

# Qué se puede hacer en el espacio o ¡Hagamos cuentas!

En este capítulo presentaremos, extensivamente, el trabajo que se puede realizar con las coordenadas de los modelos moleculares, generados por programas del tipo que presentamos en el capítulo anterior.

Comenzaremos por conceptos muy básicos e iremos incrementando la complejidad como una aproximación al concepto de espacio.

## Calculemos distancias

En la vida cotidiana solemos manejarnos con una idea intuitiva de lo que es distancia. Usamos frases tales como “la distancia de la ciudad de La Plata a Mar del Plata es de 350 kilómetros”, “la casa de mi amigo se encuentra a cinco cuadras”. También solemos razonar de la siguiente manera: “si tengo que ir al 2.500 y estoy al 1.500 todavía me faltan 10 cuadras para llegar”, “estamos a la altura del 5.000, pero debía ir al 4.300, o sea que me pasé 7 cuadras”. También nos sucede que si tuviéramos que cruzar una plaza para ir de una esquina hasta su opuesta, sabemos, sin necesidad de ninguna demostración matemática que la forma más rápida y, por lo tanto, el camino más corto es cruzarla en diagonal (Figura 111):▶▶

Todas estas situaciones involucran el concepto de distancia. A partir de ahora presentaremos este concepto definido en un contexto matemático.

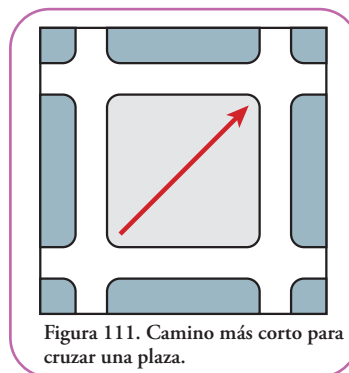


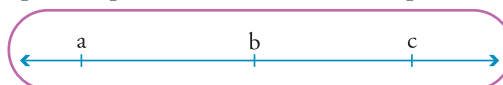
Figura 111. Camino más corto para cruzar una plaza.

## En una dimensión. La línea recta.

La recta numérica es el ordenamiento de los números reales sobre una sucesión infinita de puntos, o sea, el objeto geométrico conocido como recta. Por definición, se extiende indefinidamente a izquierda y derecha de cualquier representación que hagamos de la misma. Se suele convenir llamar origen a la ubicación del número cero. A un lado del origen se ubicarán los números positivos, mayores que cero y, al otro, los negativos, menores que cero.

Es necesario convenir cuál de las semirrectas (son objetos que tienen primer punto, en este caso, el punto llamado origen, pero no último) definidas corresponderá a los números positivos. De ahora en adelante convendremos que, en una representación horizontal de la recta numérica, a derecha del origen, se ubicarán los números positivos y, a izquierda, los negativos.

Esta convención es, sumamente importante ya que nos permite ordenar números por su ubicación geométrica sin necesidad de conocer, exactamente, de cuáles valores se trata.



En la figura del párrafo anterior, no se nos presentan los valores de  $a$ ,  $b$  ni  $c$ . Pero por la convención que explicitamos podemos ordenarlos con seguridad de menor a mayor, o viceversa. Para el primer caso:  $a < b < c$

Es posible operar, con estos números, insisto, por más que no sepamos sus valores. Podemos definir la “distancia” como el resultado de la operación “sustracción” entre dos números cualesquiera. Esta operación tiene dos interpretaciones. Supongamos que queremos calcular la distancia entre  $a$  y  $c$ ; por “sustracción” podemos entender la siguiente operación:  $a - c$  o  $c - a$

Como podemos observar en el esquema de la recta numérica, el número  $c$  está más a la derecha que  $a$ , por lo tanto, podemos decir que la interpretación de “sustracción” entre  $a$  y  $c$  como “ $a - c$ ” nos dará un resultado negativo, mientras que en el caso en que interpretemos “sustracción” como “ $c - a$ ” el resultado será positivo.

El valor absoluto o módulo de ambos resultados es el mismo, es decir que tomamos siempre el valor resultante como si fuera positivo.

### ¿Qué nos indica el signo del resultado?

En el caso de “ $a - c$ ” el resultado es negativo (-), si recorremos esa distancia lo haremos hacia el lado de los valores negativos, de  $c$  hacia  $a$ , en nuestro ejemplo, hacia la izquierda. En el caso de “ $c - a$ ” el resultado es positivo (+), la distancia será recorrida hacia la derecha, de  $a$  hacia  $c$ , es decir hacia el lado de los valores positivos (Figura 112).

Sobre la recta numérica es posible ubicar dos números distintos. Uno será mayor que el otro si este último se ubica a la derecha del primero (Figura 113).

Cuando decimos: “la distancia desde la ciudad de La Plata a Mar del Plata, es de 350 kilómetros” el equivalente matemático se entiende de la siguiente manera: el que habla toma como referencia a la ciudad de La Plata como origen, o sea 0 km y si recorriera un camino directo hacia la otra ciudad contando cada kilómetro que recorre, cuando llegue habrá contado 350 km. Haciendo la operación sustracción:  $350 \text{ km} - 0 \text{ km} = 350 \text{ km}$ .

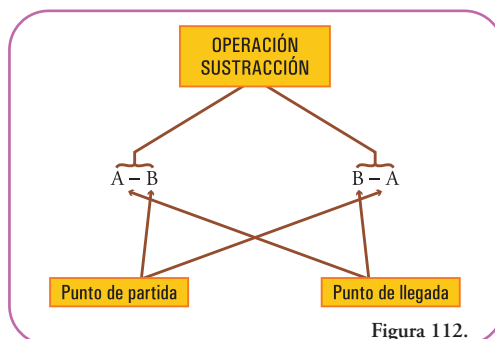


Figura 112.

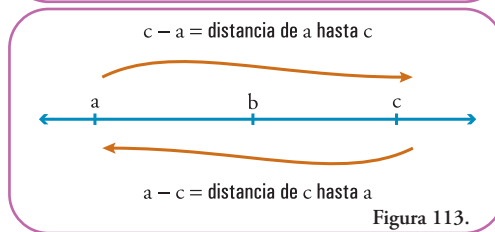


Figura 113.

*Cuando decimos “la casa de mi amigo se encuentra a cinco cuadras” el hablante de la frase se toma como referencia (0 cuadras) y, como en el caso anterior, efectúa la operación:*

*5 cuadras - 0 cuadras = 5 cuadras.*

*En el siguiente caso “si tengo que ir al 2.500 y estoy al 1.500 todavía me faltan 10 cuadras para llegar”, nos informan que quien dice la frase se encuentra en la altura 1.500 y esa será su referencia, o sea, 15 cuadras desde la altura 0. Si debe ir al 2.500, debe ir a la cuadra 25 desde la*

altura 0. Haciendo la operación matemática sustracción:

$25 \text{ cuerdas} - 15 \text{ cuerdas} = 10 \text{ cuerdas}$ .

Por último, en la frase “estamos a la altura del 5.000, pero debíamos ir al 4.300, o sea que nos pasamos 7 cuerdas”, entendemos que se encuentran a 50 cuerdas de la altura 0 y que su destino era la cuerda 43 respecto de la altura 0. Si aplicamos la operación sustracción:

$43 \text{ cuerdas} - 50 \text{ cuerdas} = -7 \text{ cuerdas}$ . Este signo negativo (-) implica haber restado un número mayor (50) que la referencia (43) y por lo tanto el destino está antes que la referencia.

Es importante notar que la operación sustracción implica siempre realizar la operación como “punto de llegada” menos “punto de partida”.

Esta operación tiene un carácter propio para anotarla, es la letra griega mayúscula delta ( $\Delta$ ), a esta letra, cumpliendo esta función, se la llama “operador delta”. Dada cualquier variable ( $v$ ), si le aplicamos el operador delta ( $\Delta$ ), o sea,  $\Delta v$  implica realizar la operación sustracción entre el estado final y el estado de referencia de la variable, o sea  $v_{\text{final}} - v_{\text{referencia}}$ .

Para abreviar la notación se suele escribir:  $\Delta v = v_f - v_0$ . Vale aclarar que la referencia es elegida, arbitrariamente, por quien aplica este operador. Y vale la pena decir que las soluciones a muchos problemas consisten en elegir, adecuadamente, las referencias.

Aumentemos un poco el nivel de complejidad en el cálculo de distancias. Agregaremos una dimensión perpendicular a la primera. Esta situación constituye un plano.

## En dos dimensiones. El plano.

En el caso de una dimensión, la identificación de un punto en la recta numérica se realiza al mencionar cuál número le corresponde a dicho punto. En el caso de un plano, la identificación de un punto perteneciente a ese plano se realiza informando dos números, uno por cada recta o eje. Por costumbre suele llamarse a la recta o eje horizontal “eje de las abscisas” o “eje de la variable  $x$ ” y, a la recta o eje vertical, “eje de las ordenadas” o “eje de la variable  $y$ ” (Figura 114).

Existe un único punto que pertenece a ambos ejes perpendiculares, este punto se lo suele nombrar como punto de origen. Los números que lo identifican son el 0, 0. Este par de números se llama par ordenado, y se suele escribir “(0,0)”, el primer número se lo suele mencionar como primera componente y, al segundo, como segunda componente. Se entiende a la primera componente como el valor de un punto en el eje  $x$  a partir del cual trazaremos una recta imaginaria perpendicular a dicho eje. Análogamente, con la segunda componente, trazaremos una recta perpendicular al eje  $y$  que pase por el punto identificado en esta componente. La intersección de ambas rectas identificará a nuestro punto de interés (Figura 115).



Figura 114. Nomenclatura de un sistema de coordenadas planar ortogonal.

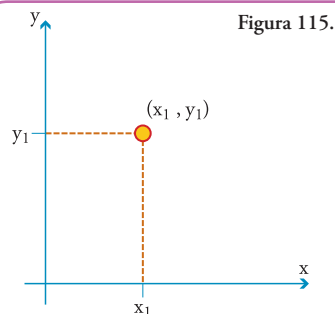


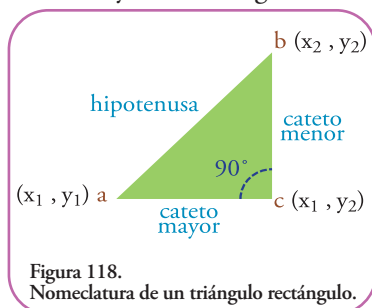
Figura 115.

Si ubicamos dos puntos en este plano podemos calcular la distancia (señalada con una flecha) entre ellos (Figura 116).

Nuevamente, usaremos el operador delta ( $\Delta$ ) para obtener la distancia, pero debemos utilizar un nuevo concepto. Este concepto es el Teorema de Pitágoras. Este teorema se puede enunciar así: para todo triángulo rectángulo se cumple que la distancia de la hipotenusa al cuadrado es igual a la suma de la distancia de sus catetos al cuadrado.

En fórmulas:  $H^2 = a^2 + b^2$

Donde “H” representa la longitud de la hipotenusa y “a” y “b” las longitudes de los catetos.



En el gráfico podemos analizar el siguiente triángulo (Figura 117):

En él podemos identificar sus lados (Figura 118).

De acuerdo al Teorema de Pitágoras si sabemos dos de las tres distancias podemos averiguar la que desconocemos. En particular, nosotros tenemos información de los pares ordenados que identifican a los vértices *a* y *b*, son

$(x_1, y_1)$  y  $(x_2, y_2)$ , respectivamente.

La distancia que deseamos averiguar es la que existe entre “a” y “b”, ésta se corresponde con la longitud de la hipotenusa del triángulo que definen “abc”.

Procederemos de la siguiente manera: obtendremos las longitudes de “a” a “c” y de “b” a “c”, para luego aplicar el Teorema de Pitágoras a las longitudes de los catetos “ac” y “bc”.

Para averiguar las longitudes de los catetos procedemos aplicando el operador delta ( $\Delta$ ) sobre cada eje. En definitiva, cada eje define una dimensión y la distancia la calculamos realizando la sustracción como la definimos anteriormente para una dimensión.

#### Para el eje x

La distancia entre los vértices “a” y “c” es igual a la longitud del cateto “ac” que es igual a la componente en *x* del vértice “c” menos la componente en *x* del vértice “a”.

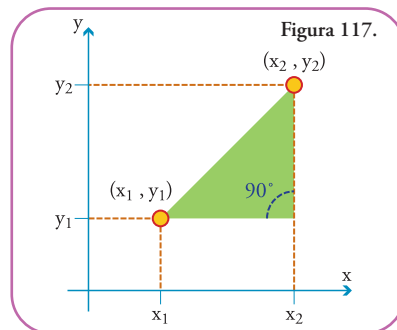
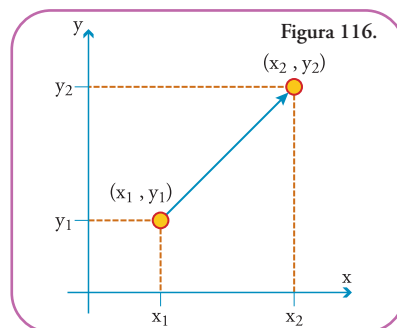
Nótese que la componente en *x* de “c” es la misma que la de “b”.

Con signos matemáticos tenemos:  $ac = \Delta x = x_2 - x_1$

#### Para el eje y

Distancia entre los vértices “b” y “c” es igual a la longitud del cateto “bc” que es igual a la componente en *y* de “c” menos la componente en *y* de “b”.

Como la componente en *y* de “b” es la misma que la de “c”, con signos matemáticos



tenemos:  $bc = \Delta y = y_2 - y_1$

En el gráfico (Figura 119):

Con estos datos podemos plantear el Teorema de Pitágoras para averiguar la distancia entre  $a$  y  $b$  (la llamaremos  $H$ , ya que coincide con la hipotenusa del triángulo planteado):

$$H^2 = \Delta x^2 + \Delta y^2 = (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2$$

Despejando  $H$  tenemos una expresión en la cual conocemos todos los datos:

$$H = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}$$

Recordemos que la notación matemática utilizada, es decir, letras minúsculas para variables, serán valores numéricos para el caso particular que necesitemos resolver.

