

DeepView / Swiss PDB-Viewer el cual es de distribución gratuita para visualizar nuestro modelo y las modificaciones que le haremos (Figura 193).

Para cargar nuestro archivo, vamos al botón FILE (archivo) y elegimos OPEN MOL FILE (abrir archivo MOL) (Figuras 194 y 195).

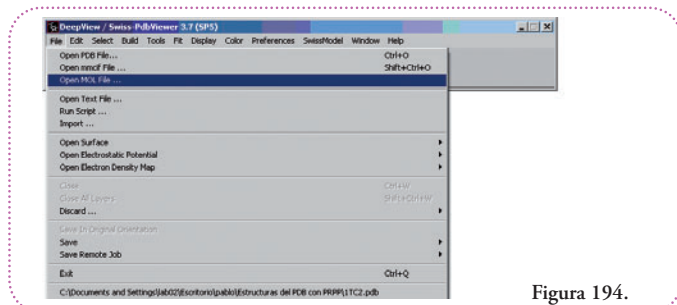


Figura 194.



Figura 193.

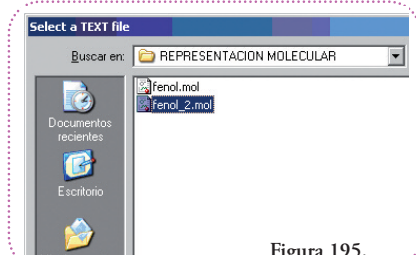


Figura 195.

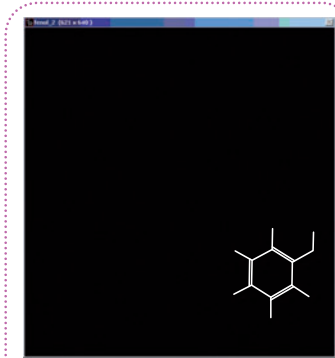


Figura 196.

Elegimos el archivo fenol_2.mol y lo abrimos, esto es lo que observamos (Figura 196).

Para visualizar mejor la molécula, podemos centrarla haciendo click sobre el botón de centrado (Figura 197). Este es el resultado (Figura 198).



Figura 197.

Para mejor ilustración, cambiaremos el color de fondo, vamos al botón PREFERENCES (preferencias) y dentro del menú desplegable a la opción COLORS (colores) (Figura 199).

Aparecerá el cuadro de configuración de colores de la molécula (Figura 200). Nos permite configurar los colores de los tipos de átomos (ATOMS), de los enlaces (BONDS), de amino ácido (AMINO ACID KIND) y estructuras (STRUCTURES) y fondo (BACKGROUND).

Apretamos el botón BACKGROUND y elegimos el color blanco y luego el botón OK del cuadro de configuración de colores (Figuras 200 y 201).



Figura 200.

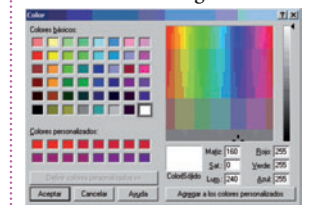


Figura 201.

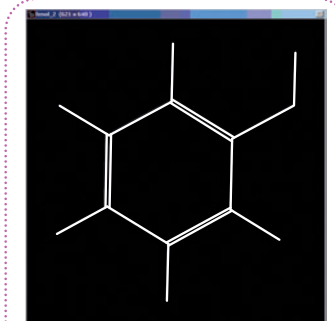


Figura 198.

El resultado lo visualizamos en la figura 202.

Sería de suma utilidad visualizar también de qué forma ha interpretado las coordenada este programa, para esto podemos indicarles que muestre los ejes

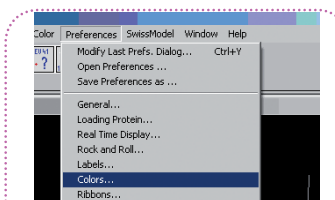


Figura 199.

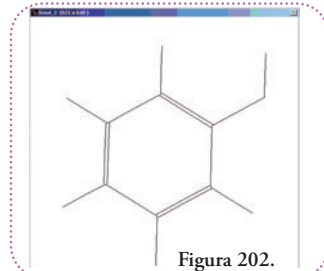


Figura 202.

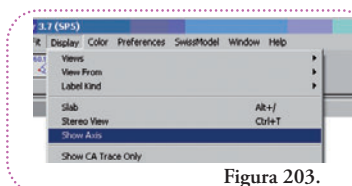


Figura 203.

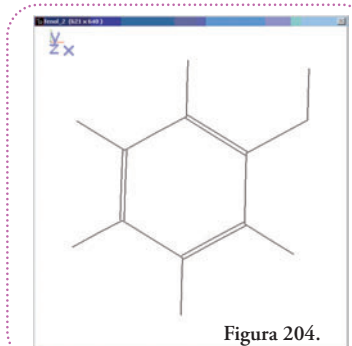


Figura 204.

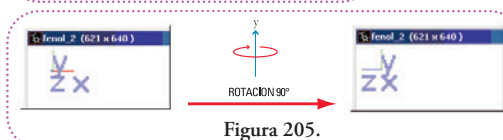


Figura 205.

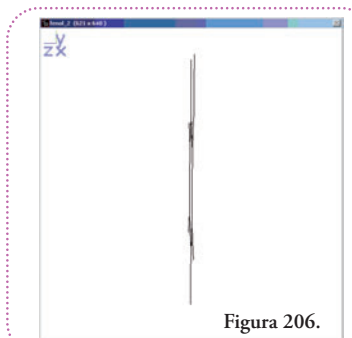


Figura 206.

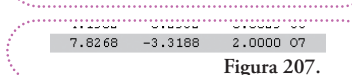


Figura 207.

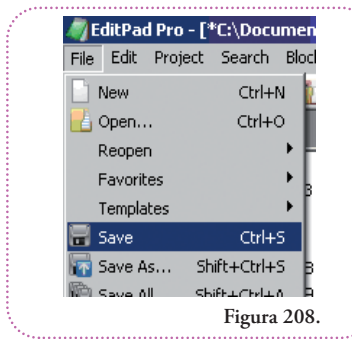


Figura 208.

x , y , z . Hacemos esto yendo al botón DISPLAY (pantalla) y seleccionando SHOW AXIS (mostrar ejes) (Figura 203).

El resultado se observa en la figura 204.

Si bien la forma en que se nos presentan los ejes no es como la dibujamos al comienzo del capítulo. Ya podemos identificar el sentido de los ejes respecto del plano del anillo de la molécula. Si de la presentación del fenol anterior en el cual el plano de la molécula es paralelo al plano definido por los ejes x y y rotamos 90° , observaremos que el eje z apuntaba hacia nosotros y ahora es el eje x el que sí lo hace (Figuras 205 y 206).

Podríamos cambiar el valor de alguna coordenada para observar cómo se modifica la geometría, aunque no tenga sentido químico la estructura resultante.

Por ejemplo, en el caso del oxígeno (O7) la tercera coordenada es 0.000, cambiaremos su valor a 2,000 (Figura 207).² Debemos guardar el cambio realizado. Vamos al botón FILE (archivo) y luego elegimos la opción SAVE (guardar) (Figura 208).

Éste es el resultado, luego de volver a cargar el archivo modificado en DeepView / Swiss PDB-Viewer. Para asegurar que el átomo afectado es el oxígeno 7 utilizaremos el botón (Figura 209).



Figura 209.

Con este botón podemos identificar cualquier átomo de la molécula cargada. Observamos que la posición del oxígeno se movió dos unidades de distancia hacia la izquierda, o sea, que la tercera columna del archivo de coordenadas representa la coordenada z (Figura 210).

