

Jmol para enseñar y aprender química

Jmol per ensenyar i aprendre química

Jmol for teaching and learning chemistry

Angel Herráez / Universidad de Alcalá. Departamento de Biología de Sistemas

Robert M. Hanson / St. Olaf College. Departamento de Química (Northfield, Minnesota, EUA)



resumen

Se revisa el uso de Jmol en visualización molecular para la enseñanza y el aprendizaje de la química, tanto en forma de programa Java (Jmol) como de aplicación HTML5 incluida en páginas web (JSmol). Se presentan en este artículo dieciséis sitios web destacados de entre los cientos que utilizan la versión de JSmol sin Java.

palabras clave

Jmol, estructura molecular, visualización, modelos tridimensionales, interactivo.

resum

Es revisa l'ús de Jmol en visualització molecular per a l'ensenyament i l'aprenentatge de la química, tant en forma de programa Java (Jmol) com d'aplicació HTML5 inclosa en pàgines web (JSmol). Es presenten en aquest article setze llocs web destacats entre els centenars que utilitzen la versió de JSmol sense Java.

paraules clau

Jmol, estructura molecular, visualització, models tridimensionals, interactiu.

abstract

The use of the Jmol molecular visualization in chemical education is reviewed, both as a stand-alone Java application (Jmol) and as a web-based HTML5 application (JSmol). Sixteen among the hundreds of web sites utilizing the non-Java version of JSmol are presented in this article.

keywords

Jmol, molecular structure, visualization, three-dimensional models, interactive.

Introducción

Jmol es un proyecto comunitario de código abierto para la visualización y el análisis interactivos de la estructura de moléculas («Jmol», 2016), en una amplia diversidad de disciplinas científicas y educativas que incluyen todas las ramas de la química, desde la química general a la inorgánica, orgánica, fisicoquímica y bioquímica. Se usa, asimismo, en áreas interdisciplinarias

tales como la ciencia de materiales y la biofísica. Programado inicialmente en lenguaje Java, hoy Jmol se desarrolla activamente utilizando una técnica que permite generar en paralelo una versión Java y otra JavaScript. De este modo, Jmol está disponible como programa o aplicación Java autónoma (*Jmol.jar*), como miniaplicación Java (*JmolApplet.jar*), que sigue siendo útil para usos especializados dentro de

Jmol es un proyecto comunitario de código abierto para la visualización y el análisis interactivos de la estructura de moléculas

una página web) y como aplicación HTML5 en páginas web (JSmol), tremendamente popular y compatible igualmente con

dispositivos táctiles como las tabletas. Como mérito adicional, la interfaz de Jmol/JSmol está disponible en veintidós idiomas, incluidos inglés, español, catalán y vasco, y automáticamente detecta y adopta el idioma que tenga el sistema del usuario.

Los datos de uso de JSmol demuestran su fuerte implantación en la red: más de cien mil usuarios al mes acceden a más de veinte mil páginas web que lo utilizan. A lo largo de dos años, entre el 1 de abril de 2014 y el 1 de abril de 2016 (fig. 1), casi tres millones de usuarios de todo el mundo utilizaron JSmol en más de doce millones de visitas.



Figura 1. Estadística de uso de JSmol.

En este artículo, comenzaremos con una presentación de cómo pueden emplear JSmol los docentes de química sin necesidad de entrenamiento ni experiencia en el diseño de páginas web, en HTML o en JavaScript. Primero, nos centraremos en cómo pueden usarse directamente las páginas web existentes, escritas por educadores en química de todo el mundo, para demostraciones en el aula, actividades y el estudio individual. Estas páginas se han seleccionado por su popularidad, su sencillez de uso o su utilidad general. Terminaremos presentando los posibles usos del programa autónomo Jmol (Java) en actividades de aprendizaje que pueden explorar el

abánico completo de prestaciones y capacidades de Jmol.

Recursos basados en la web

Química general e inorgánica

Orbitales del hidrógeno

El concepto orbital atómico puede resultar bastante confuso para los estudiantes: nodos planos y radiales, fases, el concepto orbital como una descripción de la «probabilidad» de encontrar el electrón en una posición determinada del espacio, etc. Las imágenes sobre el papel no transmiten lo mismo que un objeto puntillista, manipulable y realista, generado mediante el método

The Jmol molecular viewer (Universidad Estatal de Ohio)

Este sitio (fig. 3) proporciona un servicio muy completo que incluye cuatro recursos: un panel VSEPR (TRePEV o RPECV) con ejemplos de geometrías moleculares diversas, desde lineal hasta bipirámide pentagonal (incluyendo los pares electrónicos aislados, si se desea); un visor molecular predefinido con ejemplos desde inorgánicos a biológicos (muchos incluyen mapas de potencial electrostático y varios muestran resonancia de enlaces mediante animaciones); una herramienta para investigar estructuras cristalinas, y más de cuatrocientas estructuras procedentes de la ya desaparecida Klotho: Biochemical Compounds Declarative Database (Klotho..., 2002).