Ahora tenemos una herramienta muy útil para cuantificar la situación descrita en el recuadro de la derecha.

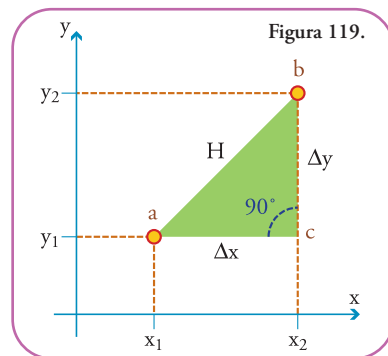
Si no cruzáramos la plaza en diagonal y camináramos por las veredas, claramente, recorreríamos dos cuadras, si analizamos el triángulo que forman el camino diagonal y el camino por la vereda, tenemos (Figura 120):

$$\begin{aligned} D^2 &= 1^2 + 1^2 \\ D &= \sqrt{2} \\ &= 1,414 \end{aligned}$$

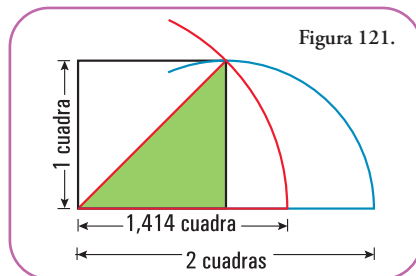
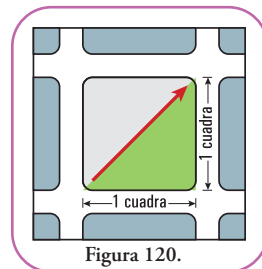
Este resultado requiere ser correctamente interpretado, el camino largo vale 2 cuadras, el camino corto vale 1,414 cuadras. Geométricamente, se puede observar que si prolongamos los arcos hasta que el radio de la circunferencia que describe se encuentre horizontal tenemos una forma de comparar las distancias calculadas (Figura 121):

Esto quiere decir que el camino corto nos ahorra más de media cuadra de caminata y unos minutos, si estamos apurados.

Esta situación puede aún complejizarse un poquito más. Si agregamos un eje perpendicular al plano obtenemos un sistema de referencia para comparar posiciones en el espacio.

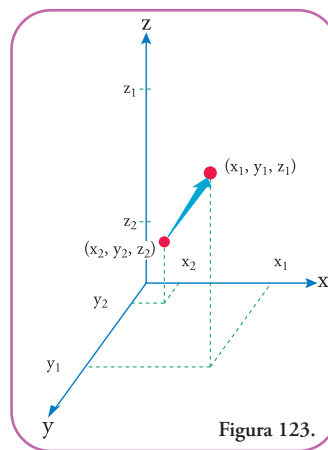
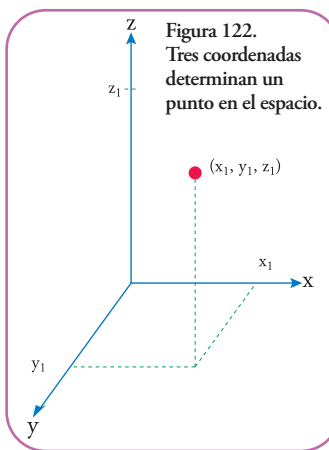


*Analizamos a la luz de estos resultados la situación comentada al principio del apartado: “Si tuviéramos que cruzar una plaza para ir de una esquina hasta su opuesta sabemos que el camino más corto es cruzarla en diagonal”.*



## En tres dimensiones. El espacio.

Aquí está el resultado de agregar un eje perpendicular al plano definido por los ejes  $x$  e  $y$ . La ubicación de un punto en el espacio está dado por tres valores, a la ubicación en el plano se le agrega una coordenada más que le asigna su posición por encima o por debajo de dicho plano. Ya vimos en el capítulo anterior las diferentes alternativas que suceden cuando cambiamos los signos de cada componente (Figura 122).



### ¿Cómo calculamos la distancia entre dos puntos en el espacio?

Procederemos como una extensión del método que presentamos para calcular la distancia en el plano (Figura 123).

Podemos definir un triángulo sobre el plano que definen los ejes  $x$  e  $y$  (Figura 124).

Calculamos la hipotenusa ( $H$ ):

$$H^2 = \Delta x^2 + \Delta y^2$$

$$H = \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}$$

Esta hipotenusa se convierte en un cateto del triángulo que definimos en la figura 125.

Calculamos la hipotenusa que corresponde a la distancia entre los puntos que deseamos averiguar ( $D$ ):

$$D^2 = H^2 + \Delta z^2$$

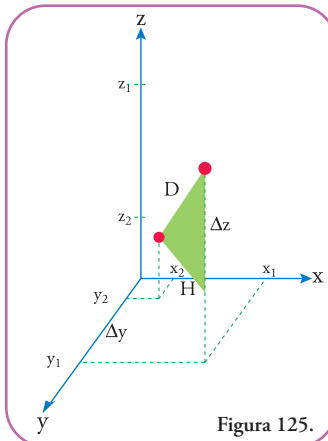
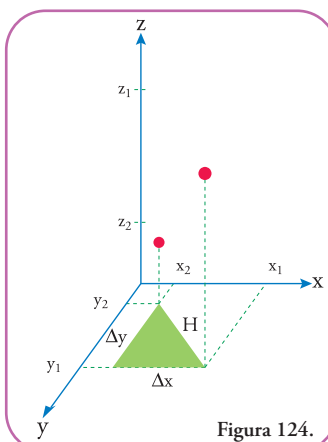
$$D = \sqrt{H^2 + \Delta z^2}$$

Si reemplazamos  $H^2$  tenemos:

$$D = \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2}$$

$$D = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}$$

Este resultado es muy útil ya que conocemos todos los números para obtener la distancia entre dos puntos en el espacio. Esto



nos servirá para obtener distancia entre átomos de una molécula representada en tres dimensiones y, por otra parte, cualquier programa de representación molecular, cuando calcula una distancia entre átomos, realiza esta cuenta utilizando las coordenadas proporcionadas en el modelo molecular. Entonces hemos aprendido algo del interior de estos programas tan populares y por lo tanto tenemos herramientas para verificar si los resultados son correctos.

Esto es algo que no está nada mal para esta época en la que las cosas son tan complejas y todo viene ya hecho y listo para usar, aunque el usuario no sepa muy bien de qué se trata el proceso... y, por lo tanto, no tiene parámetros para decidir si un resultado es correcto o no.

## Traslación

Podría ser de nuestro interés mover un modelo molecular en el espacio definido por los tres ejes de coordenadas. Esta operación se llama traslación.

La traslación nos permite reconstruir el modelo molecular en otra ubicación (distinta a la original dada por el programa) con respecto al origen de coordenadas, pero sin cambiar la orientación con respecto a los ejes. Esto implica que todos los puntos sufrirán el mismo desplazamiento respecto de cada uno de los ejes que forman el marco de referencia. Además de conservarse la orientación con respecto a los ejes, también se conserva la distancia entre las posiciones de los átomos. ■►

Como vimos en los apartados anteriores debemos incrementar (o decrementar) la misma diferencia ( $\Delta$ ) para todas las coordenadas en ese eje. Habrá una diferencia de posición, una ubicación final menos una ubicación inicial con respecto a cada eje, pero será la misma para todas las coordenadas referidas a un eje. Se verá más claramente en la **figura 126**.

Se puede observar que los incrementos en las coordenadas de cada punto son las mismas, por lo tanto, la forma del modelo se conserva.

A continuación realizaremos una operación de modificación de un modelo molecular con mucho detalle. Modificaremos sólo algunas coordenadas.

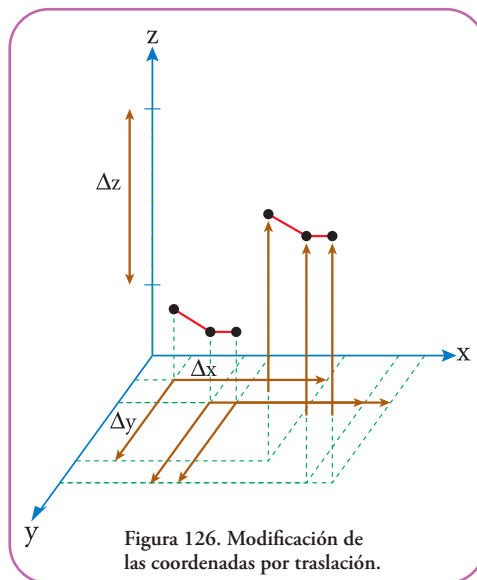


Figura 126. Modificación de las coordenadas por traslación.

## Rotación a lo largo de un enlace

Una de las funciones más importantes (sino es la fundamental) de los programas que manejan modelos moleculares, es posibilitar la alteración de la geometría de una representación molecular. Esta alteración no debe ser cualquiera sino que tiene que tener sentido químico.

Qué quiere decir esto, bien, que las modificaciones de la geometría no deben violar el comportamiento obser-

*Por ejemplo, si se representa un sistema plano resonante (estructuras que alternan enlaces dobles con simples), el programa no debe permitir que los átomos del sistema se aparten del plano que forman. O si lo permite debe ser realizado manualmente, por sola cuenta del usuario. Otra función que no debe realizar es acortar o alargar los enlaces.*



vado de los distintos tipos de enlaces entre los átomos.

La función que mayor número de combinaciones permite es la rotación a lo largo de enlaces simples.

A continuación presentaremos el cálculo de una rotación en el espacio.

Supongamos que deseamos rotar un cierto ángulo  $\gamma$  un enlace a lo largo de su enlace contiguo. Esta situación puede presentarse si deseamos estudiar la conformación del fenol ( $C_6H_6O$ ) en función de alguna propiedad de interés, por ejemplo su posibilidad de formar puente de hidrógeno con otra molécula.

Si vemos una representación del fenol con diagrama de líneas tenemos (Figura 127):

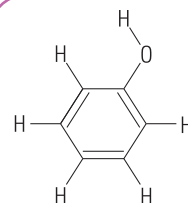


Figura 127. Diagrama de líneas del fenol.

Las líneas que representan enlaces dobles no permiten la rotación de los átomos unidos. En el caso de los hidrógenos, estos están unidos a los carbonos por enlaces simples, pero sus rotaciones son indistinguibles ya que no establecen, ni pueden establecer, nuevos enlaces con otros átomos. Se dice que son isotrópicos para la rotación a lo largo del enlace con el carbono. Es algo así como cuando una bola de billar nueva y lisa gira sobre su propio eje y con el número apoyado sobre el paño, es difícil advertir si está girando o en reposo (sin intentar alejarla de su posición), salvo que detectemos alguna imperfección en su superficie y, solamente, observando si ésta se mueve o no, podremos decir si la bola en su conjunto rota o no. Si su superficie fuera perfectamente pulida, no podríamos distinguir las distintas posiciones que ofrece la bola al rotar, tal como sucede con los hidrógenos del fenol.

Totalmente distinta es la situación del oxígeno. Éste está unido a un hidrógeno (forma el grupo funcional alcohol), este grupo no es *isotrópico*, es decir, es *anisotrópico* para la rotación sobre el eje del enlace carbono oxígeno. Quiere decir que las distintas posiciones por las que atraviesa en un giro son distinguibles. Y si son distinguibles podemos medirlas. En este caso, medir las distintas posiciones, implica que podamos asignar un ángulo propio, éste valdrá  $0^\circ$  o más, pero siempre menos que  $360^\circ$ . Si fuera exactamente  $360^\circ$ , su posición sería indistinguible de la posición de  $0^\circ$  y por lo tanto no sería útil usar dos nombres distintos para la misma posición. Lo mismo sucede si usáramos un valor mayor que  $360^\circ$  ya que podríamos restarle  $360^\circ$  tantas veces como fuera necesario para obtener un valor que fuera  $0^\circ$  o mayor, pero menor de  $360^\circ$ , para lo cual ya habíamos asignado un ángulo.

Si analizamos la representación de barras que nos ofrece el programa ACD/3D Viewer (Freeware) observamos lo siguiente (Figura 128):

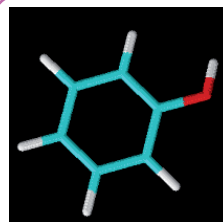


Figura 128.

Se presenta, a la totalidad de la molécula, como la unión de tramos de una barra de un cierto diámetro, idéntico para todos los enlaces y se distinguen los átomos involucrados en el enlace pintando, cada mitad de la barra con el color que corresponde al átomo que se encuentra en cada punta<sup>1</sup>. En este caso la convención de colores es blanco: hidrógeno, celeste: carbono y rojo: oxígeno.

Si rotamos a lo largo del eje vertical  $90^\circ$  hacia la izquierda, en esta representación observamos lo siguiente (Figura 129):



Figura 129.

<sup>1</sup> No reproduce los radios covalentes, si fuera así la porción corresponde al hidrógeno, sería, visiblemente, menor que la que corresponde al carbono, aproximadamente, un tercio blanco para el hidrógeno y dos tercios celeste para el carbono, ya que los radios covalentes son 37 pm y 77 pm, respectivamente.



Todos los átomos se encuentran en un mismo plano. El oxígeno (rojo) y el hidrógeno (blanco), unido a éste presentan una posición a la que asignaremos, arbitrariamente, el ángulo  $0^\circ$ .

Ahora hacemos girar el enlace hidrógeno-oxígeno, un cierto ángulo ( $\alpha$ ) en el sentido de las agujas del reloj, obtenemos (Figura 130):

Si hacemos un esquema de todo el espacio posible que puede ocupar el enlace hidrógeno-oxígeno, tendremos un cono (en verde); en particular, en el caso del fenol, éste es el único enlace que puede rotar. El eje de rotación del enlace hidrógeno-oxígeno (Figura 131) es el eje oxígeno-carbono, en línea gris punteada; en esta representación del fenol hemos prescindido de indicar los hidrógenos unidos a los carbonos que forman el anillo (carbonos aromáticos).

