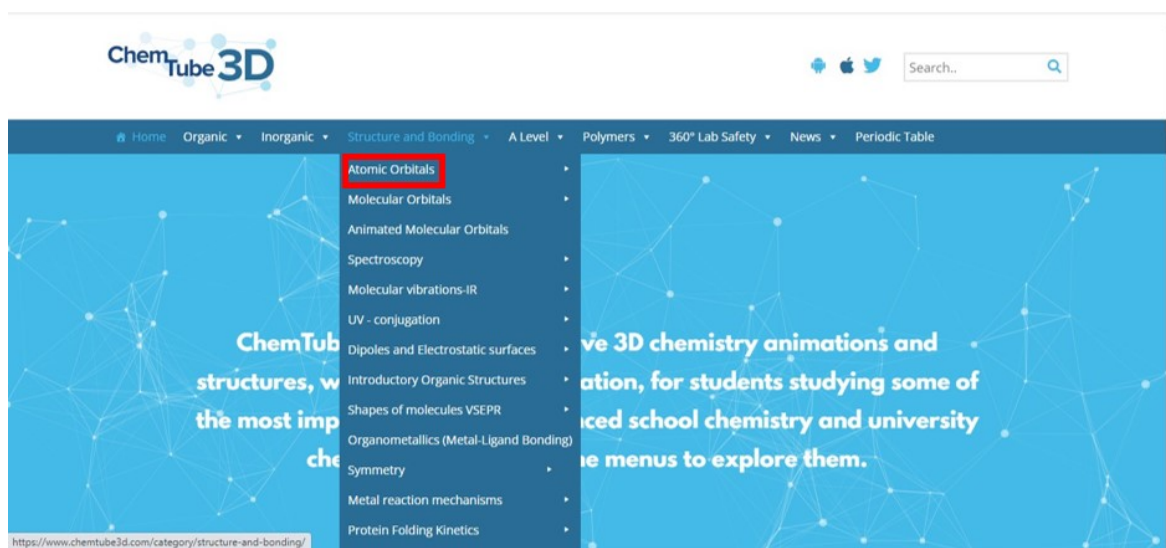
ChemTube3D contiene animaciones y estructuras interactivas de química en 3D, con información de apoyo, para los alumnos que estudian algunos de los temas más importantes de los cursos de química avanzada.

En la página principal se nos ofrece la posibilidad de explorar hasta 7 menús diferentes: Organic, Inorganic, Structure and bonding, A level, Polymers, 360° Lab. Safety and Periodic Table.



Dentro de cada menú hay un desplegable que nos permite explorar los diferentes contenidos que están a nuestra disposición. Nos centraremos en el menú **Structure and Bonding** a modo de ejemplo.

Al abrir este menú nos encontramos con el siguiente desplegable donde podemos explorar diferentes contenidos. A modo de ejemplo, seleccionaremos **Atomic Orbitals**, donde podemos navegar por su contenido.



Este contenido incluye s-orbitals, p-orbitals, 3p-orbitals, 3d-orbitals, 4f-orbitals y Compare shape and size of 1s, 2s and 2p orbitals.

En nuestro ejemplo se ha seleccionado la opción **s-orbitals**. Al hacer clic en esta opción se abre una nueva pantalla.

En la parte derecha podemos ver la ilustración de la forma de los orbitales 1s, 2s y 3s y en la parte inferior la distribución de la probabilidad electrónica en este tipo de orbitales. La selección, en nuestro caso, de la distribución de probabilidad electrónica de un orbital 2s, permite visualizar en la parte izquierda de la pantalla la selección realizada en 3D.

Dentro de la sección **Molecular Orbitals**, podemos navegar por sus diferentes contenidos. A modo de ejemplo, escogeremos, de las múltiples opciones, el NH_3 .

The screenshot shows the ChemTube3D website interface. The navigation menu is open, showing 'Structure and Bonding' as the selected category. Under this category, 'Molecular Orbitals' is highlighted with a red box. A sub-menu is displayed, listing various molecules, with 'Ammonia' highlighted by another red box. The 'Top Rated Pages' section on the right lists several pages with star ratings and titles.

Al hacer clic sobre la opción **Ammonia** se abre una nueva pantalla.