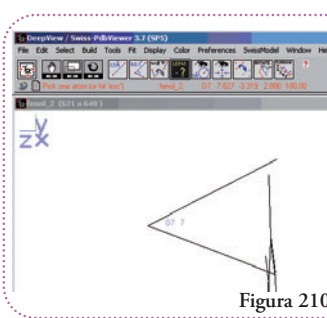


Figura 210.

Observemos la información que tenemos en pantalla. El átomo de oxígeno fue etiquetado (Figura 211).

O7 es el nombre que le pusimos para mayor comodidad nuestra. El dígito 7 representa el valor entero de la primera coordenada.

Además de la etiqueta en la pantalla de trabajo tenemos información adicional en la barra principal (Figura 212).

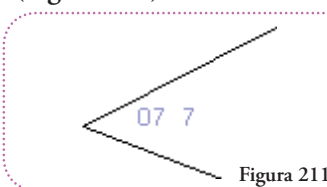


Figura 211.

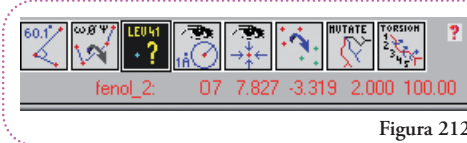


Figura 212.

² En la pantalla de la computadora aparecen los números decimales con punto en lugar de coma.

Estos datos nos indican a cuál archivo pertenece el átomo seleccionado (fenol_2.mol), el nombre del átomo (O7) y las tres coordenadas de las cuales ya sabemos que la última corresponde al eje z (2,000). El último número corresponde a parámetros que no son de nuestro interés para nuestros fines.

Ésta es la vista de “frente” de la modificación realizada (Figura 213).

A esta modificación podemos agregarle otra para tener, finalmente, el orden de lectura de los ejes. Observemos los valores (Figura 214).

Si aumentáramos la primera coordenada de 7,8268 en dos unidades como resultado tendríamos 9,8268 (Figura 215).

¿Qué modificaciones esperaríamos observar? Para responder esta pregunta tenemos dos situaciones posibles, que esta coordenada corresponda al eje x o que corresponda al eje y . Sabemos que las líneas apuntan en el sentido positivo de las coordenadas, así que un aumento será en el sentido de las flechas del esquema (Figura 216).

Supongamos que la primera coordenada correspondiera al eje y , entonces deberíamos esperar una modificación como la que vemos en la figura 217.

Si por el contrario la primera coordenada correspondiera al eje x , entonces deberíamos esperar una modificación como se observa en la figura 218.

Veamos el resultado y qué información podemos sacar (Figura 219).

Queda claro que este resultado corresponde a una modificación del eje x . Así sabemos que la terna de valores de un archivo de formato MDL Molfile (*.mol) es leído por el programa DeepView / Swiss PDB-Viewer como una terna de coordenadas x , y , z . Confirmamos que los valores de coordenadas son los que modificamos nosotros (Figura 220).

Por lo tanto, para el oxígeno, sus coordenadas en el espacio; luego de estas modificaciones, son $x = 9,8268$, $y = -3,3188$, $z = 2,0000$.

Ahora sabemos, exactamente, la ubicación en el espacio de toda la molécula de fenol. Para el enlace que deseamos rotar nos importan las coordenadas originales de los átomos C1, O7 y H13 (Figura 221)

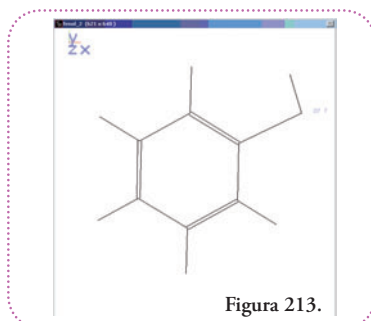


Figura 213.

7.8268	-3.3188	2.0000	O7
--------	---------	--------	----

Figura 214.

9.8268	-3.3188	2.0000	O7
--------	---------	--------	----

Figura 215.

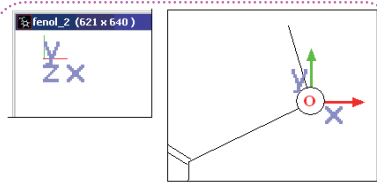


Figura 216.

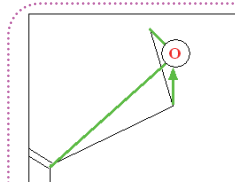


Figura 217.

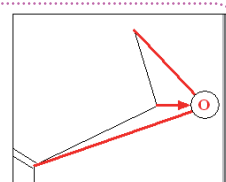


Figura 218.

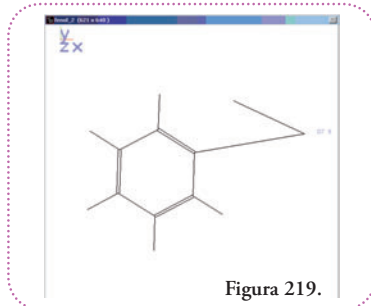


Figura 219.

6.6324	-3.9688	-0.0174	C1
7.8268	-3.3188	0.0000	O7
7.8522	-2.3074	0.0233	H13

Figura 220.

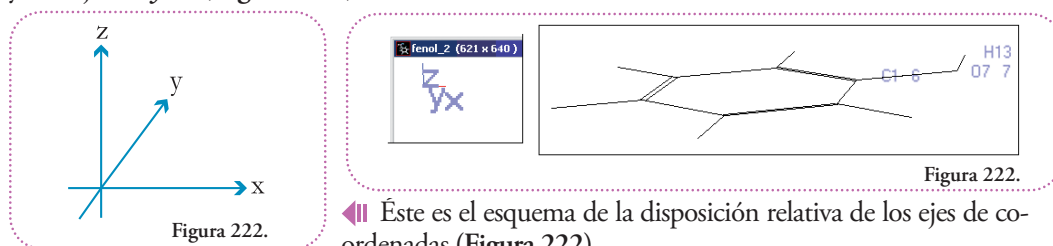


Figura 221.

En la resolución general, habíamos convenido en notar con el subíndice 1 a las coordenadas del hidrógeno (antes de la rotación), ahora nombrado en el archivo fenol_2.mol H13, con el subíndice 2 a las coordenadas del oxígeno (con el nombre O7) y con el subíndice 3 a las coordenadas del carbono (con el nombre C1). Las ternas de coordenadas para cada átomo, entonces, son:

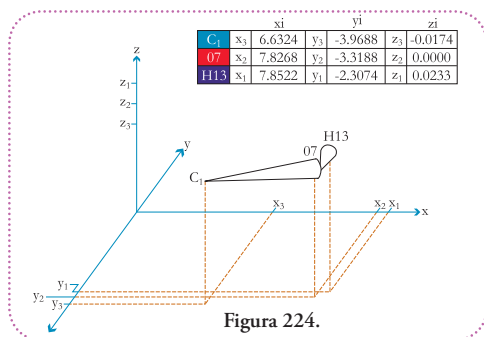
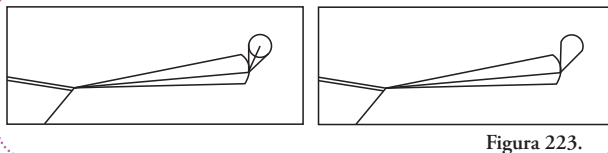
Carbono (C1): $x_3 = 6,6324, y_3 = -3,9688, z_3 = -0,0174$
 Oxígeno (O7): $x_2 = 7,8268, y_2 = -3,3188, z_2 = 0,0000$
 Hidrógeno (H13): $x_1 = 7,8522, y_1 = -2,3074, z_1 = 0,0233$

Antes de pasar a esquematizar estos enlaces observemos la orientación de la molécula y los ejes x, y, z (Figura 222):



¶ Este es el esquema de la disposición relativa de los ejes de coordenadas (Figura 222).

