

Plan Integral de Educación Digital
Dirección Operativa de Incorporación de Tecnologías (DOInTec)

COLECCIÓN DE APLICACIONES GRATUITAS PARA CONTEXTOS EDUCATIVOS

Tutorial ChemSketch

- ▶ Programa diseñado para dibujar estructuras químicas y realizar diversos cálculos y reportes.



buenosaires.edu.ar  /educacionGCBA  /educGCBA

Educación



Buenos Aires Ciudad

EN TODO ESTÁS VOS

Prólogo

Este tutorial se enmarca dentro de los lineamientos del [Plan Integral de Educación Digital \(PIED\)](#) del Ministerio de Educación del Gobierno de la Ciudad Autónoma de Buenos Aires que busca integrar los procesos de enseñanza y de aprendizaje de las instituciones educativas a la cultura digital.

Uno de los objetivos del PIED es “fomentar el conocimiento y la apropiación crítica de las Tecnologías de la Información y de la Comunicación (TIC) en la comunidad educativa y en la sociedad en general”.

Cada una de las aplicaciones que forman parte de este banco de recursos son herramientas que, utilizándolas de forma creativa, permiten aprender y jugar en entornos digitales. El juego es una poderosa fuente de motivación para los alumnos y favorece la construcción del saber. Todas las aplicaciones son de uso libre y pueden descargarse gratuitamente de Internet e instalarse en cualquier computadora. De esta manera, se promueve la igualdad de oportunidades y posibilidades para que todos puedan acceder a herramientas que desarrollen la creatividad.

En cada uno de los tutoriales se presentan “consideraciones pedagógicas” que funcionan como disparadores pero que no deben limitar a los usuarios a explorar y desarrollar sus propios usos educativos.

La aplicación de este tutorial no constituye por sí misma una propuesta pedagógica. Su funcionalidad cobra sentido cuando se integra a una actividad. Cada docente o persona que quiera utilizar estos recursos podrá construir su propio recorrido.

Índice

¿Qué es?  p.5

Requerimientos técnicos  p.5

Consideraciones pedagógicas  p.5

Actividad propuesta  p.6

Nociones básicas

• Abrir el programa  p.7

• La ventana principal  p.8

Paso a paso

• Dibujar átomos con enlaces  p.11

Borrar átomos  p.12

• Deshacer o rehacer cambios  p.12

sobre el espacio de trabajo

• Agregar más átomos sobre una estructura  p.12

• Generar enlaces simples, dobles y triples  p.13

• Cambiar un átomo por otro  p.13

• Agregar otro tipo de átomos en la estructura  p.15

Agregar cadenas al espacio de trabajo  p.15

• Guardar el trabajo  p.17

• Imprimir el trabajo  p.17



- Copiar el trabajo en otro documento▶ p.18
- Ver el trabajo en 3D▶ p.18
- Generar movimiento a la estructura▶ p.23
- Modificar los colores del entorno 3D▶ p.23
- Calcular la distancia entre dos átomos▶ p.24
- Cómo volver al modo Estructura▶ p.24
- **Enlaces de interés**▶ **p.25**



¿Qué es?

ChemSketch es un programa diseñado para dibujar estructuras químicas y realizar diversos cálculos y reportes.

Sitio oficial:

<http://www.acdlabs.com/download/>

Requerimientos técnicos

El programa corre bajo los sistemas operativos Windows y GNU/Linux.

Se encuentra en idioma inglés.

Consideraciones pedagógicas

Nivel: Secundario

Área: : Química

- Aplicación del armado de estructuras químicas.
- Generación de cálculos sobre estructuras.
- Animación en 3D.



Actividad propuesta

Idea

Los alumnos crearán la molécula de la vitamina C y simularán su movimiento en 3D.

Materiales

Netbooks, ChemSketch y conexión a internet.

Desarrollo de la actividad

- El docente le propondrá a los alumnos la realización de la molécula de vitamina C. Para ello los alumnos se dividirán en grupos.
- Cada grupo debe indagar en internet la composición de la vitamina C.
- Luego, utilizando el programa ChemSketch, deberán generar los átomos y enlaces necesarios para armar la molécula de la vitamina C.
- Finalmente, deberán animar su presentación en 3D.

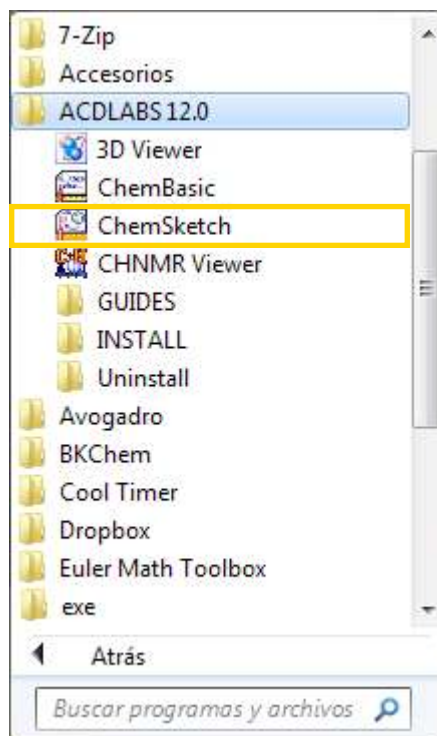


Nociones básicas

Abrir el programa

El programa se encuentra instalado en los equipos.