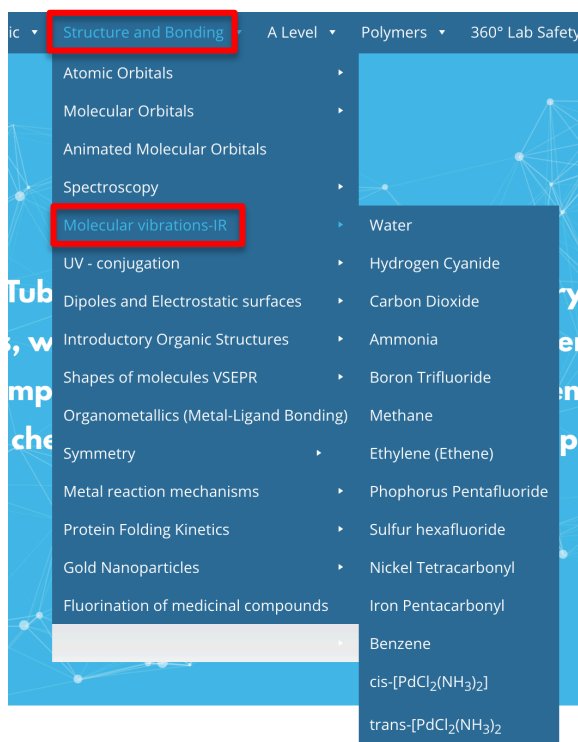
The screenshot displays the 'Bonding orbitals in Ammonia - sp^3 hybrids' page. On the left, a 3D ball-and-stick model of ammonia (NH_3) is shown with a coordinate system (x, y, z). On the right, an energy level diagram illustrates the formation of sp^3 hybrid orbitals from one 2s and three 2p orbitals of a nitrogen atom. The diagram shows the energy levels for the ground state N atom, the resulting sp^3 hybrid orbitals, and the lone pair orbital. A text box explains that each N-H σ -bonding orbital is formed from a nitrogen sp^3 hybrid orbital and a hydrogen 1s orbital, while the lone pair occupies the fourth tetrahedral position. Below the diagram, there are links to explore bonding orbitals in other small molecules like Hydrogen, Fluorine, Nitrogen, Hydrogen Fluoride, Carbon Monoxide, Methane, Acetylene, Ethylene, and Ethyne.

En la zona derecha, se explica la formación de orbitales híbridos sp^3 para el átomo de N y en la parte de la izquierda de la pantalla se muestra una visualización 3D de la molécula NH_3 .

La aplicación nos permite también visualizar en 3D los orbitales de los átomos (disponibles en el menú de la izquierda, debajo de la figura). A modo de ejemplo hemos seleccionado la visualización 3D de los tres orbitales híbridos sp^3 y el par solitario del átomo de N, señalados en rojo en el menú.

The screenshot shows the 3D orbital visualization interface. On the left, a 3D model of the ammonia molecule is displayed with its orbitals. On the right, a control panel contains several buttons: 'Reload Ball and Stick', 'Load wireframe', 'Load sp^3 ', 'Load sp^3 ', 'Load sp^3 ', 'Load lone pair', and 'Load H 1s'. The buttons 'Load sp^3 ' and 'Load lone pair' are highlighted with a red box.

Otra posibilidad que ofrece el recurso es la identificación de los modos normales de vibración de algunas moléculas sencillas. Para ello, en el menú principal seleccionamos **Structure and Bonding** y luego **Molecular vibrations-IR**.



En el menú desplegable se nos presentan algunas moléculas sencillas. Seleccionamos, por ejemplo, el agua (**Water**), y vamos a una nueva pantalla. Si seleccionamos **Click to show vibration frequency list**, aparece una pequeña ventana con un menú desplegable.

Vibrations of Water

Adjust the appearance of the molecule and the vectors corresponding to the movements using the check boxes to optimise the view.

Advanced – The symmetry for each vibration is also shown.

- Show all vibrations
- vibration
- vectors
- color vectors yellow color vectors purple
- spacefill off spacefill 20% spacefill 100%

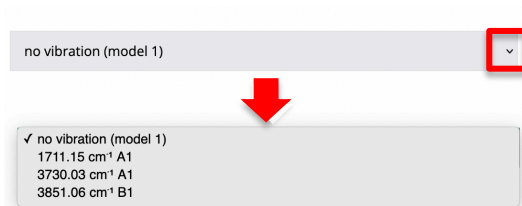
3N-5 frequencies for linear systems of N atoms
3N-6 frequencies for non-linear systems of N atoms

Other molecules to explore

[Hydrogen Cyanide](#) | [Carbon Dioxide](#) | [Water](#) | [Ammonia](#) | [Boron Trifluoride](#) | [Methane](#) | [Ethylene\(Ethene\)](#) | [PF₅](#) | [Fe\(CO\)₅](#) | [Benzene](#)

★★★★★ 4.4(7)

[Click to show vibration frequency list](#)



En ese menú aparecen las frecuencias de los modos normales de vibración de la molécula y su simetría. Podemos elegir uno de los modos normales de vibración y aparecerá con animación en la ventana.

Adjust the appearance of the molecule and the vectors corresponding to the movements using the check boxes to optimise the view.
Advanced - The symmetry for each vibration is also shown.

- Show all vibrations
- vibration
- vectors
- color vectors yellow color vectors purple
- spacefill off spacefill 20% spacefill 100%

3N-5 frequencies for linear systems of N atoms
3N-6 frequencies for non-linear systems of N atoms

Other molecules to explore

[Hydrogen Cyanide](#) | [Carbon Dioxide](#) | [Water](#) | [Ammonia](#) | [Boron Trifluoride](#) | [Methane](#) | [Ethylene\(Ethene\)](#) | [PF₅](#) | [Fe\(CO\)₅](#) | [Benzene](#)

ORGANIC CHEMISTRY
73

★★★★★ 4.4(7)

1711.15 cm⁻¹ A1

How useful was this page?