Se puede observar que el eje y apunta hacia dentro de la página, es decir, que se aleja de nosotros. Recordemos que, el sentido en el que apunta, indica hacia dónde crecen los valores de las coordenadas, valores mayores estarán más alejados de nosotros que valores menores. Ahora representamos los enlaces como conos (Figura 223); y luego los esquematizamos en este sistema de coordenadas (Figura 224).

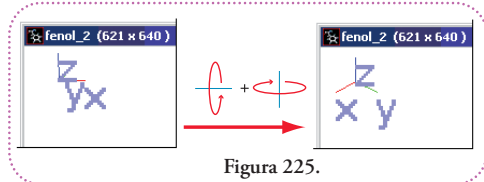


En el sistema de coordenadas que utilizamos, el punto de intersección de los ejes no es el valor 0 para ninguno de los ejes, esto es así para mejorar el entendimiento de la figura.

Continuemos nuestro análisis de los ejes con vista a aplicar nuestro resultado general que describe las rotaciones de un átomo enlazado respecto del enlace que definen su primer y segundo vecinos.

Si observamos la disposición de los ejes que nos indica el programa DeepView / Swiss PDB-Viewer rotada de forma tal que los tres ejes salgan, oblicuamente, de la página tenemos (Figura 225).

Podemos esquematizar el resultado de la rotación y señalar en qué orden leeríamos, primero el eje x ,



luego el eje y , y, finalmente, el eje z (Figura 226)

El sentido de lectura es, como indica la flecha, en el sentido contrario al de las agujas del reloj (levógiro).

Si hacemos lo mismo con el sistema de referencia utilizado al comienzo del capítulo, observamos lo siguiente (Figura 227).

El sentido de lectura es, como indica la flecha, en el sentido de las agujas del reloj (dextrógiro).

Esto quiere decir que hay dos formas distintas de disponer los ejes que definen nuestro espacio.

Más aún, estas dos formas son imágenes en espejo (especulares) una de la otra, tal como sucede con los enantiómeros y los letreros del frente de las ambulancias. Están escritos con las imágenes especulares de las letras de forma tal que cuando sean vistos por el espejo retrovisor puedan ser leídos (Figura 228).

En el caso de los ejes, no hay ninguna disposición que se considere como correcta o verdadera. La única condición es que una vez elegida se mantenga para todas las operaciones que se realicen.

Como el archivo MDL Molfile no especifica cuál convención de disposición de ejes debe usarse, el programa utiliza la propia que es la levógira.

¿Qué pasaría si el programa tuviera como convención de disposición de ejes la disposición dextrógira?

La representación del fenol sería una imagen especular de la que hemos obtenido (Figura 229).

Si no hubiera una convención generalizada para todos los programas de representación molecular, la misma molécula nos podría aparecer de dos formas distintas y es deseable que un elemento sea representado de igual forma, independientemente del programa que utilicemos.

Para solucionar esto se ha difundido una sencilla regla. Se conoce como “regla de la mano derecha”. Se ilustra, fácilmente, de la siguiente forma: imaginemos que los tres ejes x , y , z forman un objeto real rígido. Lo apoyamos en el suelo. El eje que apunta para arriba, será el eje z . Lo tomamos con nuestra mano derecha, con el pulgar apuntando para arriba, en el sentido creciente de este eje. Los dedos giran alrededor del eje z , para sujetarlo, y pasan por sobre los otros dos ejes, barren los otros dos ejes. Esta regla establece que los ejes serán orientados de forma tal que el primer eje barrido por los dedos será el eje x , y el segundo será el eje y . (Figura 230).

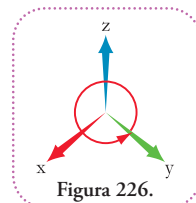


Figura 226.

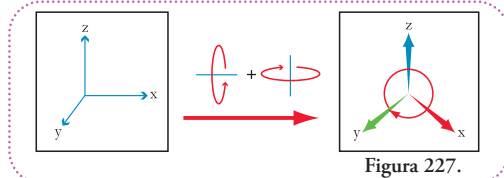


Figura 227.

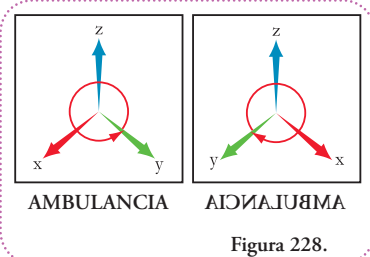


Figura 228.

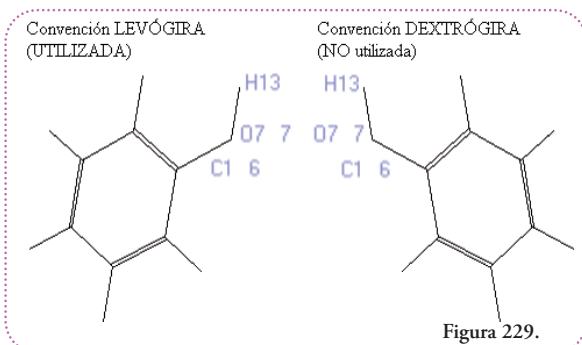


Figura 229.

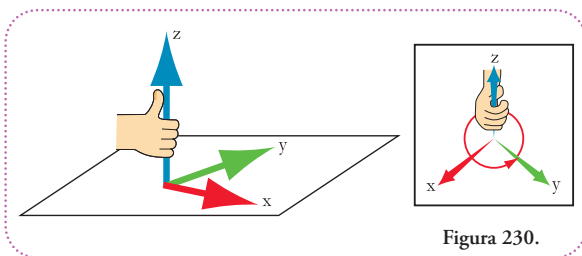
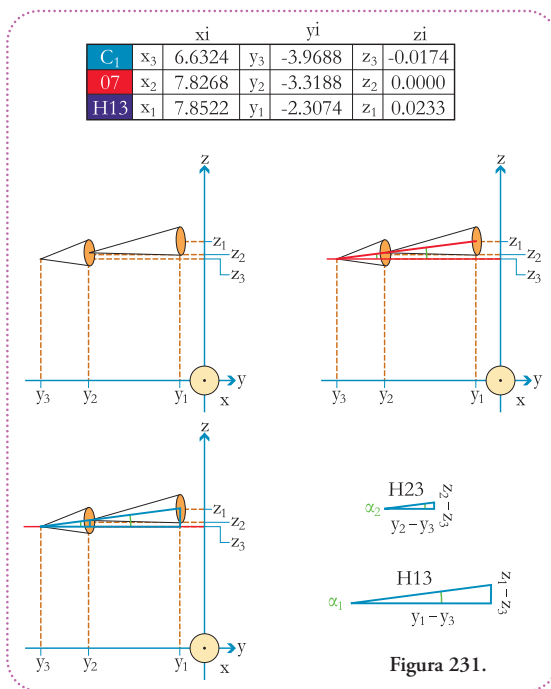


Figura 230.

Nuestro resultado general fue hecho partiendo de un sistema de coordenadas dextrógiro. ¿Servirá o no?