Si unimos cada posición que puede ocupar el hidrógeno unido al oxígeno, obtenemos un círculo que determina la base de un cono. Los átomos de carbono (celeste) y el átomo de oxígeno (rojo) determinan un plano (amarillo) (Figura 132).

El hidrógeno mismo, junto con el oxígeno (rojo), y el carbono contiguo a éste (celeste) determinan un plano (azul).

Estos dos planos, amarillo y azul, que se intersectan, tienen en común una recta. Esta recta contiene al enlace entre el carbono y el oxígeno. El ángulo que forman estos dos planos se llama ángulo diedro que es exactamente el tipo de ángulo que es  $\alpha$  (Figura 132).

Volvamos a la posición inicial. Es posible calcular la posición final del hidrógeno luego de una variación arbitraria del ángulo diedro (ahora lo llamaremos  $\gamma$ ) a partir de conocer las coordenadas de los átomos que determinan los planos que definen este ángulo.

Supongamos un caso sencillo, el ángulo  $\gamma$  vale  $90^\circ$  y el origen de nuestro sistema de referencia se encuentra situado en el centro del círculo que definen todas las posiciones posibles del hidrógeno (Figura 133).

Observemos varias cosas de la figura que nos ayudarán a entender la situación. Supongamos que elegimos ubicar un sistema de coordenadas tal como se observa en el panel de la izquierda.

En el esquema del centro tenemos al hidrógeno en la posición inicial, el eje  $z$  se encuentra perpendicular a la hoja y saliendo de ésta, lo que se representa como un círculo con un punto, representando una punta de flecha apuntando hacia nosotros.

En esta situación las coordenadas del hidrógeno son, en el eje  $x$ : 0 ( $x_i = 0$ ), en el eje  $y$ , supongamos un valor arbitrario de 2 ( $y_i = 2$ ), en el eje  $z$ : 0 ( $z_i = 0$ ), ya que no tiene elevación por encima del plano que definen los ejes  $x$  e  $y$ .

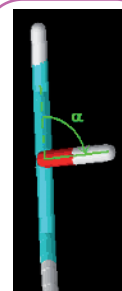


Figura 130.

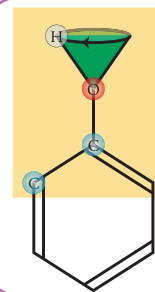


Figura 131.

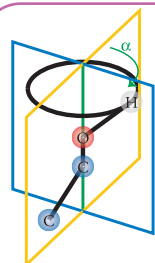
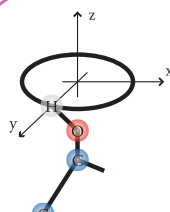
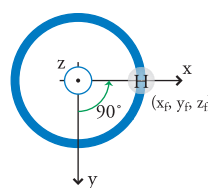


Figura 132.



Situación Inicial



Situación final

Figura 133.

Los valores tienen unidades de longitud pero, por una cuestión de simplificar la notación, hemos obviado especificarlas.

### ¿Cuáles serán las coordenadas de la situación final?

Empecemos por lo más sencillo, no se elevó ni descendió con respecto al plano, por lo tanto, su coordenada en el eje  $z$  no cambió ( $z_f = 0$ ). Tanto las coordenadas con respecto a los ejes  $x$  e  $y$  variaron. Con respecto al eje  $y$ , ahora se encuentra en el origen, es decir que  $y_f = 0$ . Con respecto al eje  $x$ , ahora se ha desplazado. La distancia del átomo de hidrógeno al origen de coordenadas, es el radio del círculo (línea que une el punto central con un punto de la circunferencia), como en la situación inicial ese radio estaba representado por la coordenada  $y_i$ , o sea 2, la distancia al centro de la circunferencia no varió (ya que seguimos ubicados sobre la circunferencia), o sea que  $x_f = 2$ .

Supongamos que ahora el hidrógeno rota un ángulo ( $\gamma$ ) inferior a  $90^\circ$ . Desarrollaremos las fórmulas para cualquier valor de  $\gamma$  y, luego, resolveremos un caso particular con los resultados obtenidos de la resolución general.

En esta instancia no podemos obtener las coordenadas en  $x$  e  $y$  de forma inmediata. Debemos definir un triángulo rectángulo en esta situación (Figura 134).

Observemos en detalle el triángulo elegido (Figura 135).

Analicemos los vértices, en particular el  $(0, 0, 0)$  representa el origen de coordenadas de los ejes  $x$ ,  $y$ ,  $z$ . Noten que la tercera coordenada de los tres vértices es 0 ya que representa la coordenada en  $z$  y todos los puntos se encuentran en el plano que definen los ejes  $x$  e  $y$ , es decir, ni por encima, ni por debajo.

Este triángulo al tener un ángulo recto permite la aplicación de las funciones trigonométricas para obtener las longitudes de los catetos. Estas longitudes están relacionadas con las coordenadas que necesitamos averiguar por medio de la resta del origen de coordenadas. A propósito, elegimos ubicar el origen de coordenadas de forma tal que la resta sea un valor menos 0, entonces:

$$\text{Longitud cateto menor} = y_f - 0$$

$$\text{Longitud cateto mayor} = x_f - 0$$

Recordemos que habíamos elegido, arbitrariamente, la longitud de un radio igual a 2. La hipotenusa representa un radio del círculo definido por todas las posiciones posibles del hidrógeno, por lo tanto, su longitud es conocida y vale siempre 2.

Las longitudes de los catetos se relacionan con el ángulo  $\gamma$  por medio de las funciones trigonométricas seno y coseno.

Si aplicamos la función seno (sen) al ángulo  $\gamma$  tenemos:

$$\text{sen}(\gamma) = \text{cateto opuesto a } \gamma / \text{hipotenusa}$$

El cateto opuesto a  $\gamma$  es el cateto mayor:

$$\text{sen}(\gamma) = \text{cateto mayor} / \text{hipotenusa}$$

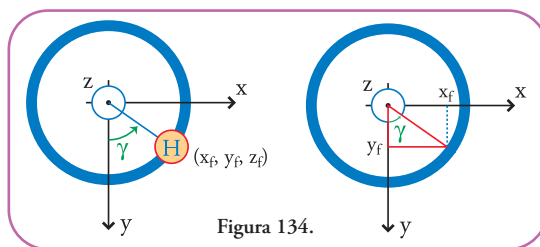


Figura 134.

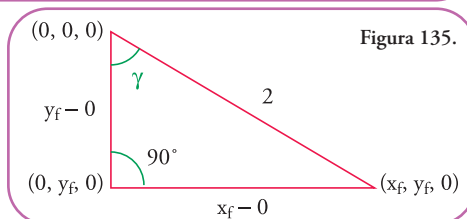


Figura 135.

*Para refrescar la definición de estas funciones puede consultar el apéndice al final del libro.*

Si reemplazamos las longitudes por las definiciones en función de las coordenadas tenemos:

$$\text{sen}(\gamma) = (x_f - 0) / 2$$

La única variable desconocida es  $x_f$ , ya que dijimos que  $\gamma$  será conocido en una situación particular, por lo tanto podemos despejarla:

$$\begin{aligned}\text{sen}(\gamma) * 2 &= x_f - 0 \\ \text{sen}(\gamma) * 2 + 0 &= x_f \\ \text{sen}(\gamma) * 2 &= x_f\end{aligned}$$

Despejemos, por la aplicación ahora de la función coseno, la coordenada  $y_f$ . Aplicamos la función coseno (cos) al ángulo  $\gamma$  y tenemos:

$$\cos(\gamma) = \text{cateto adyacente a } \gamma / \text{hipotenusa}$$

El cateto adyacente a  $\gamma$  es el cateto menor:

$$\cos(\gamma) = \text{cateto menor} / \text{hipotenusa}$$

Si reemplazamos las longitudes por las definiciones en función de las coordenadas:

$$\cos(\gamma) = (y_f - 0) / 2$$

La única variable desconocida es  $y_f$  y podemos despejarla:

$$\begin{aligned}\cos(\gamma) * 2 &= y_f - 0 \\ \cos(\gamma) * 2 + 0 &= y_f \\ \cos(\gamma) * 2 &= y_f\end{aligned}$$

Nuestro resultado importante es el siguiente, tenemos una forma general de ubicar al hidrógeno, para cualquier ángulo que deseemos (Figura 136). ►►

Elijamos un valor para  $\gamma$ , supongamos  $35^\circ$ , aplicamos las fórmulas que hemos averiguados y obtenemos que las coordenadas nuevas son:

$$\begin{aligned}x_f &= 2 \text{ sen}(35^\circ) = 2 \cdot 0,5736 = 1,1472 \\ y_f &= 2 \cos(35^\circ) = 2 \cdot 0,8192 = 1,6384\end{aligned}$$

Es importante señalar que estos valores pueden corroborarse aplicando el Teorema de Pitágoras:

$$(\text{Hipotenusa})^2 = (\text{cateto mayor})^2 + (\text{cateto menor})^2$$

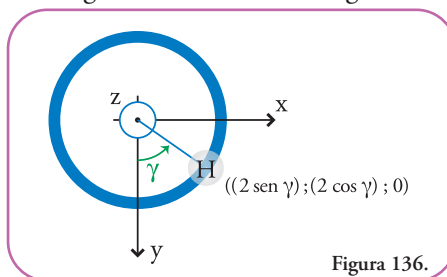


Figura 136.

Sabemos que la hipotenusa vale 2, entonces:

$$\begin{aligned} 2^2 &= (x_f)^2 + (y_f)^2 \\ 2^2 &= (1,1472)^2 + (1,6384)^2 \\ 4 &= 1,3161 + 2,6844 \\ 4 &\approx 4,0005 \end{aligned}$$

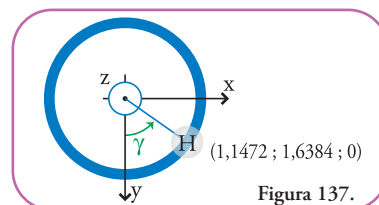


Figura 137.

Hemos chequeado que las soluciones son las correctas, por lo tanto, luego de la rotación de  $35^\circ$  las coordenadas del hidrógeno en el espacio son: (1,1472; 1,6384; 0) (Figura 137)

Vale aclarar el signo de las coordenadas según el valor del ángulo:

- 1) Si hubiéramos elegido un ángulo entre  $90^\circ$  y  $180^\circ$ :  
las coordenadas finales hubieran sido (Figura 138):

$$x_f > 0, y_f < 0 \text{ y como siempre } z_f = 0.$$

- 2) Si hubiéramos elegido un ángulo entre  $180^\circ$  y  $270^\circ$ :  
las coordenadas finales hubieran sido (Figura 139):

$$x_f < 0, y_f < 0 \text{ y como siempre } z_f = 0.$$

- 3) Si hubiéramos elegido un ángulo entre  $270^\circ$  y  $360^\circ$ :  
las coordenadas finales hubieran sido (Figura 140):

$$x_f < 0, y_f > 0 \text{ y como siempre } z_f = 0.$$

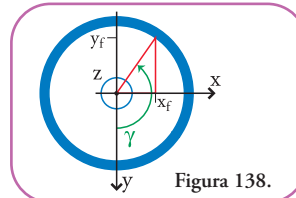


Figura 138.

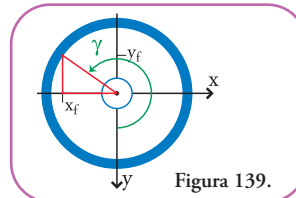


Figura 139.

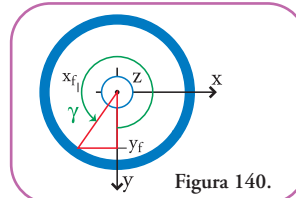


Figura 140.

*Hemos visto con detalle las situaciones en las cuales la variación del ángulo diedro produce una variación en la posición de un átomo (analizamos en particular el caso del hidrógeno del fenol). Resolvimos el problema en general y luego describimos un caso particular elegido, arbitrariamente. Finalmente analizamos la variación de los signos de las coordenadas que varían (coordenadas  $x$  e  $y$ ) según la amplitud del ángulo diedro. El caso que elegimos para resolver fue uno en el cual todas las posiciones que puede ocupar el átomo de hidrógeno están en un plano (el definido por los ejes  $x$  e  $y$ ), como consecuencia de esto pudimos prescindir en nuestros cálculos de considerar la coordenada  $z$ .*

Este caso es sumamente improbable en los modelos generados por los programas que presentamos en los capítulos anteriores. Por lo tanto debemos aprender a tratar situaciones en las cuales intervengan las tres coordenadas. Retomemos el caso del fenol, esta vez en una situación más realista, es decir, el sistema de coordenadas no podemos moverlo, está dado y los valores iniciales de las coordenadas ( $x_i, y_i, z_i$ ) son conocidos y mayores que cero (si fueran menores que cero el procedimiento sería exactamente el mismo).

Como antes, podemos reconocer todas las posiciones que puede ocupar el hidrógeno según sea el ángulo diedro. Sus coordenadas iniciales son  $x_i, y_i, z_i$ . Los valores de estas coordenadas variarán de forma no tan sencilla como antes, según sea el ángulo diedro que elijamos. Justamente, esta re-

lación es la que queremos hallar, es una relación muy importante ya que es un resultado general y que valdrá para cualquier sistema de referencia (Figura 141). ▮►

Comencemos por comprender esta representación de nuestra molécula de interés, el fenol.