Ir a **Inicio < Todos los programas < ACDLABS 12.0 < ChemSketch**



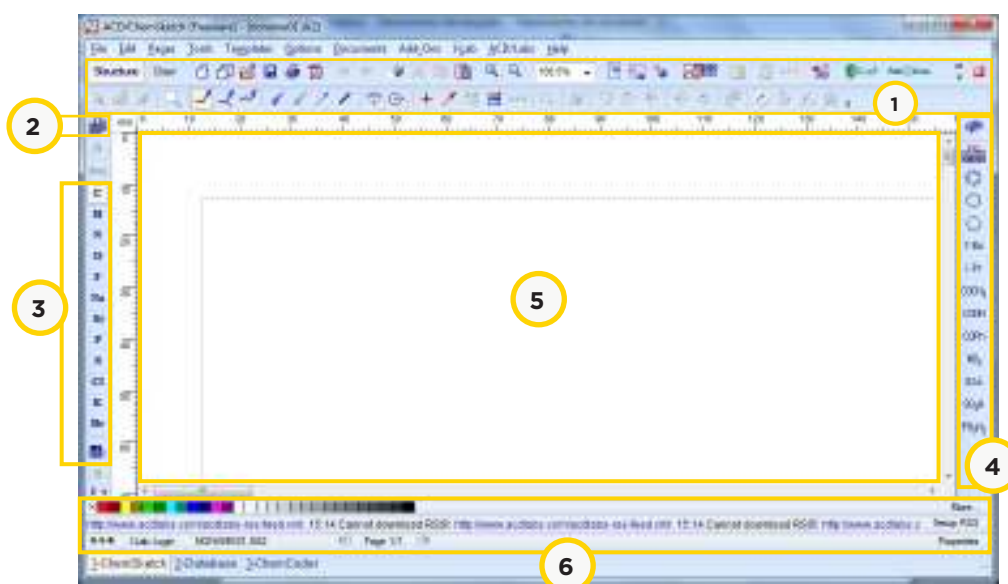
Nociones básicas

La ventana principal

Es posible trabajar con dos tipos de pantallas: **Estructura o Dibujo**.

Para seleccionar el modo de trabajo se debe utilizar el primer botón de la barra de herramientas.

La pantalla en **modo Estructura** tiene las siguientes características:



1. Barras de Herramientas
2. Tabla periódica
3. Barra de átomos
4. Barra de radicales
5. Espacio de trabajo
6. Barra de colores e indicador de estado



Al seleccionar la **tabla periódica**, se abrirá una nueva ventana:

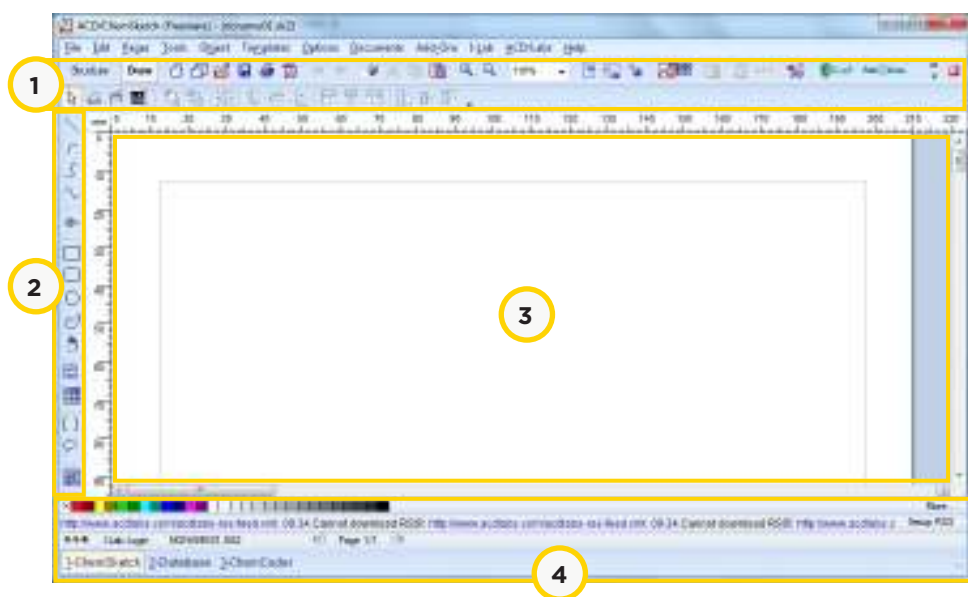


Al seleccionar cualquier elemento, se mostrarán los detalles del mismo tanto en la parte superior de la ventana como en las distintas solapas de la parte inferior.

En la imagen puede observarse que el elemento seleccionado fue el Helio.



Si se selecciona el **modo Dibujo** se pueden observar las siguientes características:



1. Barra de Herramientas
2. Barra de Dibujo
3. Espacio de trabajo
4. Barra de colores e indicador de estado



Paso a paso

Dibujar átomos con enlaces

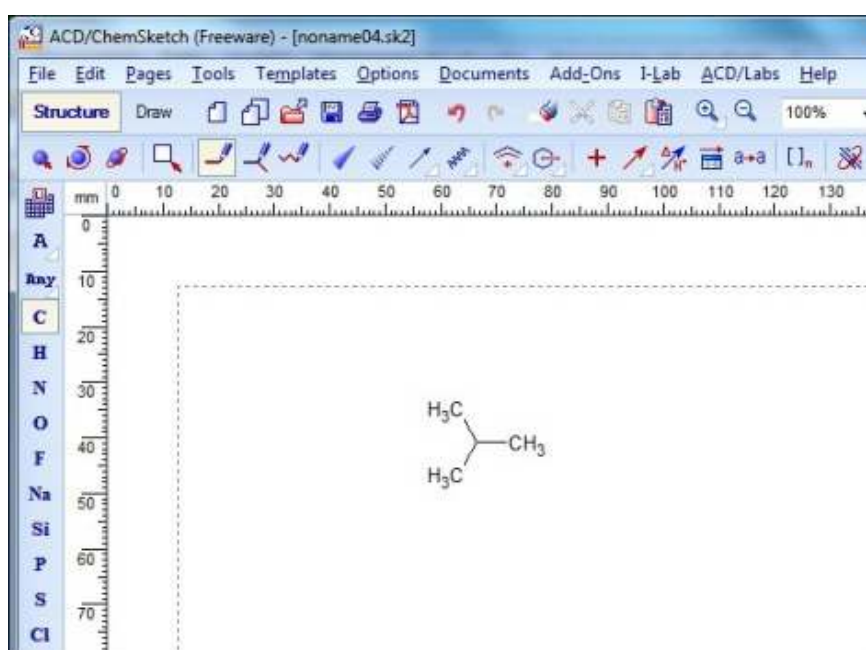
Para comenzar a dibujar átomos se debe ubicar en la ventana **modo Estructura**. Este modo puede ser seleccionado por medio de la primera opción de la barra de herramientas.

Elegir la opción de la barra de átomos como por ejemplo C de Carbono. Puede notarse que la opción **Dibujo Normal** queda seleccionada en la barra de herramientas.



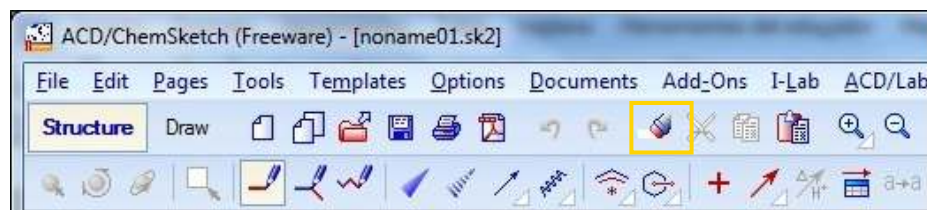
Pulsar el botón del mouse sobre el espacio de trabajo para generar el primer átomo. Luego pulsar sobre el átomo que se acaba de generar. Se puede observar que se genera un enlace estándar con un nuevo átomo de carbono CH₃-CH₃.

Finalmente sobre el átomo inicial realizar doble clic para crear un enlace más. Por ejemplo:



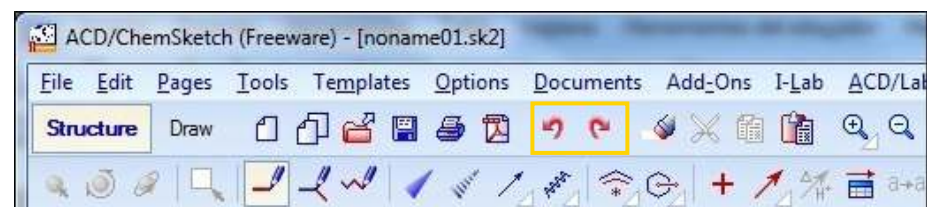
Paso a paso
Borrar átomos

Para borrar un átomo se debe seleccionar la opción de borrado (botón **Delete**) de la barra de herramientas y colocar el cursor sobre el átomo que se desea eliminar.



Paso a paso
Deshacer o rehacer cambios sobre el espacio de trabajo

Si se necesita **deshacer o rehacer** algún cambio sobre el espacio de trabajo se deben seleccionar los botones Undo o Redo de la barra de herramientas.

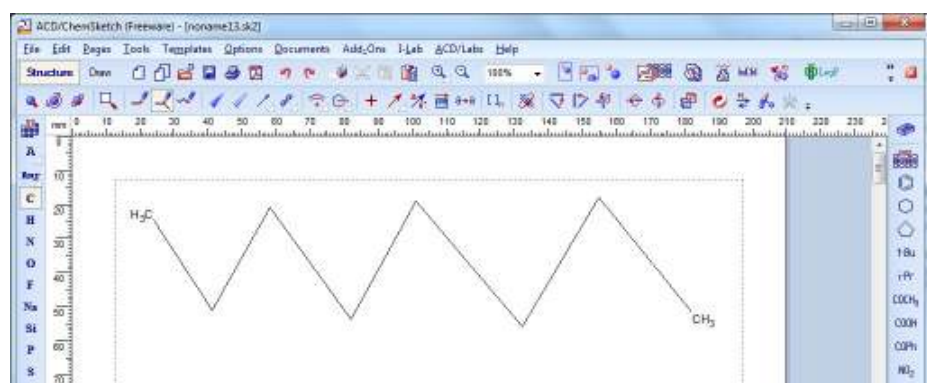


Paso a paso
Agregar más átomos sobre una estructura

Si se crea un átomo y luego se genera un enlace con otro átomo, se puede a partir de este último átomo ir dibujando diferentes enlaces seleccionando diferentes puntos de su espacio de trabajo.

Se debe seleccionar el átomo y manteniendo la selección, arrastrarlo hacia otro punto del espacio de trabajo. Se puede repetir esta acción tantas veces como sea necesario.