Como hemos seguido un procedimiento de-



tallado, podemos aplicarlo paso a paso y comparar los resultados. Esta es la ventaja de hacer los desarrollos detallados (aunque lleve más tiempo comprenderlos) y no, simplemente, aplicar una fórmula que no comprendemos cómo fue construida.

Comencemos por observar nuestro esquema a lo largo del eje x . Así podremos definir los triángulos útiles para nuestro cálculo (Figura 231).

La expresión en general de la hipotenusa H23 es:

$$H23 = ((y_2 - y_3)^2 + (z_2 - z_3)^2)^{1/2}$$

Pero como tenemos valores particulares para cada coordenada, los reemplazaremos en la expresión general y calcularemos la longitud de la hipotenusa. Por ahora trabajaremos sin unidades, pero es importante recordar que estas coordenadas representan distancias.

$$\begin{aligned}
 H23 &= ((y_2 - y_3)^2 + (z_2 - z_3)^2)^{1/2} \\
 H23 &= ((-3,3188 - (-3,9688))^2 + (0,0000 - (-0,0174))^2)^{1/2} \\
 H23 &= (0,6500^2 + 0,0174^2)^{1/2} \\
 H23 &= (0,4225 + 0,0003)^{1/2} \\
 H23 &= 0,4228^{1/2} \\
 H23 &= 0,6502
 \end{aligned}$$

Hacemos lo mismo con la expresión general de la hipotenusa H13:

$$\begin{aligned}
 H13 &= ((y_1 - y_3)^2 + (z_1 - z_3)^2)^{1/2} \\
 H13 &= ((-2,3074 - (-3,9688))^2 + (0,0233 - (-0,0174))^2)^{1/2} \\
 H13 &= (1,6614^2 + 0,0407^2)^{1/2} \\
 H13 &= (2,7602 + 0,0017)^{1/2} \\
 H13 &= 2,7619^{1/2} \\
 H13 &= 1,6619
 \end{aligned}$$

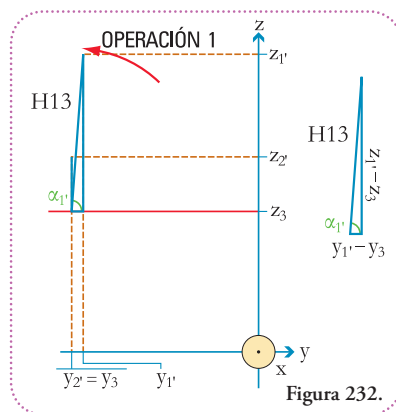
Calcularemos ahora los ángulos α_1 y α_2 utilizando la función trigonométrica tangente:

$$\begin{aligned}
 \operatorname{tg}(\alpha_1) &= \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente} \\
 \operatorname{tg}(\alpha_1) &= (z_1 - z_3) / (y_1 - y_3) \\
 \operatorname{tg}(\alpha_1) &= (0,0233 - (-0,0174)) / (-2,3074 - (-3,9688)) \\
 \operatorname{tg}(\alpha_1) &= 0,0407 / 1,6614
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \arctg(0,0407 / 1,6614) \\ \alpha_1 &= \arctg(0,0245) \\ \alpha_1 &= 1,4035^\circ\end{aligned}$$

Para α_2 :

$$\begin{aligned}\operatorname{tg}(\alpha_2) &= \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente} \\ \operatorname{tg}(\alpha_2) &= (z_2 - z_3) / (y_2 - y_3) \\ \operatorname{tg}(\alpha_2) &= (0,0000 - (-0,0174)) / (-3,3188 - (-3,9688)) \\ \operatorname{tg}(\alpha_2) &= 0,0174 / 0,6500 \\ \alpha_2 &= \arctg(0,0174 / 0,6500) \\ \alpha_2 &= \arctg(0,0268) \\ \alpha_2 &= 1,5334^\circ\end{aligned}$$



Ahora realizaremos la OPERACIÓN 1 (Figura 232) que consiste en rotar todo el conjunto en solidario alrededor del eje auxiliar paralelo al eje x de forma tal, que el ángulo α_2 sea 90° (α_2'). Al haber girado en solidario el incremento en amplitud, tanto de α_2 como de α_1 es el mismo y, por lo tanto, podemos averiguar cuánto vale α_1' :

$$\begin{aligned}\alpha_1' - \alpha_1 &= \alpha_2' - \alpha_2 \\ \alpha_1' &= \alpha_2' - \alpha_2 + \alpha_1 \\ \alpha_1' &= 90^\circ - 1,5334^\circ + 1,4035^\circ \\ \alpha_1' &= 89,8701^\circ\end{aligned}$$

Conociendo α_1' y H13 podemos calcular las longitudes de los catetos y averiguar las coordenadas que se modificaron (y_1' y z_1'):

Hagamos los cálculos para obtener y_1' :

$$\begin{aligned}\cos(\alpha_1') &= \text{cateto adyacente} / \text{hipotenusa} \\ \cos(\alpha_1') &= (y_1' - y_3) / H13 \\ \cos(\alpha_1') &= (y_1' - (-3,9688)) / 1,6619 \\ \cos(\alpha_1') * 1,6619 &= y_1' - (-3,9688) \\ \cos(\alpha_1') * 1,6619 + (-3,9688) &= y_1' \\ \cos(89,8701^\circ) * 1,6619 + (-3,9688) &= y_1'\end{aligned}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\begin{aligned}y_1' &= \cos(89,8701^\circ) * 1,6619 + (-3,9688) \\ y_1' &= 0,0023 * 1,6619 + (-3,9688) \\ y_1' &= 0,0023 * 1,6619 - 3,9688 \\ y_1' &= 0,0038 - 3,9688 \\ y_1' &= -3,9650\end{aligned}$$

Ahora calcularemos la coordenada z_1' :

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

$$\begin{aligned}\sin(\alpha_1') &= (z_1' - (-0,0174)) / H13 \\ \sin(\alpha_1') &= (z_1' - (-0,0174)) / 1,6619 \\ \sin(\alpha_1') * 1,6619 &= z_1' - (-0,0174) \\ \sin(\alpha_1') * 1,6619 + (-0,0174) &= z_1' \\ \sin(89,8701^\circ) * 1,6619 + (-0,0174) &= z_1'\end{aligned}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\begin{aligned}z_1' &= \sin(89,8701^\circ) * 1,6619 + (-0,0174) \\ z_1' &= 1,0000 * 1,6619 + (-0,0174) \\ z_1' &= 1,6619 + (-0,0174) \\ z_1' &= 1,6445\end{aligned}$$

Como no hay movimiento respecto en el eje x , el valor de la coordenada x_1' es igual que el de x_1 . Resumiendo las nuevas coordenadas para el hidrógeno son:

$$\begin{aligned}x_1' &= 7,8522 \\ y_1' &= -3,9650 \\ z_1' &= 1,6445\end{aligned}$$

Pasemos ahora a calcular las coordenadas del oxígeno.