Cool molecules. A molecular structure explorer

Este, que fue el primer sitio con Jmol creado por uno de los autores (BH), ofrece una colección verificada de más de novecientas sesenta estructuras cristalinas con distancias y ángulos reales (no idealizados) que se muestran empleando una escala absoluta. Su propósito es destacar que los ángulos idealizados que se estudian en el primer año de Química están distorsionados

de Montecarlo en tiempo real y diferente cada vez que lo recreas (fig. 2). Los alumnos pueden experimentar y disfrutar retando a su profesor con un orbital $5g_{z^4}$. ¿Cuántos nodos tiene?

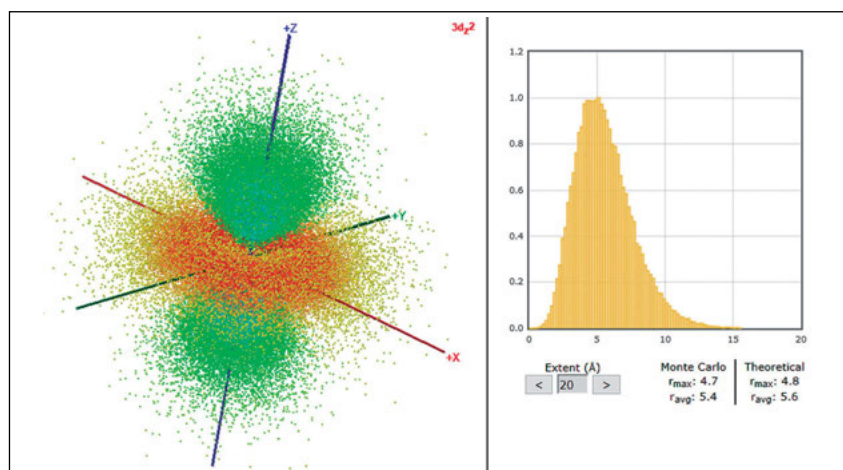


Figura 2. Orbitales del hidrógeno. <http://chemapps.stolaf.edu/jmol/orbitals/> (en inglés).

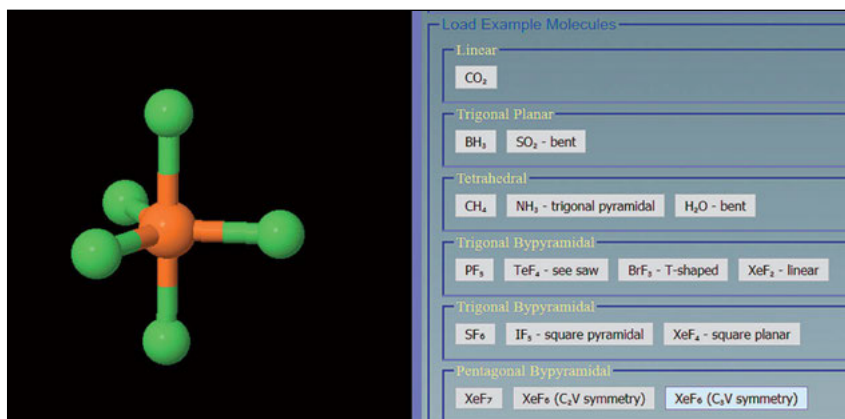


Figura 3. The Jmol molecular viewer (Universidad Estatal de Ohio). <https://undergrad-ed.chemistry.ohio-state.edu/jmol-viewer/> (en inglés).

en las moléculas reales por razones reales (fig. 4). El sitio se basó en un libro impreso, *Molecular origami. Precision scale models from paper* (Hanson, 1995), y proporciona modelos que se pueden imprimir, recortar y plegar, produciendo modelos de papel que se pueden examinar y manipular. Casi oculto en este sitio, se incluye un simulador de vibraciones animadas «diséñalo tú mismo». ¿Podrías predecir cómo es el modo de flexión simétrica fuera del plano del trióxido de boro (B_2O_3)? ¡Quizá te sorprenda! (Hanson, 2013).

Visualizaciones en química

Esta extensa sede web emplea JSmol para mostrar modelos tanto de compuestos como de procesos, incluyendo animaciones de los átomos y moléculas. Contiene, asimismo, cuestionarios con autoevaluación. Los contenidos están dirigidos a la enseñanza secundaria, el bachillerato y los primeros cursos de universidad (fig. 5). Se abarcan estructuras químicas (orgánicas e inorgánicas), mecanismos de reacción en química inorgánica y simulaciones de procesos. Una sección adicional titulada «Test conceptuales» aborda específicamente aquellos conceptos fundamentales que a menudo los estudiantes tienen dificultad para asimilar.