Concentrémonos en los átomos del grupo oxidrilo (-OH), observemos que el oxígeno está más cerca de nosotros que el hidrógeno. Si observamos, detenidamente, al carbono unido al oxígeno podemos darnos cuenta que éste está más atrás que ambos. Podemos simplificar nuestra representación usando conos para representar los enlaces y darnos una impresión de profundidad. Sólo representaremos la parte de la molécula que nos interesa, es decir el grupo OH y el carbono al cual está unido. Recordemos que el código de colores nos indica que, en celeste se representa al carbono, en rojo al oxígeno y en blanco al hidrógeno (Figura 142). ▮►

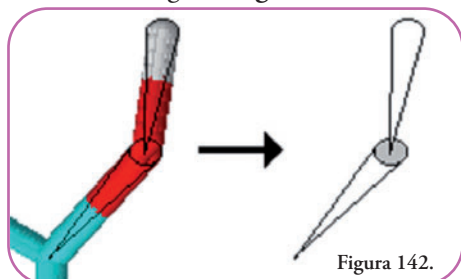


Figura 142.

Con estos tres átomos, solamente representados, nuestro problema se solucionará usando 9 coordenadas (tres por cada punto), un ángulo ( $\gamma$ ), las funciones trigonométricas (seno, coseno y tangente) y el Teorema de Pitágoras. Nuestra solución buscada son las coordenadas finales ( $x_f, y_f, z_f$ ) del hidrógeno, luego de rotarlo un ángulo diedro  $\gamma$  (a lo largo del eje que forman el oxígeno y el carbono) (Figura 143). ▮►

Como realizamos anteriormente, resolveremos el problema en general y luego aplicaremos esta solución a un caso particular a modo de ejemplo. Entonces no olvidemos

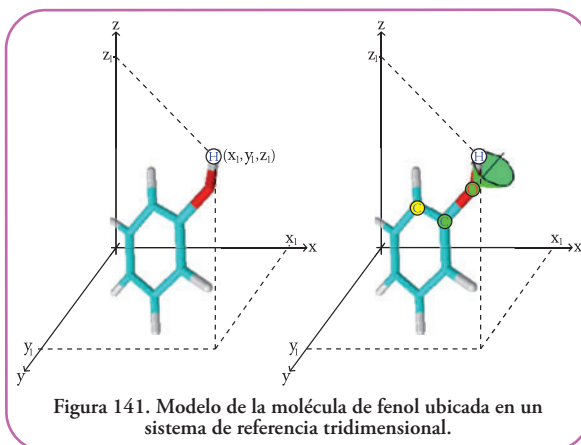


Figura 141. Modelo de la molécula de fenol ubicada en un sistema de referencia tridimensional.

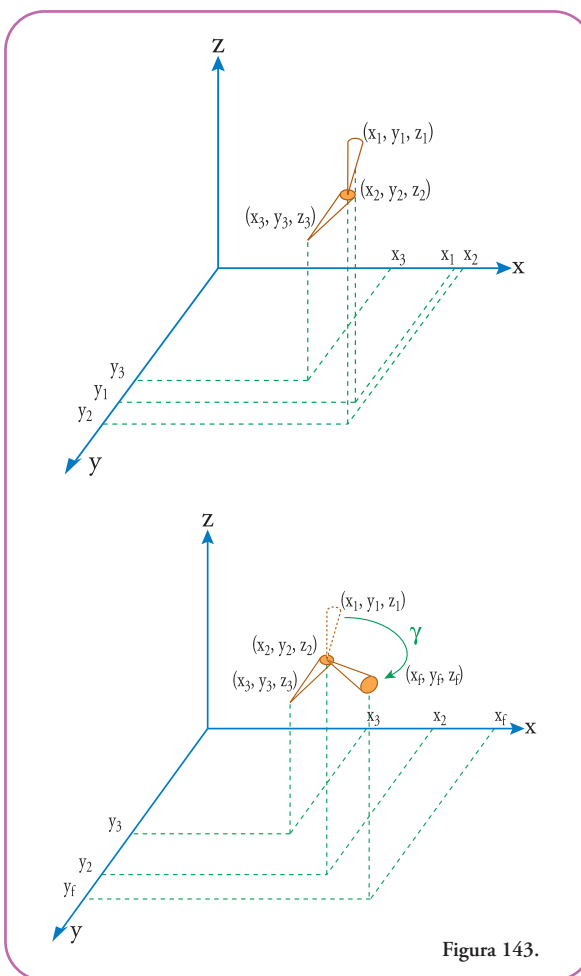


Figura 143.

que, por una cuestión de simplicidad en la notación, el subíndice 1 indica que la magnitud a la que se aplica está referida al hidrógeno, por ejemplo  $x_1$  se entiende que es la coordenada en el eje  $x$  del hidrógeno. El subíndice 2 está referido al oxígeno, o sea, que  $y_2$  indica la coordenada en el eje  $y$  del oxígeno. Por último, el subíndice 3 está referido al carbono, entonces  $z_3$  quiere decir que se trata de la coordenada en el eje  $z$  del átomo de carbono.

El subíndice  $f$  lo usaremos, como ya mencionamos, para referir al hidrógeno luego de haberlo rotado.

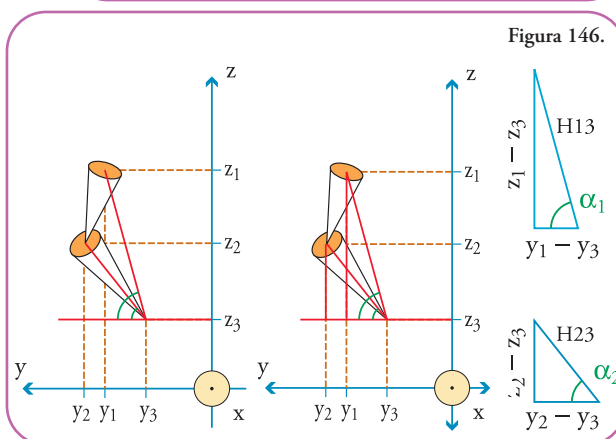
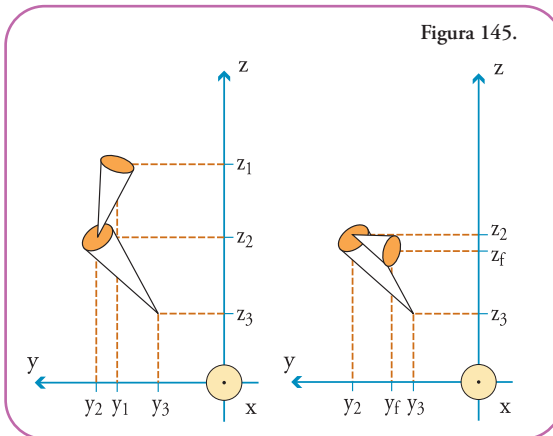
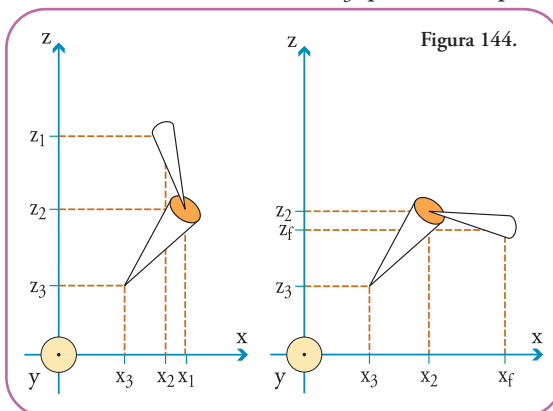
La solución de este problema no es, ni más ni menos, que observar dónde hay triángulos rectángulos de los cuales conozcamos suficiente información como para obtener sus lados y ángulos con las funciones trigonométricas (seno, coseno y tangente) o el Teorema de Pitágoras.

Observemos a lo largo del eje  $y$ , representado ahora como una punta de flecha que apunta hacia nosotros (un círculo con un punto). Por una cuestión de espacio no hemos respetado la escala de la figura anterior, pero esto no altera en absoluto la relación entre las coordenadas.

En este tipo de observaciones perdemos la noción de profundidad del eje  $y$ , pero ganamos precisión en la observación de las coordenadas en los otros dos ejes ( $x$ ,  $y$ ,  $z$ ) (Figura 144).

Aquí tenemos las vistas de las representaciones de los enlaces a lo largo de los ejes  $y$  y  $z$  (Figura 145).

A partir de estas representaciones aplicaremos funciones trigonométricas y transformaremos estas representaciones en una situación más sencilla que podemos resolver. Lo que haremos es ubicar al enlace carbono-oxígeno perpendicular al eje  $z$ , de forma tal, que cualquier rotación que hagamos del hidrógeno nos quede en un mismo plano. Esta situación ya la resolvimos unas páginas atrás, por lo tanto, podremos obtener las coordenadas luego de la rotación. Para finalizar, reubicaremos el enlace carbono-oxígeno en su incli-



nación original y tendremos las coordenadas finales del hidrógeno ( $x_f, y_f, z_f$ ).

Esta operación de poner el enlace carbono-oxígeno paralelo al eje  $z$  tiene dos etapas: primero operaremos con respecto al eje  $x$  y, luego, con respecto al eje  $y$ .

Con respecto al eje  $x$  trazamos un eje auxiliar paralelo que pase por la coordenada del carbono ( $x_3, y_3, z_3$ ), éste no lo veremos extenderse ya que apunta hacia nosotros. Trazamos un eje perpendicular a  $z$  que pase por la misma coordenada ( $x_3, y_3, z_3$ ) y sea paralelo al eje  $x$  (Figura 146).

Dado que nosotros conocemos todas las coordenadas podemos calcular las longitudes de todos los catetos de los triángulos definidos. Así, si usamos el Teorema de Pitágoras podemos obtener las hipotenusas H23 y H13:

$$\begin{aligned} H23 &= ((y_2 - y_3)^2 + (z_2 - z_3)^2)^{1/2} \\ H13 &= ((y_1 - y_3)^2 + (z_1 - z_3)^2)^{1/2} \end{aligned}$$

Para la siguiente operación necesitaremos los ángulos  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$ . Los obtendremos utilizando cualquiera de las funciones trigonométricas ya que conocemos las longitudes de los catetos y las hipotenusas. Elijo plantear la tangente para cada ángulo:

Para  $\alpha_1$ :

$$\begin{aligned} \text{tg } (\alpha_1) &= \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente} \\ \text{tg } (\alpha_1) &= (z_1 - z_3) / (y_1 - y_3) \\ \alpha_1 &= \text{arctg } ((z_1 - z_3) / (y_1 - y_3)) \end{aligned}$$

Para  $\alpha_2$ :

$$\begin{aligned} \text{tg } (\alpha_2) &= \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente} \\ \text{tg } (\alpha_2) &= (z_2 - z_3) / (y_2 - y_3) \\ \alpha_2 &= \text{arctg } ((z_2 - z_3) / (y_2 - y_3)) \end{aligned}$$

A continuación, haremos la rotación en el sentido de las agujas del reloj de todo el conjunto, usando el eje auxiliar que trazamos (perpendicular al eje  $z$  y paralelo al eje  $x$ ) hasta llegar a la siguiente situación.

Como ésta es nuestra primera operación, a los valores que se modifiquen los anotaremos con su nombre anterior a la operación más un apóstrofe ('), por cada operación que hagamos agregaremos un apóstrofe a la variable indicada. Así las coordenadas del hidrógeno se modificarán, o sea, que pasarán sus coordenadas a ser  $x_1'$ ,  $y_1'$  y  $z_1'$  que las leeremos ( $x_1'$ : "equis uno prima",  $y_1'$ : "y uno prima" y  $z_1'$ : "zeta uno prima").

La rotación resulta en nuevas posiciones de los átomos (Figura 147).

Observemos qué sucedió: la hipotenusa H23, ahora, es perpendicular al eje  $y$ , por lo tanto, ya no queda definido un triángulo, el ángulo  $\alpha_2$ , ahora vale  $90^\circ$  ( $\alpha_2'$ ).

La hipotenusa H13 sigue definiendo un triángulo, pero el ángulo  $\alpha_1$  tiene, ahora, otra amplitud ( $\alpha_1'$ ). Podemos averiguar cuánto vale  $\alpha_1'$  ya que sabemos cuánto vale la diferencia entre  $\alpha_2$  y  $\alpha_2'$ , y esta diferencia, debe ser igual a la diferencia entre  $\alpha_1$  y  $\alpha_1'$ , pues, la rotación la realizamos en solidario para todo el conjunto. Podemos escribir esto en el lenguaje de las ecuaciones:

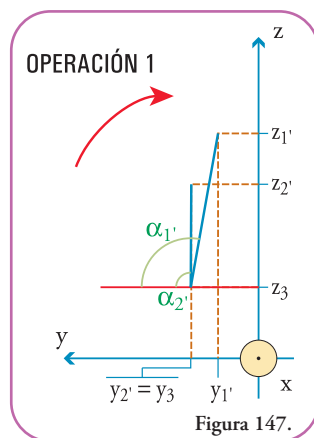


Figura 147.



$$\begin{aligned}\alpha_1' - \alpha_1 &= \alpha_2' - \alpha_2 \\ \alpha_1' &= \alpha_2' - \alpha_2 + \alpha_1 \\ \alpha_1' &= 90^\circ - \alpha_2 + \alpha_1\end{aligned}$$

Notemos que  $\alpha_1'$  es mayor que  $90^\circ$ , esto no altera en absoluto el uso de las funciones trigonométricas (en seguida explicaremos en detalle la interpretación de los resultados de las funciones trigonométricas de ángulos mayores de  $90^\circ$ ).

El ángulo  $\alpha_1'$  lo podemos averiguar, ya que hemos calculado  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$ .

$$\alpha_1' = 90^\circ - \arctg((z_2 - z_3) / (y_2 - y_3)) + \arctg((z_1 - z_3) / (y_1 - y_3))$$

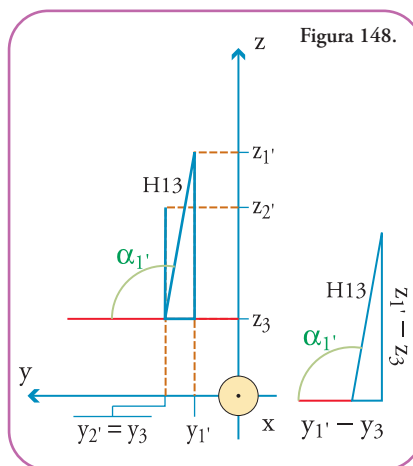
Recordemos que estamos haciendo todos estos cálculos para obtener las coordenadas finales del hidrógeno, luego, de una rotación a lo largo del eje carbono-oxígeno. Para llegar a ellas debemos obtener las coordenadas de cada átomo luego de cada operación.