Como antes la coordenada en x no se modifica:

$$\begin{aligned}x_2' &= x_2 \\ x_2' &= 7,8268\end{aligned}$$

La coordenada en el eje y se modificó, pero como α_2' es 90° , es la misma coordenada en y del carbono, o sea y_3 :

$$\begin{aligned}y_2' &= y_3 \\ y_2' &= -3,9688\end{aligned}$$

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:

$$\begin{aligned}z_2' &= H23 + z_3 \\ z_2' &= 0,6502 + z_3 \\ z_2' &= 0,6502 + (-0,0174) \\ z_2' &= 0,6328\end{aligned}$$

Resumiendo entonces, las coordenadas para el oxígeno son:

$$\begin{aligned}x_2' &= 7,8268 \\ y_2' &= -3,9688 \\ z_2' &= 0,6328\end{aligned}$$

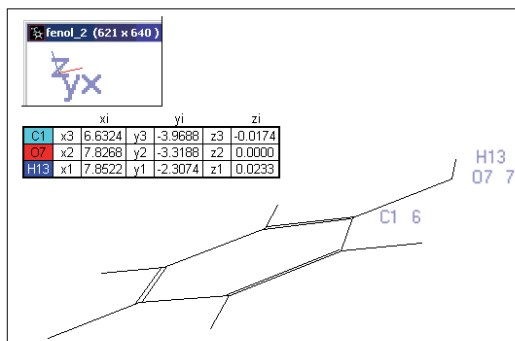


Figura 233.

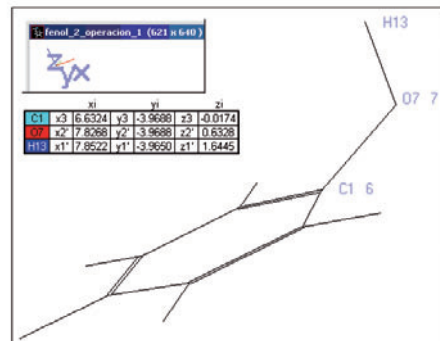


Figura 234.

Éste es el modelo (fenol_2.mol) resultante luego de la OPERACIÓN 1 (Figuras 233 y 234):

Esta modificación claramente no tiene realidad química ya que el oxígeno sale del plano de los carbonos, cosa que no puede suceder en el fenol.

Rotemos 90° y observemos el resultado de la OPERACIÓN 1 a lo largo del eje y . Como ahora la punta del eje se aleja de nosotros usaremos un círculo con una cruz para señalar una suerte de cola de flecha que se aleja (figura 235).

Ahora debemos observar aquellos triángulos que nos sean útiles y que, a la vez, conozcamos sus lados. Estos son (Figura 236).

Usando el Teorema de Pitágoras podemos obtener las hipotenusas $H23'$ y $H13'$.

Calculamos $H13'$

$$\begin{aligned}
 H13' &= ((x_1 - x_3)^2 + (z_1' - z_3)^2)^{1/2} \\
 H13' &= ((7.8522 - 6.6324)^2 + (1.6445 - (-0.0174))^2)^{1/2} \\
 H13' &= (1.2198^2 + 1.6619^2)^{1/2} \\
 H13' &= (1.4879 + 2.7919)^{1/2} \\
 H13' &= 4.2798^{1/2} \\
 H13' &= 2.0688
 \end{aligned}$$

Calculamos $H23'$

$$\begin{aligned}
 H23' &= ((x_2 - x_3)^2 + (z_2' - z_3)^2)^{1/2} \\
 H23' &= ((7.8268 - 6.6324)^2 + (0.6328 - (-0.0174))^2)^{1/2} \\
 H23' &= (1.1944^2 + 0.6502^2)^{1/2}
 \end{aligned}$$

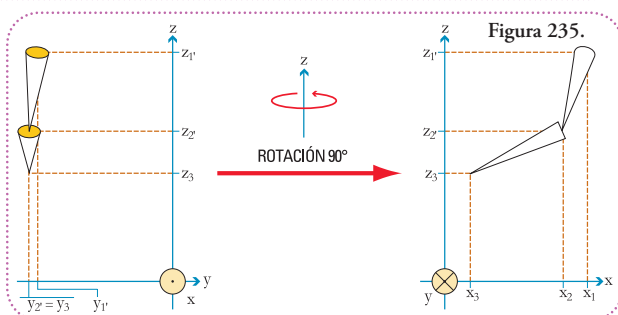


Figura 235.

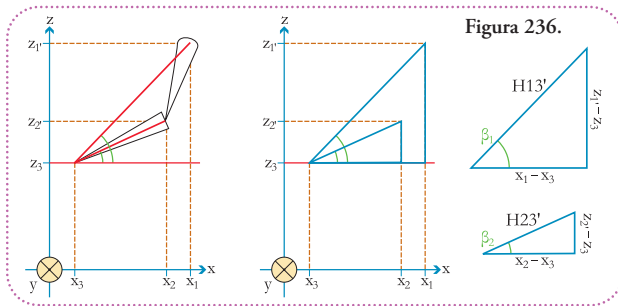


Figura 236.

$$\begin{aligned}
 H23' &= (1,4266 + 0,4228)^{1/2} \\
 H23' &= 1,8494^{1/2} \\
 H23' &= 1,3599
 \end{aligned}$$

Para la siguiente operación necesitamos conocer los ángulos β_1 y β_2 . Los obtendremos utilizando cualquiera de las funciones trigonométricas ya que conocemos las longitudes de los catetos y las hipotenusas de los triángulos a los que pertenecen. Elijamos plantear la función tangente.

Para β_1 :

$$\begin{aligned}
 \operatorname{tg}(\beta_1) &= \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente} \\
 \operatorname{tg}(\beta_1) &= (z_1' - z_3) / (x_1 - x_3) \\
 \beta_1 &= \arctg((z_1' - z_3) / (x_1 - x_3)) \\
 \beta_1 &= \arctg((1,6445 - (-0,0174)) / (7,8522 - 6,6324)) \\
 \beta_1 &= \arctg(1,6619 / 1,2198) \\
 \beta_1 &= \arctg(1,3624) \\
 \beta_1 &= 53,7214^\circ
 \end{aligned}$$

Para β_2 :

$$\begin{aligned}
 \operatorname{tg}(\beta_2) &= \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente} \\
 \operatorname{tg}(\beta_2) &= (z_2' - z_3) / (x_2 - x_3) \\
 \beta_2 &= \arctg((z_2' - z_3) / (x_2 - x_3)) \\
 \beta_2 &= \arctg((0,6328 - (-0,0174)) / (7,8268 - 6,6324)) \\
 \beta_2 &= \arctg(0,6502 / 1,1944) \\
 \beta_2 &= \arctg(0,5444) \\
 \beta_2 &= 28,5639^\circ
 \end{aligned}$$

A continuación haremos la rotación en el sentido contrario al de las agujas del reloj de todo el conjunto (**Figura 237**) usando del eje auxiliar paralelo al eje y .

Observemos qué sucedió: la hipotenusa $H23'$, ahora, es perpendicular al eje x , por lo tanto, ya no queda definido un triángulo, el ángulo β_2 , ahora vale 90° (β_2').

La hipotenusa $H13'$ sigue definiendo un triángulo, pero el ángulo β_1 , ahora, vale otra amplitud (β_1'). Podemos averiguar cuánto vale β_1' , ya que sabemos cuánto vale la diferencia entre β_2 y β_2' , esta diferencia debe ser igual a la diferencia entre β_1 y β_1' , pues la rotación la realizamos en solidario para todo el conjunto. Podemos escribir esto en el lenguaje de las ecuaciones:

$$\begin{aligned}
 \beta_1' - \beta_1 &= \beta_2' - \beta_2 \\
 \beta_1' &= \beta_2' - \beta_2 + \beta_1 \\
 \beta_1' &= 90^\circ - \beta_2 + \beta_1 \\
 \beta_1' &= 90^\circ - 28,5639^\circ + 53,7214^\circ \\
 \beta_1' &= 115,1575^\circ
 \end{aligned}$$

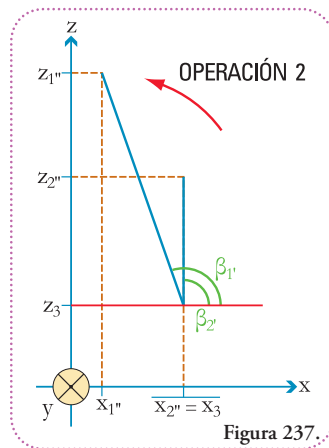


Figura 237.