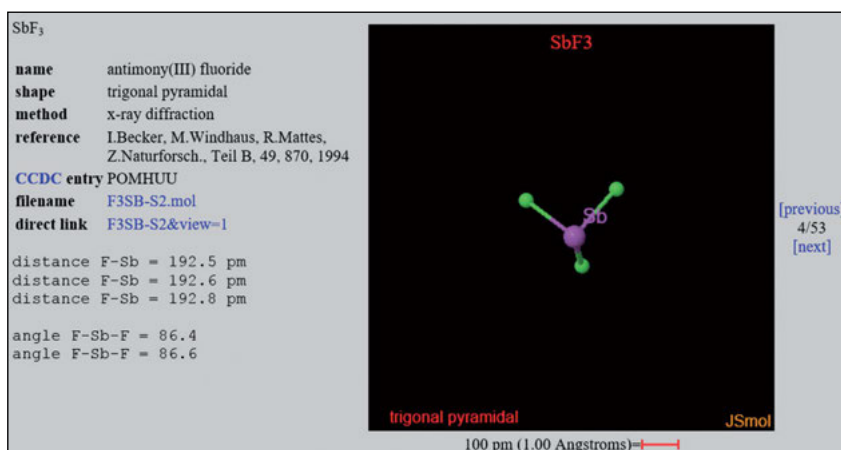


Figura 4. Cool molecules. A molecular structure explorer. <http://www.stolaf.edu/depts/chemistry/mo/struc/> (en inglés).

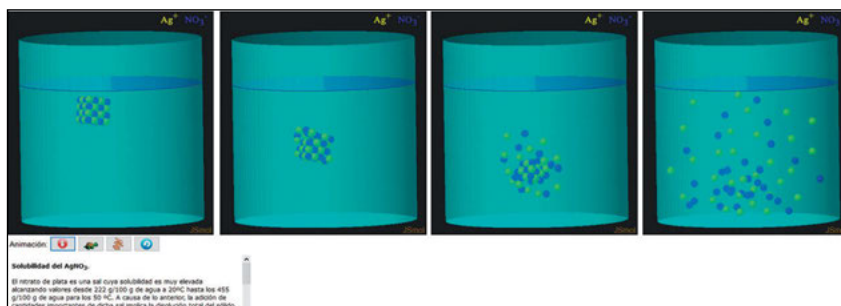


Figura 5. Visualizaciones en química. <http://uv.es/quimicajmol/> (en español, parte en inglés).

Symmetry@Otterbein

Cuando se trata de demostrar los elementos de simetría molecular (ejes propios e impropios, planos especulares, centros de inversión, etc.), no hay sitio web que se aproxime al valor de este (fig. 6). Comprende tres secciones: una guía interactiva sobre grupos puntuales; un «reto de simetría»

El concepto orbital atómico puede resultar bastante confuso para los estudiantes: nodos planos y radiales, fases, el concepto orbital como una descripción de la «probabilidad» de encontrar el electrón en una posición determinada del espacio, etc.

que emplea moléculas reales junto a un diagrama de flujo interactivo que cabecea negando cuando cometes un error, y una galería con más de cien ejemplos de moléculas en cuarenta y un grupos puntuales diferentes. ¿En cuántos ejemplos químicos puedes pensar para el grupo puntual S_4 ? En este sitio hay cinco.

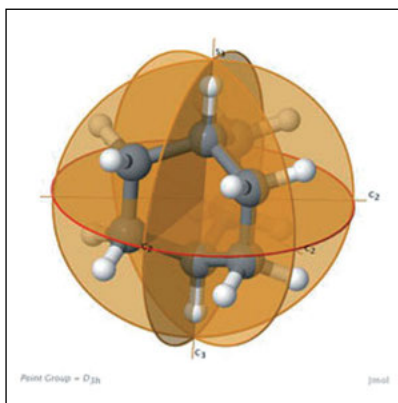


Figura 6. Symmetry@Otterbein. <http://symmetry.otterbein.edu/> (en inglés).

Química orgánica

Moléculas sencillas

Este cautivador sitio permite tanto a profesores como a estudiantes mostrar sobre la marcha moléculas que pueden o no haberse sintetizado alguna vez. Aprovechando un potente servicio ofrecido por el National Cancer Institute en Frederick (Maryland, EUA), puedes escribir nombres IUPAC para que se muestre su estructura, o bien comenzar con una y modificarla tú mismo con las herramientas que incluye. Una animación del volteo del anillo de ciclohexano demuestra cómo el cambio desde una conformación en silla a la otra no exige pasar por una en bote (fig. 7). El modo de minimización «arrastra y suelta» ofrece horas de diversión adictiva: el usuario puede apuntar a un átomo con el puntero del ratón y arrastrarlo fuera de su lugar, con lo que los enlaces se deforman; nada más soltar el puntero, se ejecuta una minimización de energía que devuelve el átomo a una posición en la que las longitudes y los ángulos de enlace sean razonables (pero no

Brico-moléculas permite una conversión rápida entre las representaciones 2D y 3D de cualquier molécula