Sólo dos átomos se han movido, el hidrógeno y el oxígeno, el carbono no ha modificado sus coordenadas ya que lo tomamos de referencia para trazar nuestros ejes auxiliares.

Veamos las coordenadas del hidrógeno.

Con respecto al eje  $x$  no se ha modificado su posición, es decir, esta rotación no produjo que la posición del hidrógeno saliera o entrara al plano del papel, por lo tanto:  $x_1' = x_1$

La coordenada en el eje  $y$  se modificó, pero como  $\alpha_1'$  sigue definiendo un triángulo, aunque sea  $> 90^\circ$ , este nuevo triángulo conserva, en su hipotenusa, la longitud de la hipotenusa H13, por lo tanto, con ayuda de las funciones trigonométricas, podemos obtener ambos catetos de este nuevo triángulo (Figura 148).



Si usamos la función coseno del ángulo  $\alpha_1'$ , nos dará un valor negativo (ver apéndice de funciones trigonométricas al final del libro), esto es perfectamente coherente con lo que buscamos. Dado que deseamos obtener la coordenada  $y_1'$ , ésta es menor que la coordenada  $y_3$ , por lo tanto, cuando hagamos la suma de la longitud del cateto menor (que será negativa) a la coordenada  $y_3$  (nuestra referencia), ese valor será positivo pero menor que  $y_3$ , es decir, que se encontrará más a la derecha, más cerca del origen de coordenadas. Otro camino posible puede ser averiguar el ángulo suplementario de  $\alpha_1'$  (aquel que, sumado a  $\alpha_1'$ , produce un ángulo llano  $-180^\circ$ ) y aplicarle a éste la función coseno. Obtendremos la longitud del cateto menor con signo positivo. Luego debemos saber que, en vez de sumarla a  $y_3$ , debemos restarla para obtener el resultado correcto. Como este camino implica calcular un ángulo adicional elegiremos el primer camino.

Hagamos los cálculos:

$$\begin{aligned}\cos(\alpha_1') &= (y_1' - y_3) / H13 \\ \cos(\alpha_1') * H13 &= y_1' - y_3 \\ \cos(\alpha_1') * H13 + y_3 &= y_1'\end{aligned}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\begin{aligned} y_1' &= \cos(\alpha_1') * H13 + y_3 \\ y_1' &= \cos(\alpha_1') * ((y_1 - y_3)^2 + (z_1 - z_3)^2)^{1/2} + y_3 \\ y_1' &= \cos(90^\circ - \arctg((z_2 - z_3) / (y_2 - y_3)) + \arctg((z_1 - z_3) / (y_1 - y_3))) * ((y_1 - y_3)^2 + (z_1 - z_3)^2)^{1/2} + y_3 \end{aligned}$$

Por tratarse de un cálculo general, éste es nuestro objetivo: tener nuestra incógnita expresada en función de los datos iniciales pero, por sencillez los ángulos no los definiremos en función de las coordenadas iniciales hasta obtener la solución final general.

La coordenada en el eje  $z$  también se modificó. Ahora necesitamos obtener la longitud del cateto mayor, usaremos la función seno aplicada al ángulo  $\alpha_1'$  (la función seno arroja valores negativos en el caso de ángulos mayores que  $180^\circ$ ):

$$\begin{aligned} \text{sen}(\alpha_1') &= \text{cateto opuesto} / \text{hipotenusa} \\ \text{sen}(\alpha_1') &= (z_1' - z_3) / H13 \\ \text{sen}(\alpha_1') * H13 &= z_1' - z_3 \\ \text{sen}(\alpha_1') * H13 + z_3 &= z_1' \end{aligned}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\begin{aligned} z_1' &= \text{sen}(\alpha_1') * H13 + z_3 \\ z_1' &= \text{sen}(\alpha_1') * ((y_1 - y_3)^2 + (z_1 - z_3)^2)^{1/2} + z_3 \\ z_1' &= \text{sen}(90^\circ - \arctg((z_2 - z_3) / (y_2 - y_3)) + \arctg((z_1 - z_3) / (y_1 - y_3))) * ((y_1 - y_3)^2 + (z_1 - z_3)^2)^{1/2} + z_3 \end{aligned}$$

Por comodidad los ángulos no los definiremos en función de las coordenadas iniciales hasta obtener la solución final general.

Ya hemos obtenido las nuevas coordenadas del hidrógeno, luego de la rotación en el sentido de las agujas del reloj, alrededor del eje auxiliar paralelo al eje  $x$ :

$$\begin{aligned} x_1' &= x_1 \\ y_1' &= \cos(\alpha_1') * ((y_1 - y_3)^2 + (z_1 - z_3)^2)^{1/2} + y_3 \\ z_1' &= \text{sen}(\alpha_1') * ((y_1 - y_3)^2 + (z_1 - z_3)^2)^{1/2} + z_3 \end{aligned}$$

Pasemos ahora a calcular las coordenadas del oxígeno.

Como antes la coordenada en  $x$  no se modifica:

$$x_2' = x_2$$

La coordenada en el eje  $y$  se modificó, pero como  $\alpha_2'$  es  $90^\circ$ , es la misma coordenada en  $y$  del carbono, o sea  $y_3$ :

$$y_2' = y_3$$

La coordenada en el eje  $z$  se modificó y resulta ser la distancia de la hipotenusa H23 más el valor de la coordenada  $z_3$ , pues es a partir de ésta que estamos midiendo la distancia de H23, pero deseamos obtener las coordenadas referidas al sistema de referencia de toda la molécula. Plantearemos:

$$z_2' = H23 + z_3$$

$$z_2' = ((y_2 - y_3)^2 + (z_2 - z_3)^2)^{1/2} + z_3$$

Resumiendo entonces, las coordenadas para el oxígeno son:

$$x_2' = x_2$$

$$y_2' = y_3$$

$$z_2' = ((y_2 - y_3)^2 + (z_2 - z_3)^2)^{1/2} + z_3$$

Ahora haremos la segunda operación con el fin de poner al enlace carbono oxígeno paralelo al eje  $z$ . Repetiremos el método seguido en la operación anterior, para ello necesitaremos observar el resultado obtenido rotado  $90^\circ$  de tal forma que el eje  $y$  apunte hacia nosotros (Figura 149).

Ahora debemos observar como antes, aquellos triángulos que nos sean útiles y que, a la vez, conozcamos sus lados. Estos son (Figura 150).

Como antes, previamente a realizar la primera rotación, nosotros conocemos todas las coordenadas y podemos calcular las longitudes de todos los catetos de los triángulos definidos. Así, si usamos el Teorema de Pitágoras podemos obtener las hipotenusas  $H23'$  y  $H13'$ :

$$H23' = ((x_2 - x_3)^2 + (z_2' - z_3)^2)^{1/2}$$

$$H13' = ((x_1 - x_3)^2 + (z_1' - z_3)^2)^{1/2}$$

Para la siguiente operación necesitaremos los ángulos  $\beta_1$  y  $\beta_2$ . Los obtendremos utilizando cualquiera de las funciones trigonométricas ya que conocemos las longitudes de los catetos y las hipotenusas. Yo elijo plantear la tangente para cada ángulo:

Para  $\beta_1$ :

$$\text{tg}(\beta_1) = \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente}$$

$$\text{tg}(\beta_1) = (z_1' - z_3) / (x_1 - x_3)$$

$$\beta_1 = \text{arctg}((z_1' - z_3) / (x_1 - x_3))$$

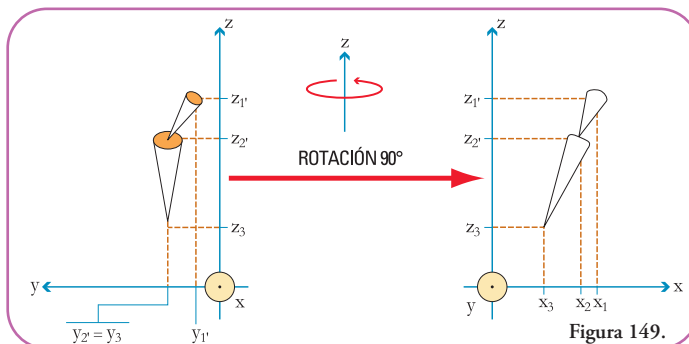


Figura 149.

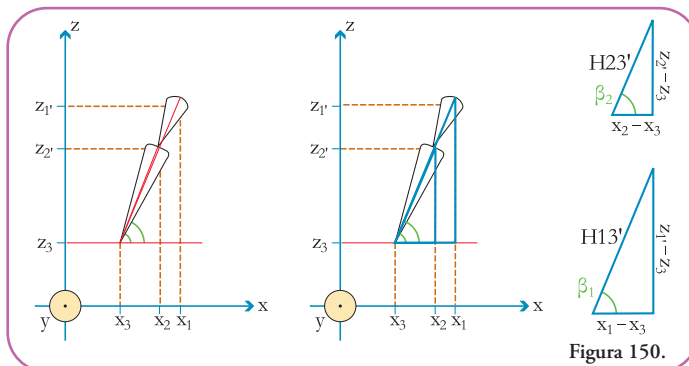


Figura 150.

Para  $\beta_2$ :

$$\operatorname{tg}(\beta_2) = \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente}$$

$$\operatorname{tg}(\beta_2) = (z_2' - z_3) / (x_2 - x_3)$$

$$\beta_2 = \arctg((z_2' - z_3) / (x_2 - x_3))$$

A continuación haremos la rotación en el sentido contrario al de las agujas del reloj de todo el conjunto, usando el eje auxiliar (perpendicular al eje  $z$  y paralelo al eje  $y$ ) que trazamos hasta llegar a la siguiente situación. Como esta es la segunda operación, anotaremos los valores que se modifiquen con dos apóstrofes ( $''$ ). Así las coordenadas del hidrógeno se modificarán, o sea, que pasarán sus coordenadas a ser  $x_1''$ ,  $y_1''$  y  $z_1''$  que las leeremos ( $x_1''$ : “equis uno segunda”,  $y_1''$ : “y uno segunda” y  $z_1''$ : “zeta uno segunda”).

La rotación resulta en nuevas posiciones de los átomos (Figura 151).

Observemos qué sucedió: la hipotenusa  $H23'$ , ahora, es perpendicular al eje  $x$ , por lo tanto, ya no queda definido un triángulo, el ángulo  $\beta_2$ , ahora vale  $90^\circ$  ( $\beta_2'$ ).

La hipotenusa  $H13'$  sigue definiendo un triángulo, pero el ángulo  $\beta_1$  ahora vale otra amplitud ( $\beta_1'$ ). Podemos averiguar cuánto vale  $\beta_1'$ , ya que sabemos cuánto vale la diferencia entre  $\beta_2$  y  $\beta_2'$ , esta diferencia debe ser igual a la diferencia entre  $\beta_1$  y  $\beta_1'$ , pues la rotación la realizamos en solidario para todo el conjunto. Podemos escribir esto en el lenguaje de las ecuaciones:

$$\beta_1' - \beta_1 = \beta_2' - \beta_2$$

$$\beta_1' = \beta_2' - \beta_2 + \beta_1$$

$$\beta_1' = 90^\circ - \beta_2 + \beta_1$$

El ángulo  $\beta_x$  lo podemos averiguar ya que hemos calculado  $\beta_1$  y  $\beta_2$ .

$$\beta_1' = 90^\circ - \arctg((z_2' - z_3) / (x_2 - x_3)) + \arctg((z_1' - z_3) / (x_1 - x_3))$$

Como en la operación 1 sólo dos átomos se han movido, el hidrógeno y el oxígeno, el carbono no ha modificado sus coordenadas ya que lo tomamos de referencia para trazar nuestros ejes auxiliares.

Veamos las coordenadas del hidrógeno.

Con respecto al eje  $x$  (Figura 152).

Podemos plantear una función trigonométrica de  $\beta_1'$ , para obtener  $x_1''$ .

Planteemos el coseno:

$$\cos(\beta_1') = \text{cateto adyacente} / \text{hipotenusa}$$

$$\cos(\beta_1') = (x_1'' - x_3) / H13'$$

$$\cos(\beta_1') * H13' = x_1'' - x_3$$

$$\cos(\beta_1') * H13' + x_3 = x_1''$$

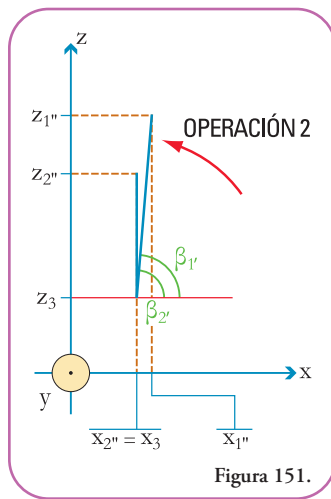


Figura 151.

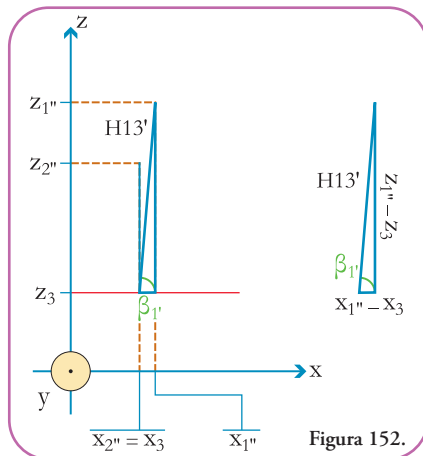
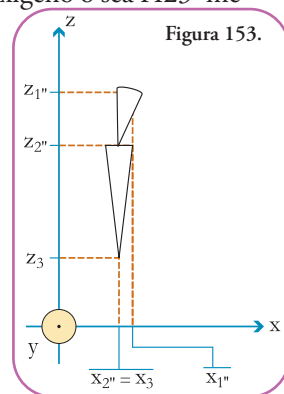


Figura 152.