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.

Con respecto al eje x (Figura 238).

Veamos las coordenadas del hidrógeno.

Coordenada según el eje x

Si usamos la función coseno del ángulo β_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 x_1'' , ésta es menor que la coordenada x_3 , por lo tanto, cuando hagamos la suma de la longitud del cateto menor (que será negativa) a la coordenada x_3 (nuestra referencia), ese valor será positivo pero menor que x_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 β_1 , (aquel que sumado a β_1 , produce un ángulo llano -180°) 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 x_3 , debemos restarla para obtener el resultado correcto. Como este camino implica calcular un ángulo adicional elegiremos el primero.

Podemos plantear una función trigonométrica de β_1 , para obtener x_1'' .

Planteemos el coseno:

$$\begin{aligned}\cos(\beta_1) &= \text{cateto adyacente} / \text{hipotenusa} \\ \cos(\beta_1) &= (x_1'' - x_3) / H13' \\ \cos(\beta_1) * H13' &= x_1'' - x_3 \\ \cos(\beta_1) * H13' + x_3 &= x_1''\end{aligned}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\begin{aligned}x_1'' &= \cos(\beta_1) * H13' + x_3 \\ x_1'' &= \cos(115,1575^\circ) * 2,0688 + 6,6324 \\ x_1'' &= -0,4251 * 2,0688 + 6,6324 \\ x_1'' &= -0,8794 + 6,6324 \\ x_1'' &= 5,7530\end{aligned}$$

Coordenada según el eje y

Como no variamos la ubicación respecto del eje y :

$$\begin{aligned}y_1'' &= y_1 \\ y_1'' &= -3,9650\end{aligned}$$

Coordenada según el eje z

Podemos plantear una función trigonométrica seno de β_1 , para obtener z_1'' :

$$\sin(\beta_1) = \text{cateto opuesto} / \text{hipotenusa}$$

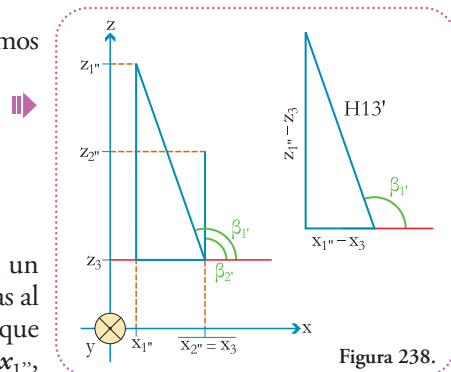


Figura 238.

$$\begin{aligned}\operatorname{sen}(\beta_1') &= (z_1'' - z_3) / H13' \\ \operatorname{sen}(\beta_1') * H13' &= z_1'' - z_3 \\ \operatorname{sen}(\beta_1') * H13' + z_3 &= z_1''\end{aligned}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\begin{aligned}z_1'' &= \operatorname{sen}(115,1575^\circ) * 2,0688 + (-0,0174) \\ z_1'' &= 0,9051 * 2,0688 + (-0,0174) \\ z_1'' &= 1,8725 + (-0,0174) \\ z_1'' &= 1,8551\end{aligned}$$

Resumiendo: éstas son las coordenadas del hidrógeno luego de la segunda operación de rotación (OPERACIÓN 2).

$$\begin{aligned}x_1'' &= 5,7530 \\ y_1'' &= -3,9650 \\ z_1'' &= 1,8551\end{aligned}$$

Ahora calcularemos las coordenadas del oxígeno luego de la segunda rotación (OPERACIÓN 2). Este caso se vuelve bastante sencillo ya que las coordenadas x_2'' e y_2'' son iguales que para el carbono, sólo difiere la coordenada z_2'' , que es la distancia del enlace carbono-oxígeno o sea $H23'$ medida a partir de la z_3 :

$$\begin{aligned}x_2'' &= x_3 \\ x_2'' &= 6,6324 \\ y_2'' &= y_3 \\ y_2'' &= -3,9688 \\ z_2'' &= H23' + z_3 \\ z_2'' &= 1,3599 + (-0,0174) \\ z_2'' &= 1,3425\end{aligned}$$

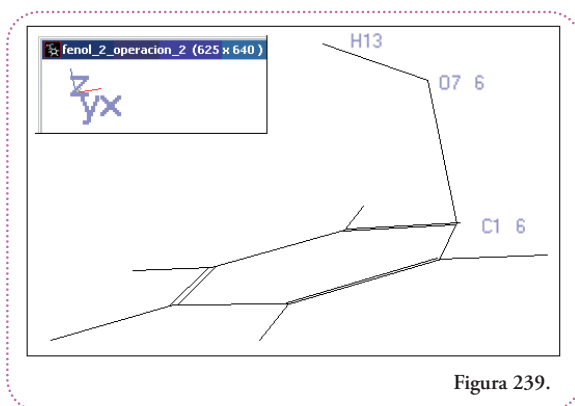


Figura 239.

Resumiendo: éstas son las coordenadas del oxígeno luego de la segunda operación de rotación (OPERACIÓN 2):

$$\begin{aligned}x_2'' &= 6,6324 \\ y_2'' &= -3,9688 \\ z_2'' &= 1,3425\end{aligned}$$

Hemos llegado, luego de dos operaciones de rotación perpendiculares entre sí, a ubicar al enlace carbono-oxígeno paralelo al eje z y, por lo tanto, perpendicular al plano determinado por los ejes x e y . Así se ve el modelo modificado (Figura 239).

Luego de estas dos operaciones la única modificación del oxígeno y del hidrógeno es su ubicación

con respecto al plano que forma el anillo de carbonos. Esto lo podemos comprobar, fácilmente, midiendo distancias y ángulos.

Las distancias entre el carbono (C1), el oxígeno (O7) y el hidrógeno (H13) no deben haberse modificado, así como tampoco el ángulo que determinan los enlaces carbono-oxígeno y oxígeno-hidrógeno.

El programa DeepView / Swiss PDB-Viewer nos permite hacer esto, fácilmente, con las herramientas apropiadas.

Primero usaremos la herramienta para medir distancias (Figura 240).

Como indica el ícono con puntos rojos, necesitamos dos puntos para medir una distancia.

Si seleccionamos ese botón, éste cambiará de color y aparecerá una leyenda en letras rojas en inglés **PICK ONE ATOM (OR HIT 'ESC')** que quiere decir SELECCIONE EL ÁTOMO UNO (O PRESIONE LA TECLA 'ESC' —ésta se ubica, en general, en la parte superior y hacia la izquierda del teclado y, generalmente, se usa para interrumpir un proceso—) (Figura 241).

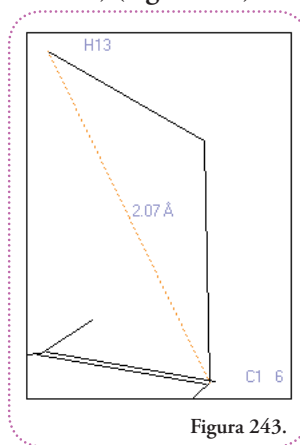


Figura 243.