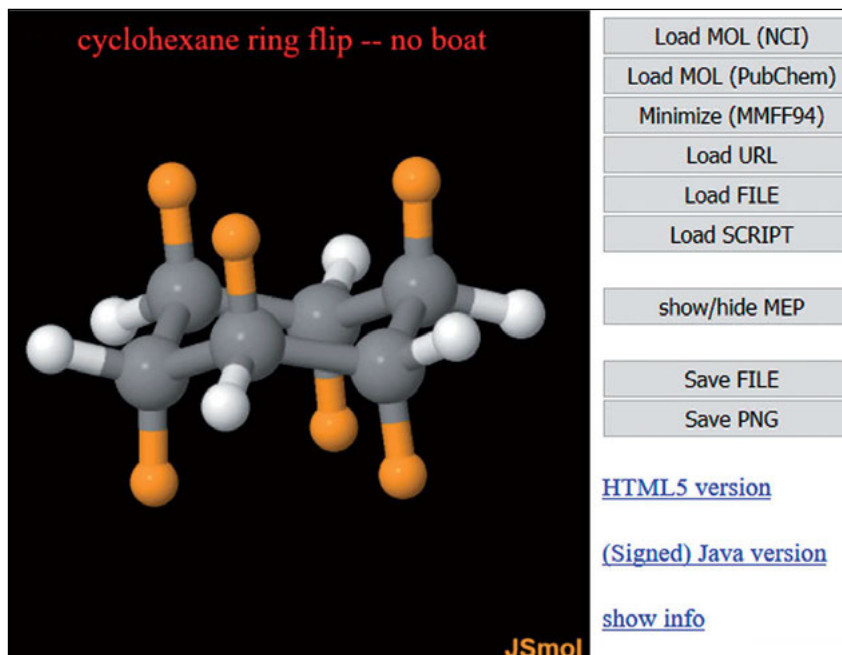


Figura 7. Moléculas sencillas. <http://chemapps.stolaf.edu/jmol/jsmol/simple2.htm> (en inglés).

necesariamente idéntica a la conformación original).

Galería visual 3D de moléculas.

Química del carbono

Este sitio incluye modelos de casi cien estructuras orgánicas frecuentes, adecuadas para la enseñanza secundaria y el bachillerato (fig. 8). La presentación predefinida utiliza la versión WebGL (WebGL..., 2016) de JSmol. Los cuestionarios asociados permiten a los estudiantes evaluar su destreza en la nomenclatura de

compuestos orgánicos en español. Brico-moléculas. *DIY-molecules*

Esta página permite una conversión rápida entre las representaciones 2D y 3D de cualquier molécula (fig. 9). Al igual que otros sitios presentados antes, utiliza el servidor CACTUS (NIH..., 2016) para obtener las estructuras a partir de su nombre, así como para convertir entre 2D y 3D. También es posible obtener estructuras de la base de datos PubChem (PubChem, s. a.), que contiene más de noventa millones de entradas.

Figura 8. Galería visual 3D de moléculas. Química del carbono. <http://iesbinef.edu.ca.aragon.es/fiqui/jmol/organica.htm> (en español). Téngase en cuenta que este sitio no ha adoptado las últimas recomendaciones de nomenclatura de la IUPAC.

1. Dibuja aquí tu molécula en 2D:

2. Ponle un nombre:

3. Transfiere al panel derecho (se añadirán los H)

4. Optimiza la estructura en 3D. (Puede ser preciso varias veces; [ayuda](#))

5. Observa la molécula en 3D a la derecha.

6. También puedes obtener estructuras 3D escribiendo su nombre en inglés: y después puedes pasarla a 2D, por ejemplo para añadirle modificaciones.

Figura 9. Brico-moléculas. DIY-molecules. <http://biomodel.uah.es/en/DIY/JSME/> (en español, inglés y francés).

CheMagic virtual model kit

Bajo el lema «Reach out and touch a molecule» («Alarga la mano y toca una molécula»), aquí se explora como en ningún otro lugar la increíble extensión de las capacidades de Jmol. Este notable sitio web (fig. 10) conecta con todo tipo de recursos, incluyendo PubChem (PubChem, s. a.), NMRDB («Nmrdb.org tools for NMR spectroscopists», s. a.) (un predictor de espectros de RMN) y la colección de datos espectrales del NIST Chemistry WebBook (2016), utilizando un ingenioso diseño de búsquedas de imágenes en Google a partir de identificadores químicos (<https://goo.gl/qxwMPa>). Enfocado a que cada uno elabore sus propios modelos moleculares, este recurso se ha diseñado con una elevada compatibilidad para los dispositivos táctiles, como tabletas y teléfonos.

ChemTube3D

Yendo mucho más allá de lo que la fig. 11 sugiere, ChemTube3D proporciona una colección, sin parangón en internet, de reacciones orgánicas animadas que cubren el espectro completo de la química orgánica para la universidad. El sitio permite mostrar de forma interactiva las reacciones de principio a fin,

Figura 10. CheMagic virtual model kit. <http://chemagic.org/molecules/mini.html> (en inglés).

Figura 11. ChemTube3D. <http://chemtube3d.com/> (en inglés).

incluyendo la formación de intermedios y estados de transición. Las páginas están diseñadas

ChemTube3D proporciona una colección, sin parangón en internet, de reacciones orgánicas animadas que cubren el espectro completo de la química orgánica para la universidad. El sitio permite mostrar de forma interactiva las reacciones de principio a fin

tanto para el estudio personal como para presentaciones en gran formato en el aula.

Predicción de RMN

Esta página (fig. 12) aparentemente simple combina la potencia de JSmol en 3D, el editor de estructuras químicas en 2D JSME y JSpecView, un visor de espectros con múltiples prestaciones (los tres, programados en JavaScript). Permite la predicción rápida de espectros RMN de ^1H (pronto incluirá también ^{13}C) a partir de la estructura dibujada o del nombre del compuesto, usando una conexión con el servidor de predicción NMRDB, ubicado en Lausana (Suiza). La correlación tanto del dibujo en 2D como del modelo tridimensional con las líneas del espectro se consigue simplemente pulsando sobre los átomos o los picos del espectro. Los espectros se pueden ampliar y reducir, integrar, comparar y enviar a documentos PDF.