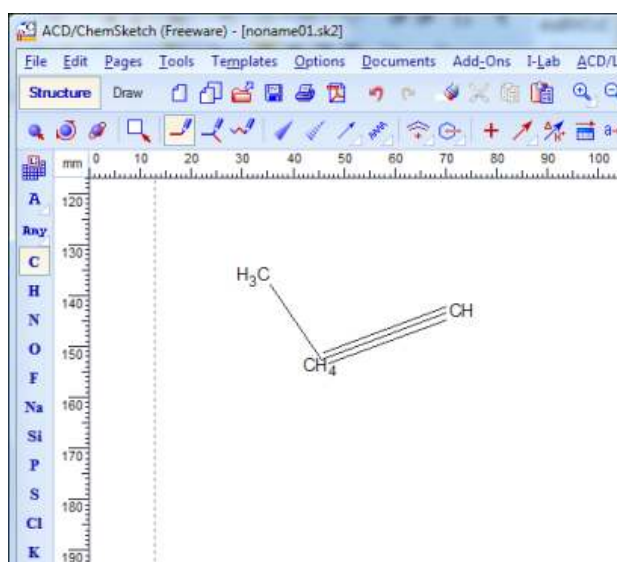
Por ejemplo:



Paso a paso Generar enlaces simples, dobles y triples

Si se pulsa sobre uno de los enlaces, éste pasará a ser doble. Si se vuelve a ejecutar la misma acción, el enlace será triple. En caso de presionar nuevamente se volverá a tener un enlace simple.

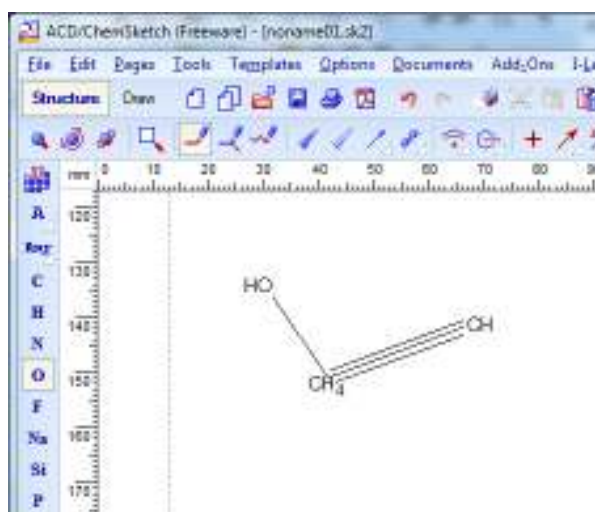
Por ejemplo:



Paso a paso Cambiar un átomo por otro

Si se desea cambiar un átomo por otro en su espacio de trabajo es necesario seleccionar el átomo de la **Barra de Átomos** (por ejemplo, Oxígeno) y pulsar sobre el átomo que se quiere modificar (por ejemplo el Carbono).

Por ejemplo:



Paso a paso
Agregar otro tipo
de átomos en la
estructura

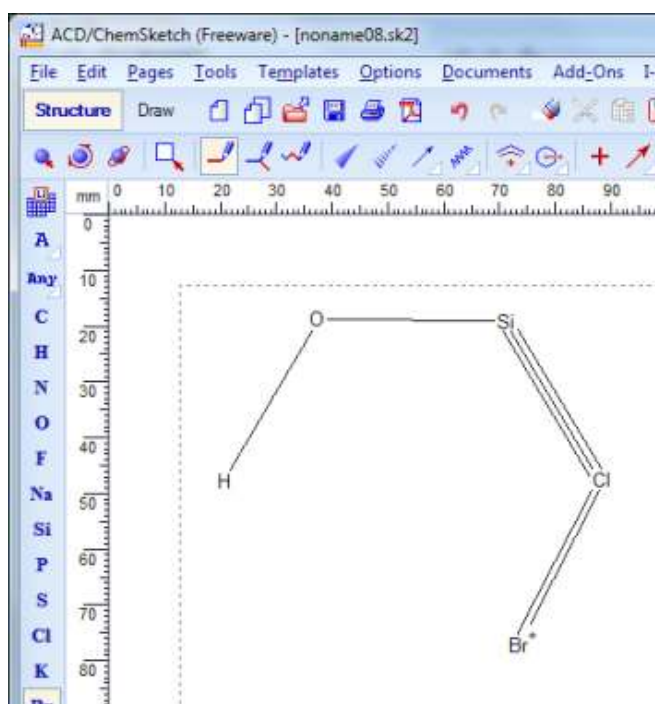
Es posible agregar distintos átomos al espacio de trabajo. Se debe seleccionar desde la barra de átomos el que se desea. Luego pulsar sobre el espacio de trabajo para crear el átomo.

Finalmente manteniendo la selección sobre el átomo generado, armar el enlace hacia otro átomo.

Para darle una estructura más estandarizada, puede utilizar la opción **Depurar** de la Barra de Herramientas.

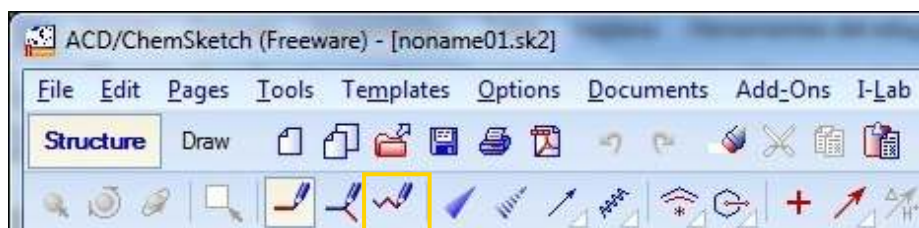


Por ejemplo:

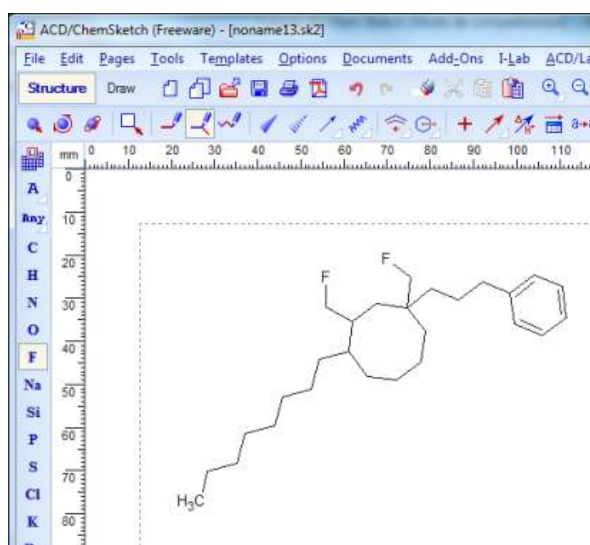


Paso a paso
Agregar cadenas
al espacio de trabajo

Se pueden **dibujar cadenas** por medio de la opción Dibujo de Cadenas que se encuentra en la barra de herramientas.

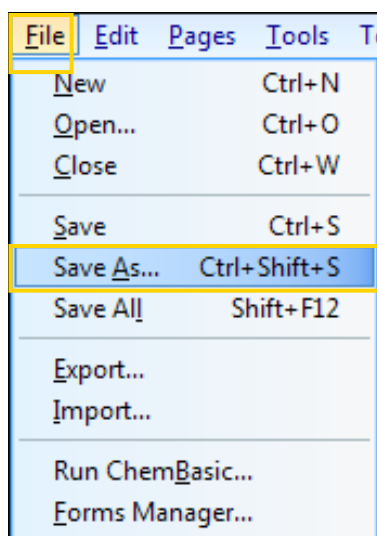


Por ejemplo:

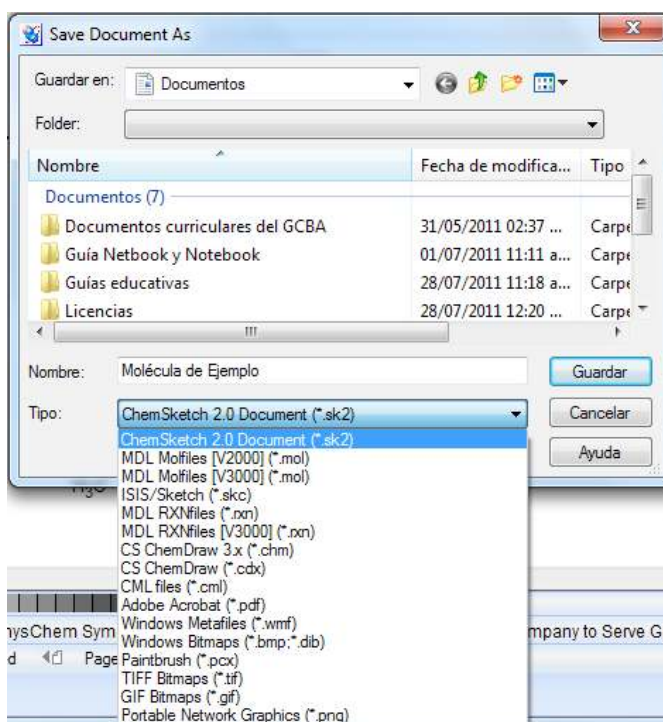


Paso a paso
Guardar el trabajo

Para guardar el trabajo se debe elegir del menú **File** la opción **Save As...**



Luego se abrirá la siguiente ventana donde se podrá seleccionar la ubicación de destino, el nombre y tipo del archivo.

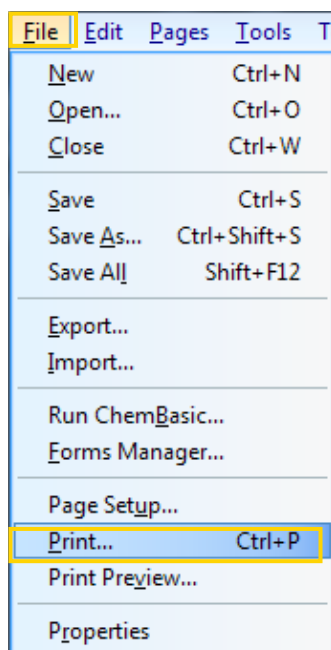


Se puede guardar el archivo en el formato del programa (SK2, mol,...) pero además podría guardarse como un archivo PDF o una imagen (.GIF, .PNG entre otros).