El primer paso será seleccionar con el botón izquierdo del ratón el primer átomo a partir del cual queramos medir una distancia. Una vez hecho esto, aparecerá **PICK 2ND ATOM** que quiere decir SELECCIONE EL SEGUNDO ÁTOMO (Figura 242)

■ En la pantalla de trabajo observamos el resultado visualizado en la figura 243.

Para finalizar el uso de esta operación presionamos la tecla ESC.

Entendemos este resultado de la siguiente manera: entre el hidrógeno (H13) y el carbono (C1) hay una distancia de 2,07 Ångström (Å). Esta unidad de distancia tiene un nombre propio y es muy utilizada. Como toda unidad de distancia tiene su equivalente en metros (unidad de distancia del Sistema Internacional de Unidades), ya vimos en un capítulo anterior que:

$$\begin{aligned} 1 \text{ Å} &= 0,1 \text{ nm} \\ 1 \text{ Å} &= 0,1 \cdot 10^{-9} \text{ m} \\ 1 \text{ Å} &= 10^{-1} \cdot 10^{-9} \text{ m} \\ 1 \text{ Å} &= 10^{-10} \text{ m} \end{aligned}$$

Si no usáramos la notación científica, deberíamos escribir nueve ceros entre la coma y el 1 (se puede consultar el apéndice al final del libro que trata sobre los exponentes utilizados para referir magnitudes), o sea:

$$1 \text{ Å} = 0,0000000001 \text{ m}$$

Los números decimales racionales provienen del cociente entre dos números enteros, Ese número decimal proviene de dividir un metro (1) en diez mil millones (10.000.000.000) de partes, en notación algebraica:

$$1 \text{ Å} = 1 \text{ m} / 10.000.000.000$$

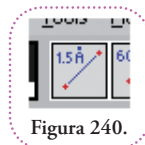


Figura 240.

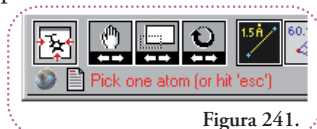


Figura 241.

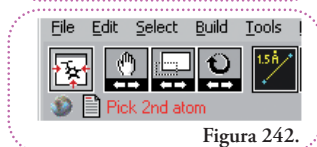


Figura 242.

O sea que 1 \AA es la diezmilmillonésima parte de un metro.

Es difícil darse una idea concreta de esta magnitud, así como también de todas las magnitudes del campo molecular.

Pero intentémoslo.

Si hacemos un punto con una lapicera en una hoja, éste tendrá aproximadamente $0,5 \text{ mm}$. Milímetro es la milésima parte de un metro, en notación científica se escribe así: $0,5 * 10^{-3} \text{ m}$, supongamos que el diámetro de este punto diminuto equivaliera a 1 \AA . Si pudiéramos diez mil millones de estos puntos uno atrás del otro recorreríamos una distancia que en nuestra escala equivaldría a un metro, haciendo las cuentas sería multiplicar $0,5 \text{ mm}$ por $10.000.000.000$:

$$0,5 \text{ mm} * 10.000.000.000 = 0,5 * 10^{-3} \text{ m} * 10.000.000.000$$

$$0,5 \text{ mm} * 10.000.000.000 = 0,5 * 10^{-3} \text{ m} * 10^{10}$$

$$0,5 \text{ mm} * 10.000.000.000 = 0,5 * 10^{(-3+10)} \text{ m}$$

$$0,5 \text{ mm} * 10.000.000.000 = 0,5 * 10^7 \text{ m}$$

$$0,5 \text{ mm} * 10.000.000.000 = 5.000.000 \text{ m}$$

Son cinco millones de metros. Mil metros hacen un kilómetro (km), o sea que:

$$5.000.000 \text{ m} = 5.000 \text{ km}$$



Figura 244.

Unos kilómetros más y tenemos la distancia desde Ushuaia a La Quiaca (5.171 km) (Figura 244).

Ahora midamos el ángulo que forman los enlaces carbono-oxígeno y oxígeno-hidrógeno. Usaremos la herramienta para medir ángulos (Figura 245).

Como indica el ícono con puntos rojos, necesitamos tres puntos para medir un ángulo.

Si seleccionamos ese botón, éste cambiará de color y aparecerá una leyenda en letras rojas en inglés **PICK CENTER ATOM (OR HIT 'ESC')**, que quiere decir **SELECCIONE EL ÁTOMO CENTRAL**

UNO (O PRESIONE LA TECLA 'ESC') (Figura 246).

Debemos elegir el átomo que representará el vértice de nuestro ángulo. Cómo deseamos medir el ángulo entre los enlaces carbono-oxígeno y oxígeno-hidrógeno, el oxígeno será el vértice. Una vez seleccionado la leyenda cambia, ahora nos indica que seleccionemos el segundo átomo, puede ser el carbono o el hidrógeno (Figura 247).

Una vez seleccionado, el hidrógeno por ejemplo, se nos pide seleccionar el tercero y último de los átomos que definen el ángulo que deseamos medir (Figura 248).

En la pantalla de trabajo observamos el resultado visualizado en la figura 249.

Si agregamos, a la distancia que medimos (carbono-hidrógeno), las distan-

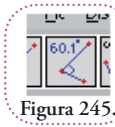


Figura 245.

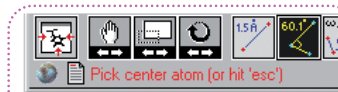


Figura 246.



Figura 247.



Figura 248.

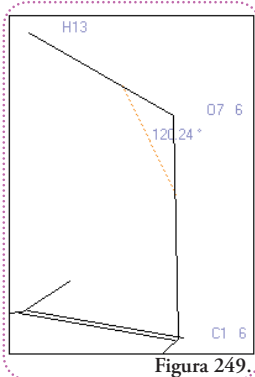


Figura 249.

cias carbono-oxígeno y oxígeno-hidrógeno y el valor del ángulo entre estos últimos enlaces, tenemos 4 parámetros independientes que nos indicarán, si alguno difiere, significativamente, con respecto al valor original, si hemos procedido correctamente o no.

Primero, mediremos los parámetros; luego de realizadas las operaciones 1 y 2 de rotación, vemos los resultados, en el archivo que hemos guardado con el resultado de estas dos operaciones: *fenol_2_operacion_2.mol* (Figura 250).

Veamos el valor de estos mismos parámetros en el archivo sin modificar (*fenol_2.mol*), (Figura 251).

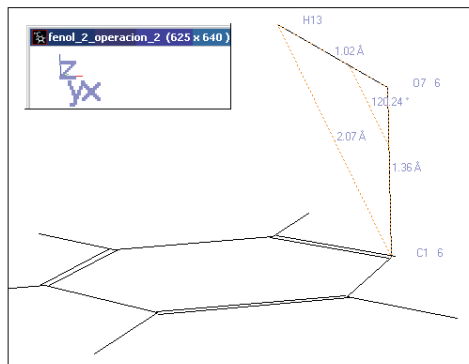


Figura 250.

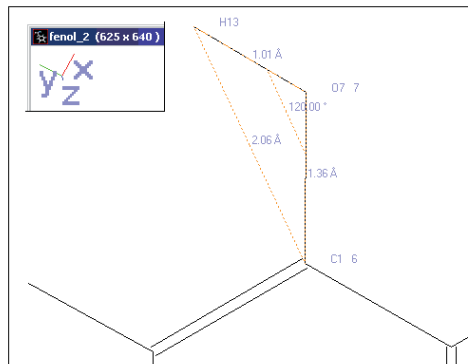


Figura 251.

Hagamos una tabla para compararlos (Tabla 1):

Tabla 1.