Bioquímica

Biomodel

Esta sede web hace un uso intenso de JSmol acompañado de guiones y texto adecuados para el aprendizaje autónomo (fig. 13). Se divide en cuatro secciones principales. La primera muestra proteínas, ácidos nucleicos y los complejos entre ambos, a nivel universitario. La segunda se dedica a componentes lipídicos y modelos de la bicapa. La tercera incluye un muestrario de moléculas adecuadas para la educación secundaria y el bachillerato, diseñado para poderlo usar en una sesión práctica de una hora u hora y media con los alumnos. La cuarta sección es una guía sobre los aspectos estructurales fundamentales del ADN (evolución de un diseño original de Mertz, 1995) y se ha traducido a doce idiomas.

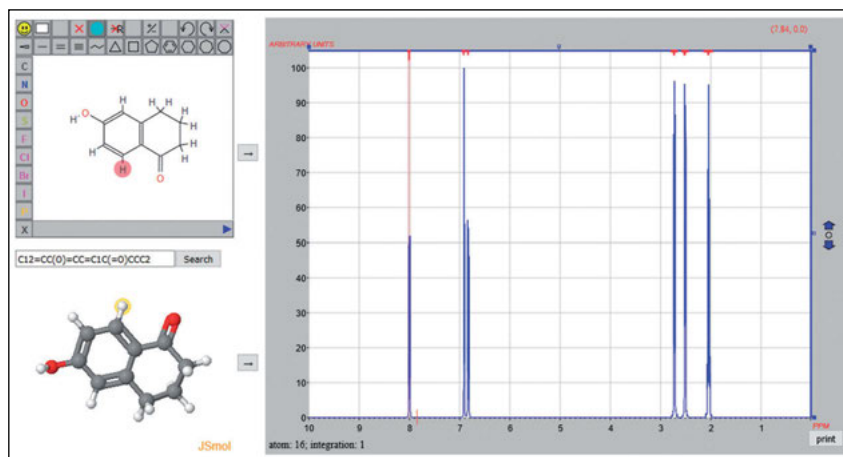


Figura 12. Predicción de RMN. http://chemapps.stolaf.edu/jmol/jsmol/jsv_predict2.htm (en inglés).

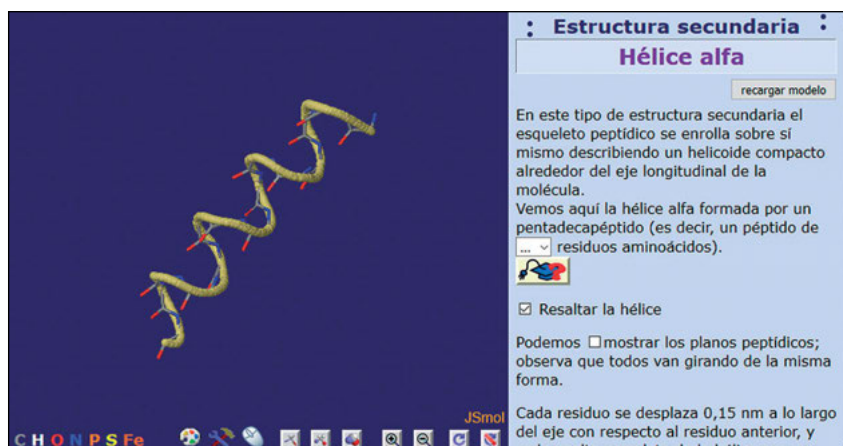


Figura 13. Biomodel. <http://biomodel.uah.es/> (en español e inglés).

BioMóvil

Con un diseño liviano que utiliza una versión simplificada de JSmol, esta aplicación está concebida para su uso en el teléfono móvil (fig. 14). Puedes elegir un nombre y se mostrará la estructura, o bien ver una estructura al azar e intentar responder cuál es su nombre. Incluye los veintidós aminoácidos proteicos y las cinco bases nitrogenadas más comunes.

Predicción de RMN combina la potencia de JSmol en 3D, el editor de estructuras químicas en 2D JSME y JSpecView para predecir espectros de RMN de ^1H

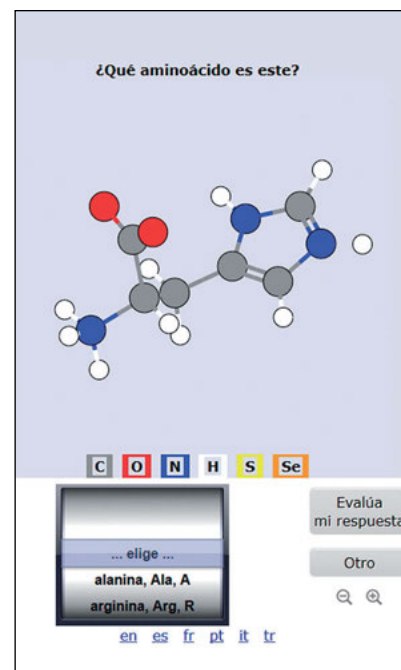


Figura 14. BioMóvil. <http://biomodel.uah.es/m/> (en español, inglés, francés, italiano, portugués y turco).