En esta situación cualquier rotación del hidrógeno será en un plano paralelo al plano definido por los ejes  $x$  e  $y$  (Figura 154).

Hemos llegado al punto en el cual ya sabemos calcular las coordenadas  $x_f$  e  $y_f$  luego de la rotación de un ángulo arbitrario ( $\gamma$ ). Elegimos, arbitrariamente, medirlo en el sentido de giro de las agujas del reloj (Figura 155).

Continuamos calculando la proyección del enlace oxígeno-hidrógeno sobre el plano que alberga a todas las posiciones posibles que puede recorrer el hidrógeno. De esta forma podremos calcular las coordenadas  $x_f''$ ,  $y_f''$ .

Comencemos por observar el triángulo definido por el enlace oxígeno-hidrógeno y sus proyecciones horizontales y verticales. Si lo referimos al sistema de coordenadas  $x$ ,  $y$ ,  $z$  podemos advertir que define un paralelepípedo del cual podemos saber las coordenadas de todos sus vértices, ya que conocemos las coordenadas de los extremos de una de sus diagonales internas. Como se puede ver, esta diagonal corresponde a la ubicación del enlace oxígeno-hidrógeno. Señalaremos, sólo, las coordenadas del vértice opuesto a la posición del hidrógeno ( $x_1''$ ,  $y_1''$ ,  $z_1''$ ) (Figura 156).

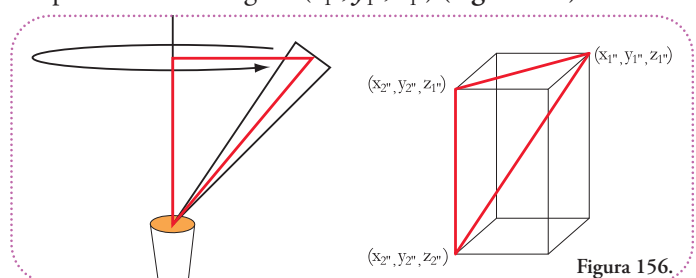


Figura 156.

Observemos una vista superior de lo que sucede al rotar un ángulo arbitrario  $\gamma$ , la circunferencia representa todas las posiciones posibles del hidrógeno para cualquier valor del ángulo ( $\gamma$ ) (Figura 157).

Si observamos esta misma situación en tres dimensiones (Figura 158).

Ya vimos cómo resolver esta situación al comienzo del apartado.

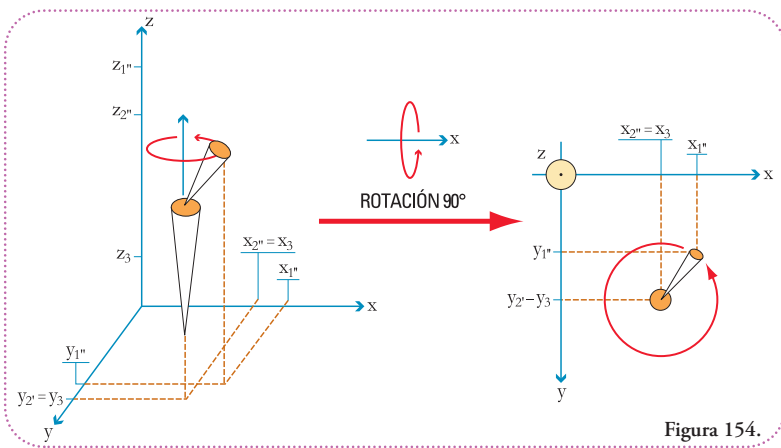


Figura 154.

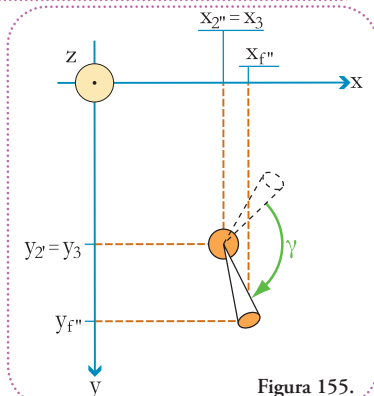


Figura 155.

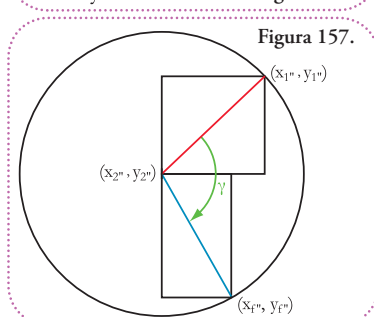


Figura 157.

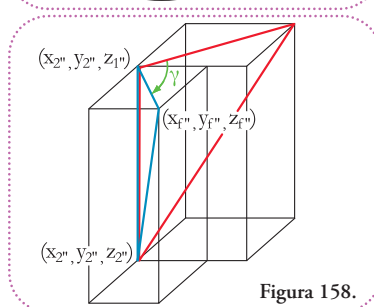


Figura 158.

Nuevamente, comenzaremos por definir otros dos triángulos (**Figura 159**). No debemos olvidar que  $H''$  es igual que  $H_f$ , ya que ambas hipotenusas son radios de la misma circunferencia. Por lo tanto:

$$H_f = H'' = (\text{cateto mayor}^2 + \text{cateto menor}^2)^{1/2}$$

$$H_f = H'' = ((x_1'' - x_2'')^2 + (y_1'' - y_2'')^2)^{1/2}$$

Todos estos valores los hemos expresado antes en función de las coordenadas iniciales, por lo tanto, son valores conocidos

Otra ecuación importante es la siguiente:

$$\gamma = \delta + \varepsilon$$

Ésta resulta de dividir el ángulo  $\gamma$  en los ángulos que corresponden a cada triángulo.

A continuación averiguaremos  $\delta$  utilizando una función trigonométrica, usaremos la tangente:

$$\begin{aligned} \text{tg}(\delta) &= \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente} \\ \text{tg}(\delta) &= (y_1'' - y_2'') / (x_1'' - x_2'') \\ \delta &= \text{arctg}((y_1'' - y_2'') / (x_1'' - x_2'')) \end{aligned}$$

Con este resultado podemos averiguar fácilmente  $\varepsilon$ :

$$\begin{aligned} \gamma &= \delta + \varepsilon \\ \gamma - \delta &= \varepsilon \\ \varepsilon &= \gamma - \text{arctg}((y_1'' - y_2'') / (x_1'' - x_2'')) \end{aligned}$$

Con el ángulo  $\varepsilon$  y  $H_f$  podemos averiguar las longitudes de los catetos opuesto y adyacente a este ángulo, a partir de los cuales obtendremos las coordenadas finales. Para ello utilizaremos las funciones seno y coseno:

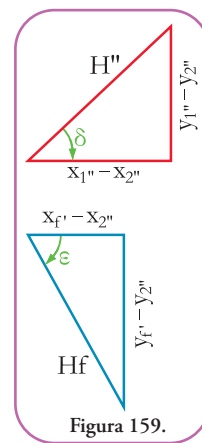
$$\begin{aligned} \text{sen}(\varepsilon) &= \text{cateto opuesto} / \text{hipotenusa} \\ \text{sen}(\varepsilon) &= (y_f'' - y_2'') / H_f \\ \text{sen}(\varepsilon) &= (y_f'' - y_2'') / ((x_1'' - x_2'')^2 + (y_1'' - y_2'')^2)^{1/2} \\ \text{sen}(\varepsilon) * ((x_1'' - x_2'')^2 + (y_1'' - y_2'')^2)^{1/2} &= y_f'' - y_2'' \\ \text{sen}(\varepsilon) * ((x_1'' - x_2'')^2 + (y_1'' - y_2'')^2)^{1/2} + y_2'' &= y_f'' \end{aligned}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\begin{aligned} y_f'' &= \text{sen}(\varepsilon) * ((x_1'' - x_2'')^2 + (y_1'' - y_2'')^2)^{1/2} + y_2'' \\ y_f'' &= \text{sen}(\gamma - \text{arctg}((y_1'' - y_2'') / (x_1'' - x_2''))) * ((x_1'' - x_2'')^2 + (y_1'' - y_2'')^2)^{1/2} + y_2'' \end{aligned}$$

Procedamos a averiguar  $x_f''$ :

$$\begin{aligned} \cos(\varepsilon) &= \text{cateto adyacente} / \text{hipotenusa} \\ \cos(\varepsilon) &= (x_f'' - x_2'') / H_f \end{aligned}$$





$$\cos(\varepsilon) = (x_f'' - x_2'') / ((x_1'' - x_2'')^2 + (y_1'' - y_2'')^2)^{1/2}$$

$$\cos(\varepsilon) * ((x_1'' - x_2'')^2 + (y_1'' - y_2'')^2)^{1/2} = x_f'' - x_2''$$

$$\cos(\varepsilon) * ((x_1'' - x_2'')^2 + (y_1'' - y_2'')^2)^{1/2} + x_2'' = x_f''$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$x_f'' = \cos(\varepsilon) * ((x_1'' - x_2'')^2 + (y_1'' - y_2'')^2)^{1/2} + x_2''$$

$$x_f'' = \cos(\gamma - \arctg((y_1'' - y_2'') / (x_1'' - x_2''))) * ((x_1'' - x_2'')^2 + (y_1'' - y_2'')^2)^{1/2} + x_2''$$

Para conocer  $z_f''$ , ya que no varía con respecto a  $z_1''$ , su valor será:

$$z_f'' = z_1''$$

Como podemos observar tenemos a las coordenada  $x_f''$ ,  $y_f''$  y  $z_f''$  en función de coordenadas conocidas y  $\gamma$ , que es un ángulo elegido por nosotros, arbitrariamente (Figura 160).

Ahora debemos volver a su posición inicial: al enlace carbono-oxígeno y, por ende, ubicar al hidrógeno, luego de haber sido rotado, en su posición final.

Comenzaremos por deshacer la operación 2 de rotación a lo largo del eje  $x$ . Antes debemos calcular la distancia entre la nueva posición del hidrógeno y el eje auxiliar paralelo al eje  $y$ . Entre esta distancia y el eje auxiliar paralelo al eje  $x$  se forma un ángulo nuevo ( $\beta_f'$ ) que debemos calcular (Figura 161). Aplicando el Teorema de Pitágoras, obtenemos:

$$Hf3' = ((x_f'' - x_3)^2 + (z_f'' - z_3)^2)^{1/2}$$

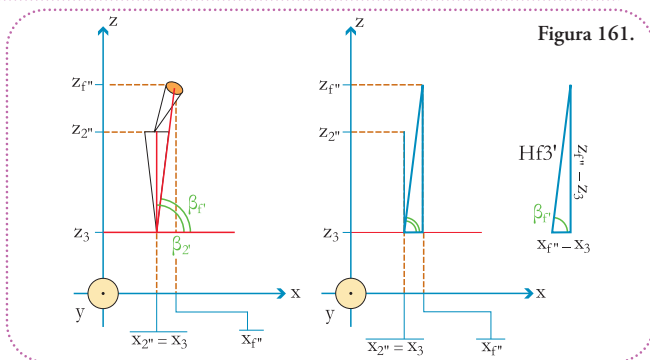
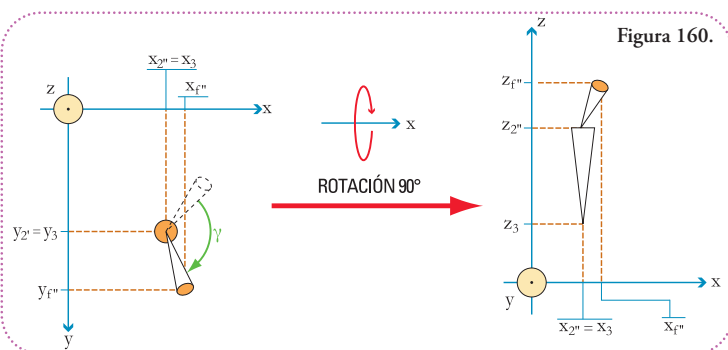
Aplicando la función trigonométrica tangente podemos calcular  $\beta_f'$ :

$$\text{tg}(\beta_f') = \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente}$$

$$\text{tg}(\beta_f') = (z_f'' - z_3) / (x_f'' - x_3)$$

$$\beta_f' = \arctg((z_f'' - z_3) / (x_f'' - x_3))$$

A partir de este momento, aplicaremos la siguiente convención: como vamos a realizar operaciones, exactamente inversas de las que realizamos, las nombraremos con un signo menos (-) ade-



lante. La notación de las coordenadas modificadas cambiará, ya que retiraremos un apóstrofe (') por cada una de estas operaciones, así recuperaremos la notación inicial. Entonces para la operación de inclinar el enlace carbono-oxígeno a su posición previa a la OPERACIÓN 2 tenemos (Figura 162).

La OPERACIÓN -2 restituye el

ángulo entre el enlace carbono-oxígeno y el eje auxiliar paralelo al eje  $x$  a su amplitud antes de la OPERACIÓN 2. Esta amplitud corresponde al ángulo  $\beta_2$ , por lo tanto, las coordenadas del oxígeno ya las hemos calculado.