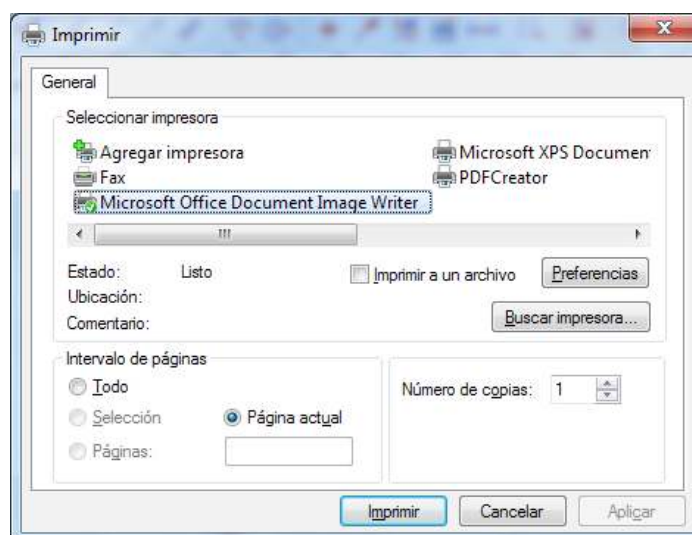


Paso a paso Imprimir el trabajo

Para imprimir el trabajo se debe elegir del menú **File** la opción **Print...**

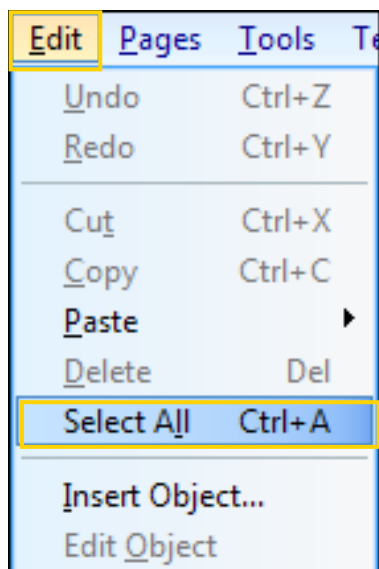


Al seleccionar esta opción el programa abrirá la siguiente ventana donde se podrá seleccionar el tipo de impresión.



Paso a paso
Copiar el trabajo en otro documento

Si se necesita utilizar el trabajo en otro documento (por ejemplo en un procesador de textos), se debe elegir en primer lugar del menú **Edit** la opción **Select All** o presionar la combinación de teclas **Ctrl + A**.



Esto permite tener toda la estructura seleccionada. Luego elegir de la barra de herramientas la opción **Copiar**. Finalmente se puede pegar esta imagen en el documento que se necesite utilizar.

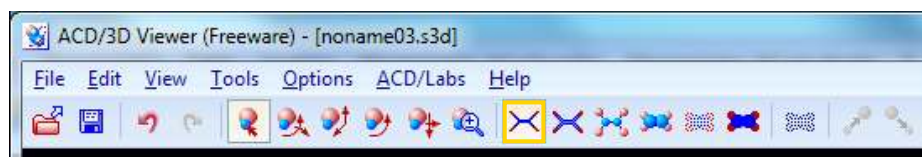
Paso a paso
Ver el trabajo en 3D

Se puede visualizar una estructura en 3D por medio de la opción **3D Viewer** de la barra de herramientas.

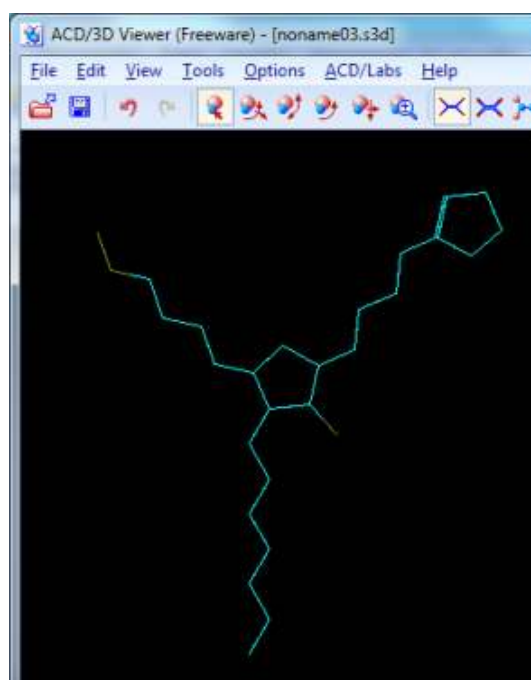


Se cuenta con distintos tipos de vistas:

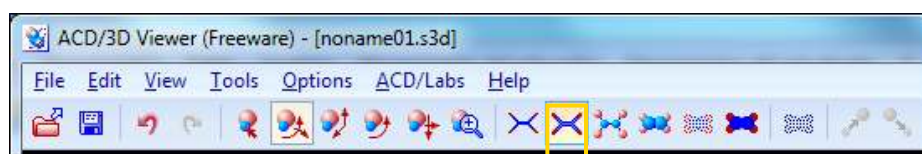
- **Vista Wireframe.**



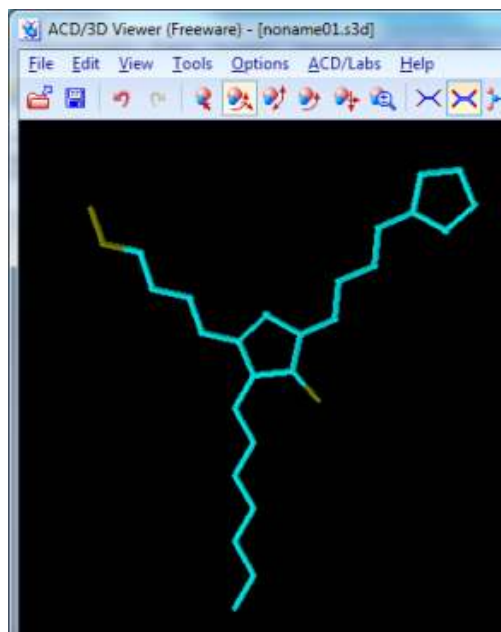
Por ejemplo:



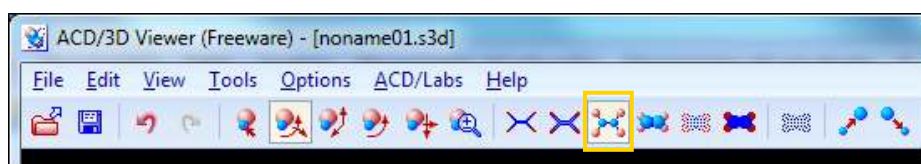
- **Vista Sticks.**



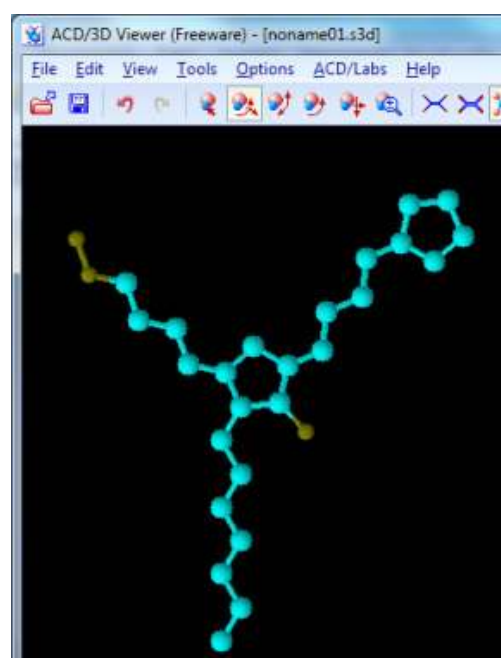
Por ejemplo:



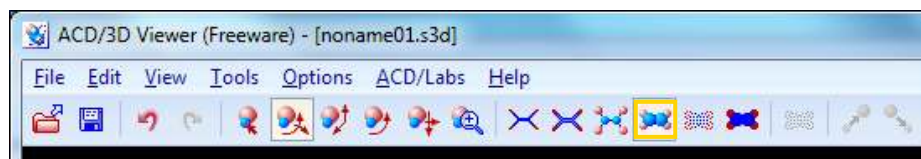
- **Vista Balls and Sticks.**



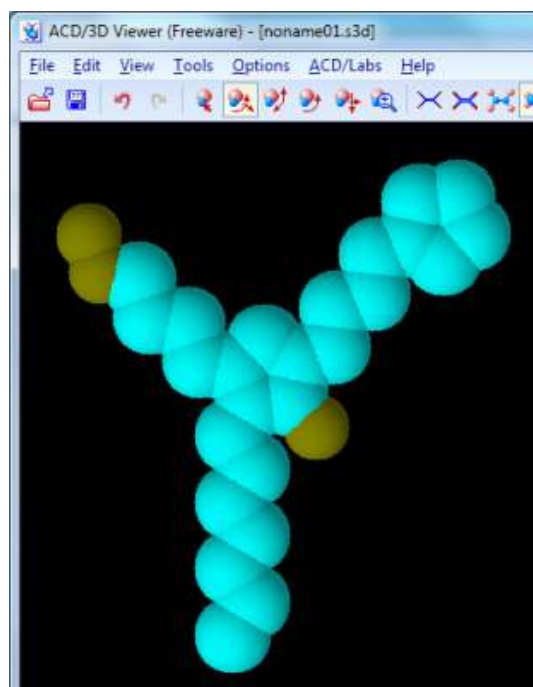
Por ejemplo:



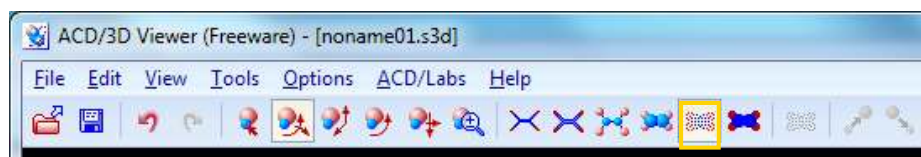
- **Vista Spacefill.**



Por ejemplo:

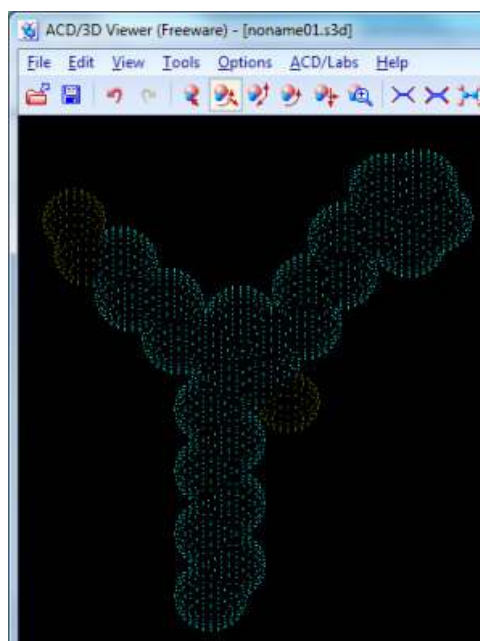


- **Vista Dots Only.**

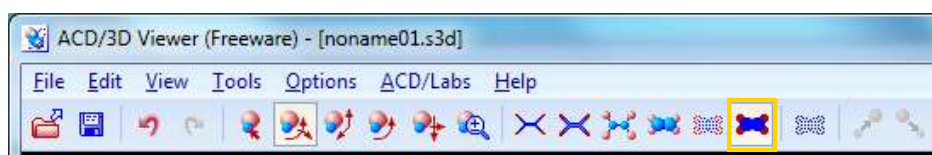


Por ejemplo:

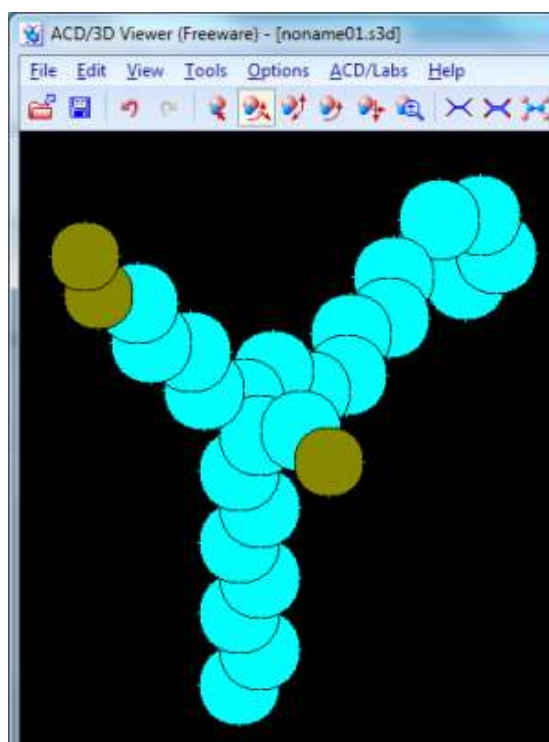




• **Vista Disks.**

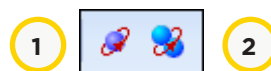


Por ejemplo:



Paso a paso Generar movimiento a la estructura

Dentro de la barra de herramientas se encuentran las opciones:



1. **Auto rotate:** permite ver como la estructura va rotando dentro del espacio de trabajo.

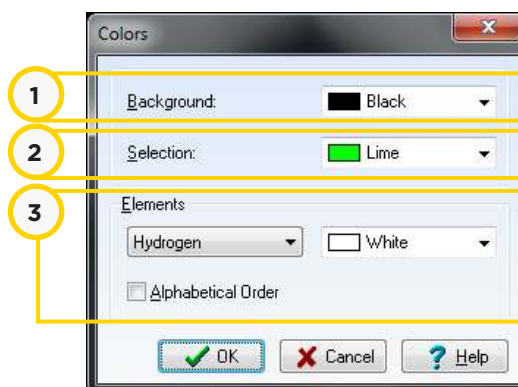
2. **Auto rotate and Change Style:** además de rotar va cambiando la estructura a diferentes formas.

Paso a paso Modificar los colores del entorno 3D

Desde la barra de herramientas seleccionar la opción **Set Colors**.



Se abrirá la siguiente ventana:



1. **Background (Fondo de pantalla):** por defecto es de color negro.

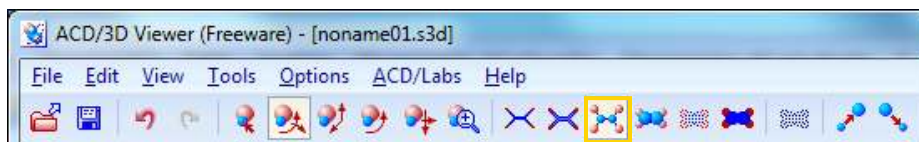
2. **Selection (Selección):** es el color que toman los átomos cuando se los selecciona (por ejemplo para obtener la distancia).

3. **Elements (Elementos):** permite cambiar el color de cada elemento establecido por defecto (debe considerarse no repetir colores para evitar confusiones).



Paso a paso Calcular la distancia entre dos átomos

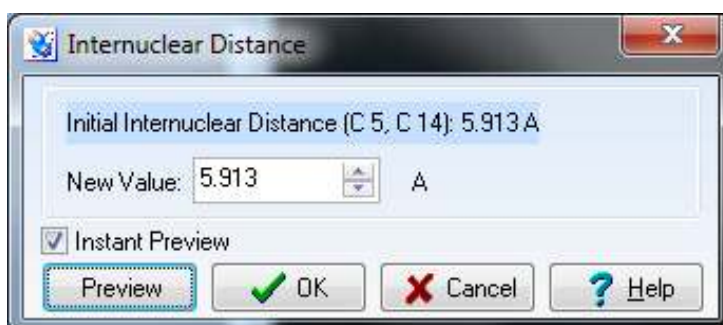
En primer lugar es necesario seleccionar la vista **Balls and Sticks**.



Luego elegir la opción **Bond Length**.

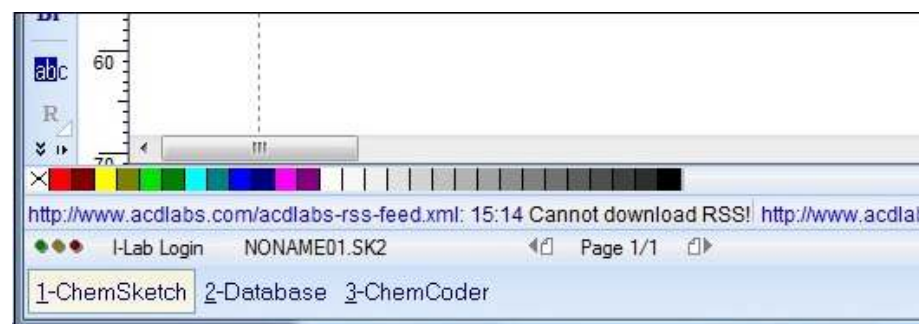


Seleccionar el primer átomo y luego pulsar sobre el segundo átomo. Finalmente una ventana se abrirá con la información solicitada, por ejemplo:



Paso a paso Volver al modo Estructura

En la barra inferior seleccionar la opción **1-ChemSketch** para volver al entorno de trabajo original.



Enlaces de interés

- Sitio oficial:
<http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/>
- Tutorial oficial en inglés:
http://www.acdlabs.com/resources/knowledgebase/manuals_guides/



Contacto:

asistencia.pedagogica.digital@bue.edu.ar



Esta obra se encuentra bajo una Licencia Attribution-NonCommercial-ShareAlike 2.5 Argentina de Creative Commons. Para más información visite <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/2.5/ar/>