Estructura de biomoléculas y macromoléculas en UIB

Este sitio trata con estructuras más complejas (tales como asociaciones entre ADN y proteínas, complejos enzimáticos grandes y proteínas implicadas en el cáncer), pero también presenta los fundamentos de todos los tipos de biomoléculas (fig. 15). Complementa las visualizaciones en JSmol con explicaciones detalladas y algunos gráficos animados. Parte del sitio está aún pendiente de su conversión de Jmol/Java a JSmol.

p53
Este supresor tumoral es una proteína clave en los procesos de regulación de la proliferación, diferenciación y apoptosis, cuya acción viene mediada por diferentes mecanismos:

El p53 se une al DNA para iniciar la expresión de genes, en la figura se representa un monómero de p53 unida al DNA, en la se representan los seis residuos, mutados con más frecuencia en los tumores humanos Arg175, Gly245, Arg248, Arg249, Arg273 y Arg282

La proteína p53, que es una proteína nuclear, normalmente se encuentra en forma de tetrámero o tal vez incluso en una forma de agregación aún mayor. Basta únicamente que una de sus subunidades sea defectiva para comprometer la función de esta proteína

The diagram shows a signaling pathway where p53 (labeled as 'Elemento de respuesta') activates p21, Gadd45, Bcl-2, BAX, and Trombospondina. p21 leads to 'ADN reparación' and 'Proliferación'. Gadd45 leads to 'Proliferación'. Bcl-2 leads to 'Apoptosis'. BAX leads to 'Apoptosis'. Trombospondina leads to 'Angiogénesis'. PCNA is also shown leading to 'ADN reparación'.

Figura 15. Estructura de biomoléculas y macromoléculas en UIB. <http://gmot.uib.es/difusion.html> (en español).

RCSB Protein Data Bank y Protein Data Bank in Europe

Estos dos portales dan acceso al repositorio de referencia para estructuras de macromoléculas obtenidas de la experimentación con cristalografía de rayos X, difracción de electrones, RMN y otras técnicas (fig. 16). JSmol es uno de los principales visores que se ofrecen para observar en línea las estructuras en 3D. RCSB proporciona una vista singular de los ligandos en su bolsillo de unión, en la que se destacan en color los contactos (rojo) y los huecos libres (azul).

1EVE
THREE DIMENSIONAL STRUCTURE OF THE ANTI-ALZHEIMER DRUG, E2020 (ARICEPT), COMPLEXED WITH ITS TARGET ACETYLCHOLINESTERASE

Structure Details:
Structure: Asymmetric Unit
Crystal Packing: None
Symmetry Type: Global Symmetry
Symmetry: C1
Stoichiometry: A

Select Orientation: Front

Select Display Mode: Secondary Structure, Subunit, Symmetry

Display Options:
Style: Cartoon
Color: Secondary Structure
Surface: None

Figura 16. RCSB Protein Data Bank. <http://rcsb.org/pdb>. Protein Data Bank in Europe. <http://pdbe.org>.

Proteopedia. Life in 3D

Esta enciclopedia gratuita y colaborativa en 3D de las proteínas y otras moléculas es un entorno similar a Wikipedia, mantenido por la comunidad de usuarios, que incluye herramientas de edición para crear páginas en las que la lectura se ilustra con visualizaciones interactivas mediante JSmol (fig. 17). Resulta ser así una versión de la base de datos PDB con contenido producido por la comunidad. ¡Una plataforma estupenda para proyectos de aula!

Featured Article

Green links change the 3D image!
Click and drag on the molecule!

Green Fluorescent Protein
by Eran Hodis

Green fluorescent protein (GFP) is a bioluminescent polypeptide consisting of 238 residues isolated from the body of *Aequorea victoria* jellyfish.^[1] GFP converts the blue chemiluminescent of aequorin in the jellyfish into green fluorescent light.^[2] It remains unclear why these jellyfish use fluorescence, why green is better than blue, or why they produce a separate protein for green fluorescence as opposed to simply mutating the present aequorin to shift its wavelength,^[3] but in the laboratory, GFP can be incorporated into a variety of biological systems in order to function as a marker protein. Since its discovery in 1962, GFP has become a significant contributor to the research of monitoring gene expression, localization, mobility, traffic, interactions between various membrane and cytoplasmic proteins, as well as many others. (more...)

Previously featured articles...

Figura 17. Proteopedia. Life in 3D. <http://proteopedia.org/>.