Debemos, sí, calcular las coordenadas del hidrógeno ( $x_F, y_F, z_F$ ). Comenzaremos calculando la amplitud del ángulo  $\beta_F$ . La diferencia entre  $\beta_F$  y  $\beta_F'$  es la misma que entre  $\beta_2$  y  $\beta_2'$ , ya que giramos el conjunto en solidario, sabiendo que  $\beta_2$  vale  $90^\circ$ , entonces planteamos:

$$\begin{aligned}\beta_F - \beta_F' &= \beta_2 - \beta_2' \\ \beta_F - \beta_F' &= \beta_2 - 90^\circ \\ \beta_F &= \beta_2 - 90^\circ + \beta_F' \\ \beta_F &= \arctg((z_2' - z_3) / (x_2 - x_3)) - 90^\circ + \beta_F' \\ \beta_F &= \arctg((z_2' - z_3) / (x_2 - x_3)) - 90^\circ + \arctg((z_F' - z_3) / (x_F' - x_3))\end{aligned}$$

Calculemos la coordenada  $x_F$ , usaremos la función trigonométrica coseno:

$$\begin{aligned}\cos(\beta_F) &= \text{cateto adyacente} / \text{hipotenusa} \\ \cos(\beta_F) &= (x_F' - x_3) / \text{Hf3}' \\ \cos(\beta_F) &= (x_F' - x_3) / ((x_F' - x_3)^2 + (z_F' - z_3)^2)^{1/2} \\ \cos(\beta_F) * ((x_F' - x_3)^2 + (z_F' - z_3)^2)^{1/2} &= x_F' - x_3 \\ \cos(\beta_F) * ((x_F' - x_3)^2 + (z_F' - z_3)^2)^{1/2} + x_3 &= x_F\end{aligned}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$x_F = \cos(\beta_F) * ((x_F' - x_3)^2 + (z_F' - z_3)^2)^{1/2} + x_3$$

La coordenada  $y_F$  no se ha modificado con la OPERACIÓN -2, por lo tanto planteamos:

$$y_F = y_F'$$

La coordenada  $z_F$  la calcularemos aplicando la función seno al ángulo  $\beta_F$ :

$$\begin{aligned}\sin(\beta_F) &= \text{cateto opuesto} / \text{hipotenusa} \\ \sin(\beta_F) &= (z_F' - z_3) / \text{Hf3}' \\ \sin(\beta_F) &= (z_F' - z_3) / ((x_F' - x_3)^2 + (z_F' - z_3)^2)^{1/2} \\ \sin(\beta_F) * ((x_F' - x_3)^2 + (z_F' - z_3)^2)^{1/2} &= z_F' - z_3 \\ \sin(\beta_F) * ((x_F' - x_3)^2 + (z_F' - z_3)^2)^{1/2} + z_3 &= z_F\end{aligned}$$

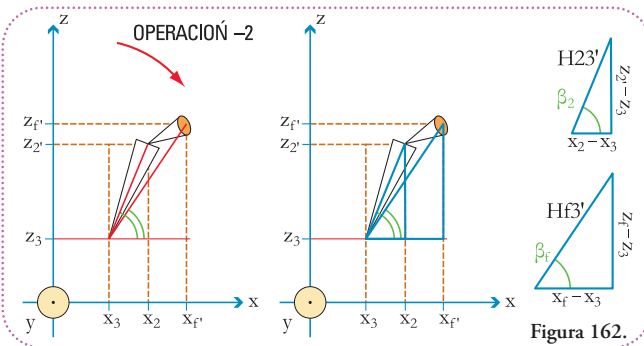


Figura 162.

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$z_F = \text{sen}(\beta_f) * ((x_F' - x_3)^2 + (z_F' - z_3)^2)^{1/2} + z_3$$

Resumamos nuestros resultados:

$$x_F' = \cos(\beta_f) * ((x_F' - x_3)^2 + (z_F' - z_3)^2)^{1/2} + x_3$$

$$y_F' = y_F''$$

$$z_F' = \text{sen}(\beta_f) * ((x_F' - x_3)^2 + (z_F' - z_3)^2)^{1/2} + z_3$$

Si rotamos la visión del conjunto 90° respecto del eje  $z$ , como indica la figura, obtenemos el punto de vista en el cual el eje  $x$  apunta hacia nosotros y nos permitirá realizar la última operación de inclinación para posicionar el oxígeno y el hidrógeno en sus posiciones finales (**Figura 163**).

Observemos el triángulo que se ha formado, definido por el eje auxiliar paralelo al eje  $y$  y la posición del hidrógeno (**Figura 164**).

Debemos calcular  $Hf3$  y  $\alpha_F$

Aplicando el Teorema de Pitágoras, obtenemos:

$$Hf3 = ((y_F' - y_3)^2 + (z_F' - z_3)^2)^{1/2}$$

Aplicando la función trigonométrica tangente podemos calcular  $\alpha_F$ :

$$\text{tg}(\alpha_F) = \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente}$$

$$\text{tg}(\alpha_F) = (z_F' - z_3) / (y_F' - y_3)$$

$$\alpha_F = \arctg((z_F' - z_3) / (y_F' - y_3))$$

Siguiendo la convención establecida aplicaremos ahora la OPERACIÓN -1 que restituye el ángulo entre el enlace carbono-oxígeno a su amplitud antes de la OPERACIÓN-1. Esta amplitud corresponde al ángulo  $\alpha_2$ , por lo tanto corresponden a las coordenadas del oxígeno que ya hemos calculado (**Figura 165**).

La diferencia entre los ángulos  $\alpha_2'$  y  $\alpha_2$  debe ser la misma que entre  $\alpha_f'$  y  $\alpha_f$  ya que volvemos a rotar todo el conjunto en solidario.

Si lo escribimos en ecuaciones:

$$\alpha_f' - \alpha_f = \alpha_2' - \alpha_2$$

$$- \alpha_f = \alpha_2' - \alpha_2 - \alpha_f'$$

$$\alpha_f = - \alpha_2' + \alpha_2 + \alpha_f'$$

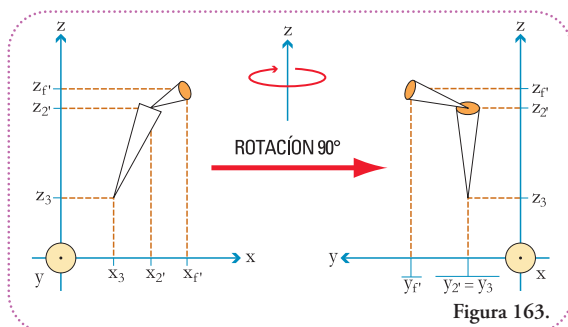


Figura 163.

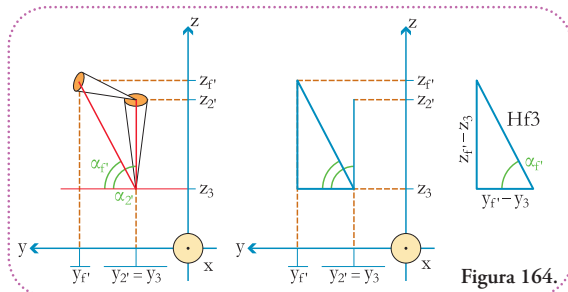


Figura 164.

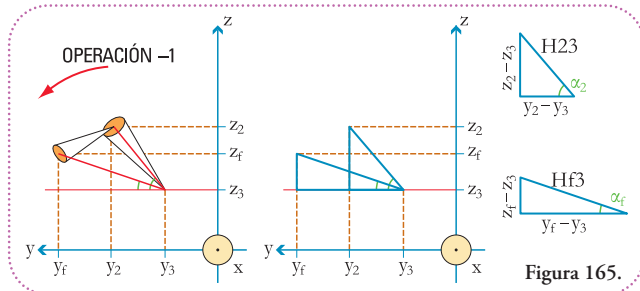


Figura 165.

$$\begin{aligned}\alpha_f &= -\alpha_{2'} + \alpha_2 + \arctg((z_f - z_3) / (y_f - y_3)) \\ \alpha_f &= -\alpha_{2'} + \arctg((z_2 - z_3) / (y_2 - y_3)) + \arctg((z_f - z_3) / (y_f - y_3)) \\ \alpha_f &= -90^\circ + \arctg((z_2 - z_3) / (y_2 - y_3)) + \arctg((z_f - z_3) / (y_f - y_3))\end{aligned}$$

Ahora ya tenemos todos los datos para calcular las coordenadas finales ( $x_f, y_f, z_f$ ) del hidrógeno. Como la rotación fue hecha alrededor del eje auxiliar paralelo al eje  $x$ , la coordenada con respecto a este eje no se modificó, por lo tanto:

$$x_f = x_{f'}$$

Con respecto a la coordenada  $y_f$  podemos utilizar la función coseno aplicada al ángulo  $\alpha_f$ :

$$\begin{aligned}\cos(\alpha_f) &= \text{cateto adyacente} / \text{hipotenusa} \\ \cos(\alpha_f) &= (y_f - y_3) / Hf3 \\ \cos(\alpha_f) * Hf3 &= y_f - y_3 \\ \cos(\alpha_f) * Hf3 + y_3 &= y_f\end{aligned}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\begin{aligned}y_f &= \cos(\alpha_f) * Hf3 + y_3 \\ y_f &= \cos(\alpha_f) * ((y_{f'} - y_3)^2 + (z_{f'} - z_3)^2)^{1/2} + y_3\end{aligned}$$

Sólo nos falta obtener la coordenada  $z_f$ , usaremos la función seno:

$$\begin{aligned}\sin(\alpha_f) &= \text{cateto opuesto} / \text{hipotenusa} \\ \sin(\alpha_f) &= (z_f - z_3) / Hf3 \\ \sin(\alpha_f) * Hf3 &= z_f - z_3 \\ \sin(\alpha_f) * Hf3 + z_3 &= z_f\end{aligned}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\begin{aligned}z_f &= \sin(\alpha_f) * Hf3 + z_3 \\ z_f &= \sin(\alpha_f) * ((y_{f'} - y_3)^2 + (z_{f'} - z_3)^2)^{1/2} + z_3\end{aligned}$$

Hemos llegado al final de este cálculo en general.

Está claro que la cantidad de cálculos que deben realizarse, para apenas describir una rotación, hace que en el estudio de toda una molécula sea imprescindible el uso de computadoras y programas adecuados para tal fin, aunque la esencia de la fuerza bruta de cálculo de una computadora son los cálculos que acabamos de realizar.

Para la aplicación de este resultado general usaremos un modelo generado por el programa ACD/ChemSketch (Freeware) (Figura 166). ▶▶



Figura 166.

Esta es la pantalla de inicio que ya hemos presentado en capítulos anteriores, vemos una hoja, rodeada de herramientas (Figura 167).

Observaremos de cerca una porción de la página, ya que nuestro dibujo es sencillo no necesitaremos observar toda la hoja. En la ventana de aumento de la imagen pondremos “200%” (Figura 168).

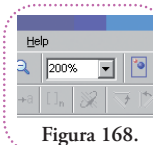


Figura 168.

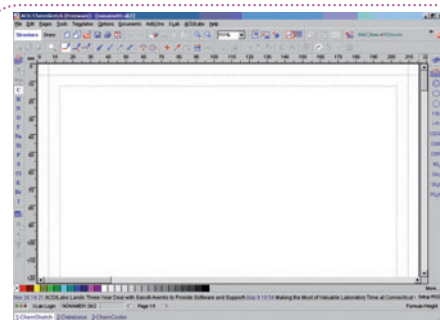


Figura 167.

Conocemos la estructura del fenol: consta de un anillo aromático (que alterna enlaces dobles con simples) unido a un grupo funcional alcohol.

Construiremos la molécula usando una plantilla de benceno (anillo aromático de seis carbonos sin sustituyentes) y, luego, haremos la sustitución.

## Pasos para la construcción de la molécula

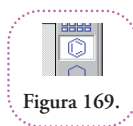


Figura 169.

1: Seleccionar la plantilla de benceno que se encuentra arriba a la derecha, pulsando el botón de la izquierda del ratón (click) sobre el botón (Figura 169).

Arrastramos la forma hasta donde deseamos ubicarla y la soltamos con un segundo click para dibujarla definitivamente (Figura 170).

Luego de pulsar el botón queda hecho el diagrama del benceno (Figura 171).

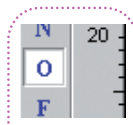


Figura 172.

2: Ahora debemos sustituir una de sus posiciones por un -OH. Seleccionamos el elemento oxígeno de la barra de elementos, a la derecha (Figura 172).

Y procedemos de la siguiente forma: ubicamos el puntero del ratón (la flechita), sobre el carbono que deseamos unir al grupo -OH (Figura 173).

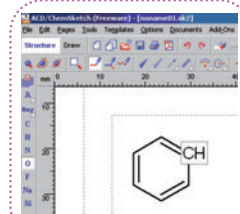


Figura 173.

Aunque no veamos el puntero, el carbono a modificar es mostrado como vemos “CH”. Hacemos click sobre él y arrastramos el puntero hasta donde deseamos que el programa dibuje el grupo OH. Una vez ubicado soltamos el botón del ratón y listo (Figuras 174 y 175).

Ya tenemos un dibujo de nuestra molécula de fenol. Ahora debemos guardar esta información en un archivo que codificará los tipos de átomos y sus distancias.

Pero antes de hacer esto, debemos realizar una operación que se llama Optimización 3D (3D Optimization). Esta operación agrega, explícitamente, los hidrógenos que por convención no se han dibujado y corrige defectos en el dibujo hecho a mano, como por ejemplo, la distancia de los enlaces y las amplitudes de los ángulos. Ejecutamos esta operación pulsando el botón correspondiente que se ubica arriba a la derecha (Figura 176).

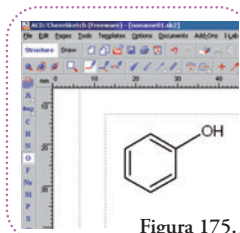


Figura 175.

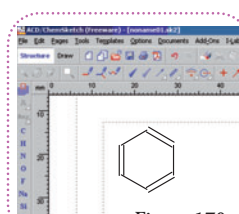


Figura 170.

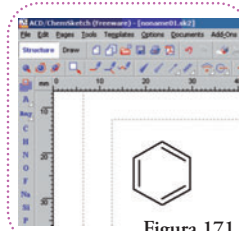


Figura 171.