Opciones de uso autónomo

Todo lo que se ha presentado hasta ahora son contenidos ya preparados que se pueden usar tal cual y de forma inmediata en el aula. Algunos de los recursos se han elaborado con poca o ninguna programación, tan solo la escritura de unos pocos guiones (tanto en JavaScript como en instrucciones de Jmol). Otros son el resultado de un trabajo mucho más elaborado por parte de sus autores, que actúa tras bambalinas de formas ingeniosas y complejas. Pero, además de integrado en todas estas páginas, Jmol está disponible también en forma de programa Java que puede ejecutarse en sistemas Windows, MacOS o Linux (las restricciones de seguridad impuestas sobre las «aplicaciones» Java solo afectan a su uso en un navegador de internet, no como programas autónomos). En este formato, es posible utilizar toda la potencia de Jmol mediante menús desplegables y contextuales, así como en una consola de instrucciones y con guiones grabados en archivos (fig. 18). Al ejecutarse mediante Java, solo está limitado por la memoria del equipo y puede, por ejemplo, leer fácilmente la información de modelos con más de medio millón de átomos y permitir su manejo fluido con el ratón o en animaciones. Hay guías para su uso en diversos lugares de la red (por ejemplo, «Section 1. Using Jmol as a computer visualization tool», 2010). La documentación completa para los guiones de Jmol está disponible en Hanson (2016).

Consigue tu molécula

Algunos de los ejemplos de recursos en internet reseñados en este artículo ya han demostrado formas de obtener una estructura en 3D, pero aún hay más:

— Utilizando el menú de la barra superior en la ventana del programa Jmol:

— «Archivo > Conseguir un PDB» localiza y descarga una macromolécula desde la base de datos RCSB

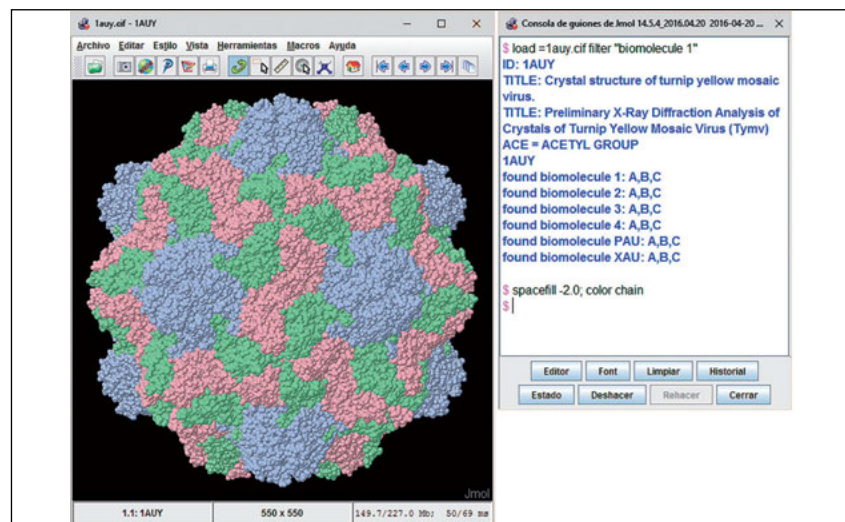


Figura 18. El programa Jmol con su consola de instrucciones.

PDB, si conoces su código o identificador PDB (cuatro caracteres alfanuméricos).

— «Archivo > Conseguir un MOL» localiza y descarga una molécula desde el servidor NCI CACTUS, si proporcionas uno de sus nombres en inglés (nombre común, sistemático o comercial) o algún identificador químico (número CAS, InChI, SMILES).

— Descargando el archivo desde los portales de las bases de datos.

— Es posible descargar una copia del archivo que usa una página web (aunque a menudo el procedimiento para conseguirlo no es sencillo).

— Puedes dibujar en 2D la molécula que deseas, conseguir su conversión a 3D y, a continuación, descargar ese archivo. Esto es posible en algunos de los sitios antes descritos, así como en el portal CACTUS (NIH..., 2016).

— También se puede construir la molécula directamente en 3D utilizando el programa Jmol (en su modalidad *model kit mode*), o una página web como Chemagic (ya descrita; Rothenberger, s. a.), o un programa como Avogadro (Avogadro..., 2016).

Lleva la molécula en el bolsillo

Sin dominar demasiado Jmol, cualquier profesor o estudiante

puede fácilmente aprovechar el programa para preparar de antemano una presentación de la molécula y luego mostrarla en el aula rápidamente, sin necesidad de instalar programas especiales (salvo Java). Brevemente, estos serían los pasos a seguir:

1. Consigue el archivo de una molécula en alguna página web o, especialmente, en una base de datos como NCI, PubChem o PDB. Guárdalo en tu disco local (habitualmente, se tratará de un archivo *.mol* o *.pdb*).

2. Descarga el paquete de «distribución» de Jmol (un archivo *.zip*) desde <https://sf.net/projects/jmol/files/> y extrae o descomprime de él tan solo el archivo *Jmol.jar*.

3. Inicia el programa Jmol (por ejemplo, haciendo doble clic en el archivo *Jmol.jar*) y abre en él el archivo de la molécula. Usando el ratón y el menú de Jmol, orienta el modelo como prefieras y aplica el estilo que mejor destaque lo que quieres contar de esa molécula.

4. Una vez estés satisfecho con lo que se ve, haz clic con el botón derecho del ratón y elige «Archivo > Guardar > Guardar como archivo PNG/JMOL». El archivo que se guarda parece un típico archivo de imagen, pero, en realidad, contiene también toda la información que necesita Jmol para recrear la escena interactiva en 3D.