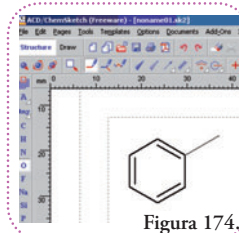


Figura 174.

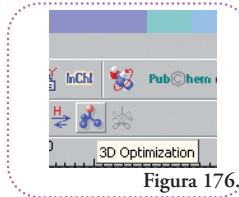


Figura 176.

El resultado lo visualizamos en la **figura 177**.

Ahora procederemos a guardar en un archivo esta representación en dos dimensiones, en una codificación de tres dimensiones. Usaremos el tipo de codificación “.mol”. Es, simplemente, un tipo de archivo, podríamos elegir otro, pero este es el más afín a la forma de presentar el tema a lo largo del libro.

Para guardar elegimos el botón **FILE** (archivo) de la barra superior, luego **SAVE** (guardar) del menú desplegable (**Figura 178**).

Luego, elegiremos el lugar donde deseamos guardarlo, el nombre y el formato, como dijimos, vamos a utilizar el formato MDL Molfile (\*.mol).

Lo llamaremos “fenol.mol” y lo guardaremos en la carpeta, previamente, creada llamada “REPRESENTACIÓN MOLECULAR” (Figura 179).

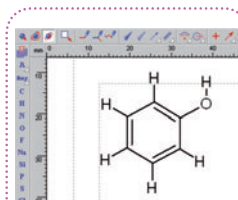


Figura 177.

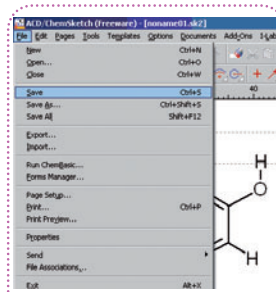


Figura 178.

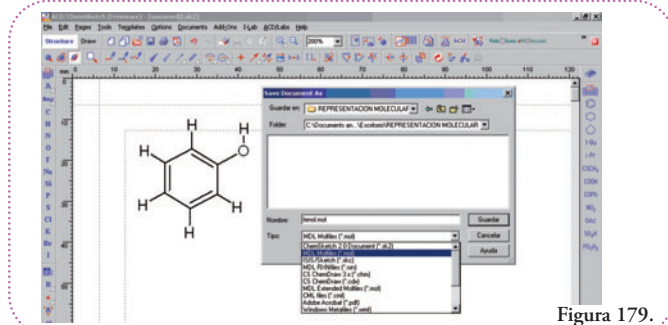


Figura 179.

Con esta función terminamos el uso del programa ACD/ChemSketch (Freeware) y podemos cerrarlo tranquilos.

Como mencionamos anteriormente, el archivo generado no es más que una codificación que permitirá que otros programas comprendan el código y nos devuelvan la representación molecular tal cual la dibujamos en este programa (ACD/ChemSketch (Freeware)), pero nos permitirá hacer otras cosas.

Antes de continuar podemos echar un vistazo al código MDL Molfile para ver una codificación real de esta molécula. Esto lo podemos hacer con cualquier programa que sea editor de texto o superior (desde el Notepad, Wordpad o Word). Usaremos el Edit-Pad Pro (Free Evaluation Version) (**Figura 180**)

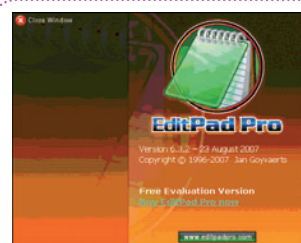


Figura 180.

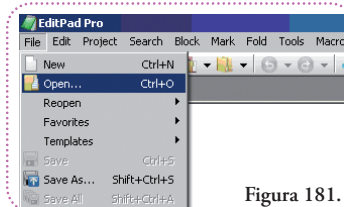


Figura 181.

File Edit Format Search View Task Help Tools Windows REPRESENTACION PROBLEMA Resolvido

Notepad

ACF\Labris121001533.D

```

13 13 0000 0.00000000 -0.0174 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
6.6324 -3.9680 -0.0174 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
5.9078 -5.5139 -0.0492 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
5.9078 -5.5137 -0.0031 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
6.1304 -6.0142 -0.0470 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
7.1219 -3.9690 -0.0111 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
5.9078 -5.5131 -0.0258 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
6.6324 -3.9680 -0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
7.5437 -5.5233 -0.0045 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
5.9078 -5.5134 -0.0214 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
5.1524 -7.1245 -0.0928 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.2850 -3.2184 -0.0299 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
3.2850 -3.2184 -0.0299 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
7.0822 -2.2074 -0.0323 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

```

Figura 183.

Figura 183.

Elegimos FILE (archivo) y luego del menú desplegable OPEN (abrir) (**Figura 181**).

En el cuadro de diálogo elegimos la carpeta donde guardamos nuestro archivo (fenol.mol) y luego lo abrimos (**Figura 182**).

Éste es nuestro archivo, fenol.mol, es un archivo de texto que tiene valores ordenados en columnas (**Figura 183**).

Podemos observar algunos datos interesantes: la primera línea hace referencia al programa que generó este archivo; luego

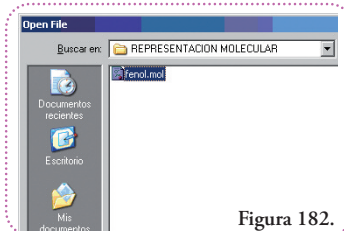


Figura 182.



viene una línea en blanco y luego de ésta, una en la cual se especifican diversos parámetros que no detallaremos, pero el más importante es que 13 indica la cantidad de átomos; y, luego, 13 enlaces que definen la molécula del fenol. A continuación, las coordenadas espaciales de cada átomo.

Un punto importante de notar es que no se especifica cuál es la coordenada en el eje  $x$ ,  $y$  o  $z$ . Esto es así ya que, lo importante es la relación entre las coordenadas de cada eje, sin importar cuál corresponda a cuál eje. El sistema de referencia lo establecerá cada programa que lea este archivo. Es decir, que asignará a la primera columna a la coordenada  $x$ ,  $y$  o  $z$ , lo mismo para la segunda y la tercera columnas. Luego, haremos modificaciones en los valores y veremos cómo se modifican la representación tridimensional del fenol. Aunque no tengan sentido químico la modificación nos servirá para identificar a qué eje corresponde la coordenada afectada.

Luego de cada terna de coordenadas viene una letra mayúscula que indica a qué átomo corresponde, C (carbono), O (oxígeno) y H (hidrógeno). Como observamos, hay 13 ternas. Sin embargo, no es inmediato identificar cuál carbono se une al oxígeno y cuál carbono se une a cada hidrógeno ya que, sólo, disponemos de las distancias.

A continuación se presentan 13 líneas que indican cuál átomo se conecta con cuál. Aquí cada átomo está representado por el número de línea de su terna de coordenadas. Hay una línea por enlace, éste está definido por los átomos que involucra y, luego, se detalla el tipo de enlace, 1 si es simple, 2 si es doble, 3 si hubiera algún enlace triple.

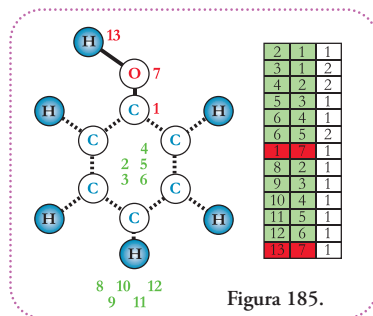
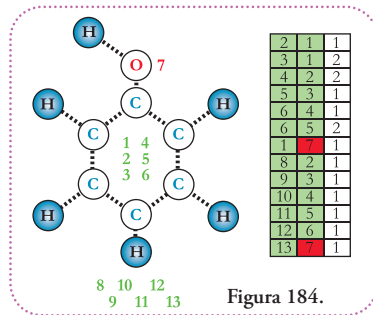
Los números ceros completan posiciones que tiene la plantilla del formato de archivo, pero que no fue necesario utilizarlas para la codificación de esta molécula.

Como éste es un archivo pequeño podemos realizar la lectura y esquematizar el resultado que ofrecerá un programa que lo lea. Desde luego que, lo que no haremos, es tener la información estructural en tres dimensiones, para ello es, justamente, que utilizaremos otro programa.

Comencemos por identificar al oxígeno, es el átomo 7 en un esquema del fenol. A la derecha reproducimos la lista de enlaces y su tipo tal cual aparecen en el archivo fenol.mol. En verde están los números de los átomos que no hemos ubicado aún. Los carbonos podrán tener los números 1 al 6 y los hidrógenos 8 al 13 (Figura 184).

El átomo de oxígeno (7) debe unirse a un hidrógeno y a un carbono, sabemos que el número del hidrógeno debe ser  $>7$  y del carbono  $<1$ , por lo tanto podemos ubicar a ambos (Figura 185).

Ahora bien, el carbono 1 se une a otros dos carbonos, pero el resto de la molécula es simétrico, por lo tanto, debemos establecer hacia qué lado comenzamos a numerar, el resultado final no dependerá del sentido que elijamos. Elegimos continuar en el sentido contrario a las agujas del reloj, entonces el carbono que se encuentra a nuestra izquierda lo nombraremos 2 y el carbono de nuestra izquierda 3. En la tercera columna está indicado el tipo de enlace entre los carbonos. Así, entre los carbonos 1 y 2 el enlace es simple (indicado por el número 1 en la tercera co-





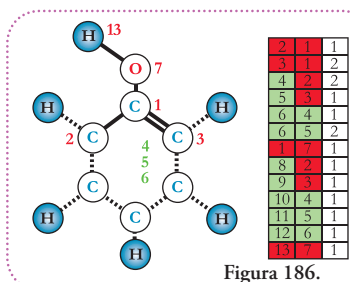


Figura 186.

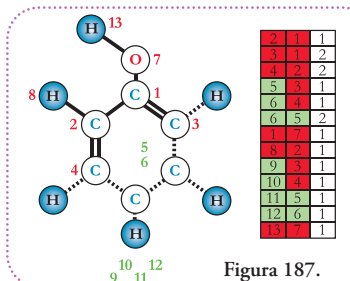


Figura 187.

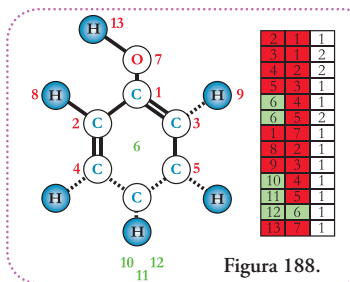


Figura 188.

lumna) y, entre los carbonos 1 y 3, el enlace es doble (indicado por el número 2 en la tercera columna). Este es el resultado luego de realizar estas asignaciones (Figura 186).

Ahora vemos que el carbono 2 se une al átomo 4 que es un carbono (por ser su índice <7) y al átomo 8 que es un hidrógeno (por ser su índice >7). El enlace con el carbono es doble, como se indica con un 2 en el tercer lugar de la fila, entonces tenemos (Figura 187).

Por su parte el carbono 3 se une al átomo 5, que es un carbono (por ser su índice <7), y al átomo 9, que es un hidrógeno (por ser su índice >7). El enlace con el carbono es simple, como se indica con un 1 en el tercer lugar de la fila, así tenemos (Figura 188).

De esta última asignación nos queda, automáticamente, asignado el carbono 6. Éste se une por un enlace simple al carbono 4 y, con uno doble al carbono 5. Los hidrógenos restantes se asignan, unívocamente, leyendo las líneas restantes luego de marcar el carbono 6 en la lista (Figuras 189 y 190).

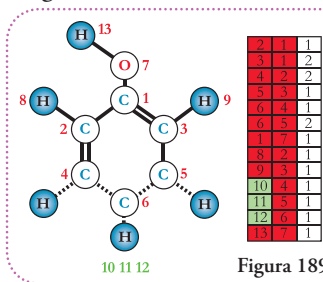


Figura 189.

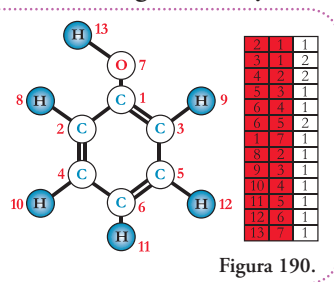


Figura 190.

El archivo fenol.mol es un archivo de texto plano que puede ser modificado. Podemos agregarle el número de átomo a cada letra que representa un elemento para tener una indicación más precisa de cada átomo, por ejemplo, en vez de dejar para el oxígeno "O", cambiarlo por "O7" y así para todos los elementos.

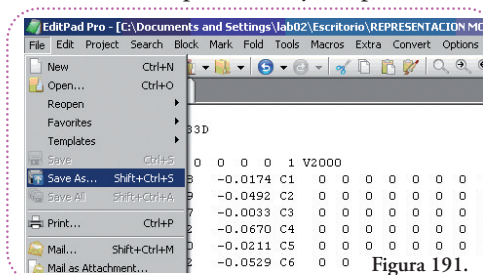


Figura 191.

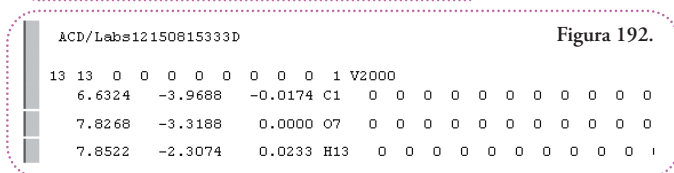


Figura 192.

Si realizamos esta operación conviene guardar estas modificaciones en un archivo distinto y conserva el archivo original. Hacemos esto seleccionando el botón FILE (archivo) y, luego, dentro del menú desplegable, SAVE AS... (guardar como...) (Figura 191).

Lo llamaremos "fenol\_2.mol", ahora tenemos nuestro archivo modificado para nuestra conveniencia.

Observemos las coordenadas para el trío de átomos C-O-H, o sea, en nuestro archivo modificado, C1-O7-H13 (Figura 192).

Vamos a utilizar el programa