5. Lleva contigo (por ejemplo, en un dispositivo USB) el archivo *Jmol.jar* y el archivo *.png* que grabaste. Una vez en el aula, inicia tu copia de Jmol y emplea «Archivo > Abrir» (o bien arrastra el archivo *.png* y suéltalo sobre la ventana de Jmol).

Conclusión

Confiamos en que este artículo proporcione al lector una percepción de las amplias y diversas aplicaciones educativas de Jmol, así como del potencial para el desarrollo de más sitios web diseñados por educadores. Se trata de una selección necesariamente limitada entre todo lo que hay disponible; por ejemplo, una búsqueda escribiendo «Jmol» en la sede del *Journal of Chemical Education* en internet rinde más de ciento setenta y cinco artículos, y una en Google devuelve cerca de medio millón de resultados.

Tanto si quieres orientar a tus alumnos hacia sitios existentes como si estás dispuesto a unirte al grupo creciente de educadores que han encontrado en Jmol una salida a su imaginación y su deseo de comunicar la ciencia de forma divertida, activa y participativa, Jmol está a tu disposición.

Referencias

- Avogadro* [recurso electrónico]: *An open-source molecular builder and visualization tool* (2016). <<http://avogadro.cc>> [Consulta: 22 octubre 2016].
- HANSON, R. M. (1995). *Molecular origami: Precision scale models from paper*. Sausalito: University Science Books.
- (2013). *Animation of normal modes of vibration, trigonal planar XA3* [recurso electrónico]. [S. l.: s. n.]. <<http://goo.gl/UdyHzQ>> [Consulta: 22 octubre 2016].
- (2016). *Jmol/JSmol interactive scripting documentation* [en línea]. [S. l.: s. n.]. <<https://chemapps.stolaf.edu/jmol/docs>> [Consulta: 22 octubre 2016].
- «Jmol» (2016). En: *Wikipedia* [en línea]: *La enciclopedia libre*. San Francisco: Wikimedia Foundation. <<https://es.wikipedia.org/wiki/Jmol>> [Consulta: 22 octubre 2016].
- Klotho [en línea]: *Biochemical Compounds Declarative Database* (2002). [S. l.: s. n.]. <<http://web.archive.org/web/20011205065732/http://www.ibc.wustl.edu/klotho>> [Consulta: 22 octubre 2016].
- MARTZ, E. (1995). «DNA RasMol “movie” script». En: *RasMol scripts for classroom projection* [en línea]. Boston: Universidad de Massachusetts. <http://www.umass.edu/microbio/rasmol/scrip_mz.htm#dna> [Consulta: 22 octubre 2016].
- NIH [en línea]: *Chemical identifier resolver* (2016). Rockville: National Cancer Institute. <<http://cactus.nci.nih.gov/chemical/structure>> [Consulta: 22 octubre 2016].
- NIST Chemistry WebBook [en línea] (2016). Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology. <<http://webbook.nist.gov/chemistry/>> [Consulta: 22 octubre 2016].
- «Nmrdb.org tools for NMR spectroscopists» (s. a.). En: *NMRDB* [en línea]. Lausana: École Polytechnique Fédérale de Lausanne; Cali: Universidad del Valle. <<https://www.nmrdb.org>> [Consulta: 22 octubre 2016].
- PubChem [en línea] (s. a.). Bethesda: National Center for Biotechnology Information. <<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>> [Consulta: 22 octubre 2016].
- ROTHENBERGER, O. (s. a.). *CheMagic* [recurso electrónico]. Universidad Estatal de Illinois. <<http://chemagic.org>> [Consulta: 22 octubre 2016].
- «Section 1. Using Jmol as a computer visualization tool» (2010). En: *Jmol training guide* [en línea]. Milwaukee: Milwaukee School of Engineering. Center for Biomolecular Modeling. <<http://cbm.msoe.edu/includes/pdf/JmolTrainingGuide-Section1.pdf>> [Consulta: 22 octubre 2016].
- WebGL [recurso electrónico]: *Mozilla developer network* (2016). Mountain View: MDN. <https://developer.mozilla.org/en-US/docs/Web/API/WebGL_API> [Consulta: 22 octubre 2016].



Angel Herráez

Licenciado en Química y profesor titular de universidad de bioquímica y biología molecular. Se ha especializado en el desarrollo de materiales en línea para la docencia y el estudio en su sede web Biomodel, de acceso libre. Es autor de dos ediciones de *Biología molecular e ingeniería genética*, miembro del FEBS Education Committee y editor de *FEBS Open Bio. Education Section*. C. e.: angel.herraez@uah.es. Web: <http://biomodel.uah.es>.



Robert M. Hanson

Es el principal responsable del desarrollo de Jmol desde 2007 y profesor en la universidad St. Olaf College, en Northfield (Minnesota, EUA), donde enseña química orgánica, química médica, química general, farmacología y nanociencia. Actualmente investiga en el área de computación en ciencia de materiales y en métodos para convertir a JavaScript los programas Java en general. C. e.: hansonr@stolaf.edu. Web: <http://www.stolaf.edu/people/hansonr>.