	<i>fenol_2.mol</i>	<i>fenol_2_operacion_2.mol</i>
Ángulo C1-O7-H13	120,00°	120,24°
Longitud C1-O7	1,36 Å	1,36 Å
Longitud O7-H13	1,01 Å	1,02 Å
Longitud C1-H13	2,06 Å	2,07 Å

Observamos que los valores coinciden, exactamente, en la parte entera. Las diferencias en los decimales provienen de los redondeos. Recordemos que las coordenadas tienen una precisión de cuatro decimales y el programa sólo nos muestra dos decimales, esto hace que pueda haber variaciones en los decimales.

Estas consideraciones son sumamente sutiles ya que, en el uso efectivo de modelos moleculares, los datos mismos pueden tener un error de hasta un Å o más, aún.

Ahora debemos elegir un ángulo arbitrario (γ) de giro. Este ángulo estará comprendido entre 0° y 360° ($0^\circ < \gamma < 360^\circ$) (Figura 252)

Elijamos un valor que no se obtenga de dividir en partes iguales a 360° , por ejemplo, $\gamma = 123^\circ$, en el sentido de las agujas del reloj. En el espacio implica un movimiento de rotación, más o menos, como el que representamos en los paralelepípedos (Figura 253).

Si observamos desde arriba la rotación propuesta esperaríamos que la posición final del hidrógeno fuera aproximadamente ésta (Figura 254).

El esquema anterior puede verificarse que es correcto si superponemos los ejes que nos muestra el programa DeepView / Swiss PDB-Viewer a la representación del fenol (Figura 255).

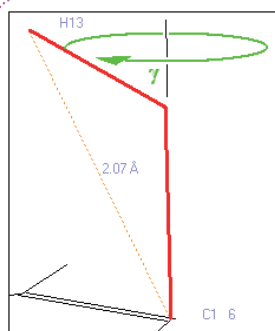


Figura 252.

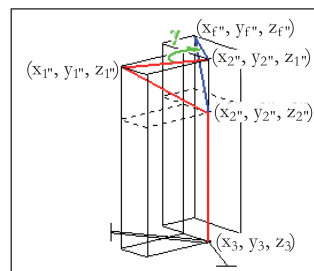
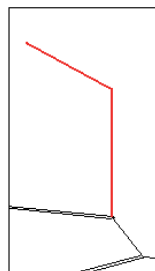
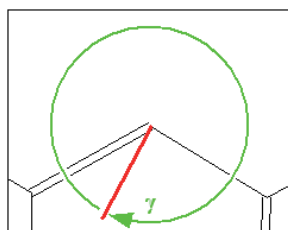


Figura 253.

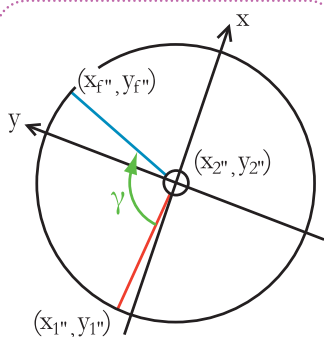


Figura 254.

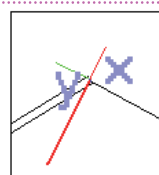
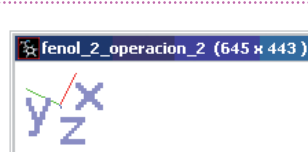


Figura 255.

La posición de los ejes x e y está exagerada a los fines de que los triángulos resultantes fueran mejor visualizados, los cálculos no se ven alterados en absoluto y procederemos según lo hemos hecho, anteriormente, en la forma general.

Veamos los triángulos que nos son útiles definir (Figura 256).

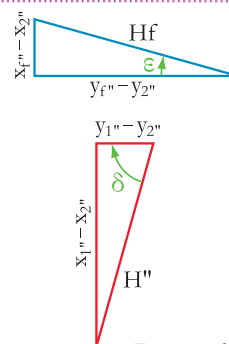
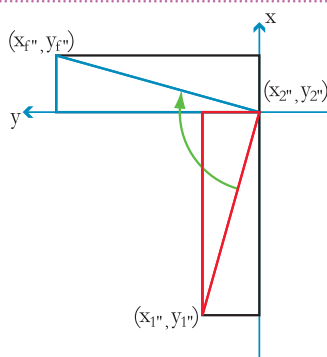
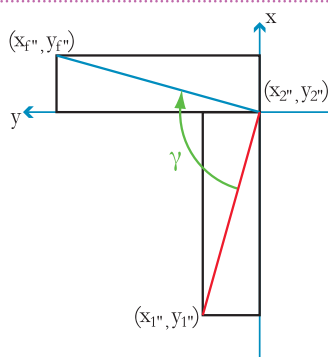


Figura 256.

Procederemos como lo hemos hecho en la resolución general. No debemos olvidar que H'' es igual a H_f , ya que ambas hipotenusas son radios de la misma circunferencia.

Por lo tanto:

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

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

$$H_f = H'' = ((5,7530 - 6,6324)^2 + (-3,9650 - (-3,9688))^2)^{1/2}$$

$$H_f = H'' = (-0,8794^2 + 0,0038^2)^{1/2}$$

$$H_f = H'' = (0,7733 + 0,00001)^{1/2}$$

$$H_f = H'' = 0,77331^{1/2}$$

$$H_f = H'' = 0,8794$$

La otra ecuación importante es:

$$\begin{aligned}\gamma &= \delta + \varepsilon \\ 123^\circ &= \delta + \varepsilon\end{aligned}$$

Como se puede observar, la igualdad anterior resulta de dividir el ángulo γ en los ángulos que corresponden a cada triángulo definido por las posiciones iniciales y finales y el eje x .

A continuación averiguaremos δ utilizando una función trigonométrica, usaremos la tangente:

$$\begin{aligned}\operatorname{tg}(\delta) &= \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente} \\ \operatorname{tg}(\delta) &= (x_1'' - x_2'') / (y_1'' - y_2'') \\ \delta &= \arctg((x_1'' - x_2'') / (y_1'' - y_2'')) \\ \delta &= \arctg((5,7530 - 6,6324) / (-3,9650 - (-3,9688))) \\ \delta &= \arctg((-0,8794) / 0,0038) \\ \delta &= \arctg(-231,4211) \\ \delta &= -89,7524^\circ\end{aligned}$$

Este resultado es perfectamente coherente. Pero hay que saber interpretarlo. Observemos que la longitud del cateto adyacente es negativa, lo cual es correcto desde el punto de vista vectorial (medición de distancias), pero no es intuitivo desde el punto de vista de que hablamos de las funciones trigonométricas como cocientes entre longitudes y no tiene sentido hablar de una longitud, una extensión en el espacio que sea negativa. Pero una definición más precisa de la función tangente nos indica la correcta interpretación. Basta decir que, el signo negativo indica que la amplitud del ángulo calculado está medida en el sentido de las agujas del reloj.

Como dijimos que no tienen sentido longitudes negativas, tomaremos el módulo (es decir su valor siempre positivo, lo señalaremos con barras verticales $| \quad |$) de la resta de coordenadas en el eje x , por lo tanto el ángulo δ calculado será:

$$\begin{aligned}\delta &= \arctg((x_1'' - x_2'') / (y_1'' - y_2'')) \\ \delta &= \arctg(|(5,7530 - 6,6324)| / (-3,9650 - (-3,9688))) \\ \delta &= \arctg(|-0,8794| / 0,0038) \\ \delta &= \arctg(231,4211) \\ \delta &= 89,7524^\circ\end{aligned}$$

Con este resultado podemos averiguar fácilmente ε :

$$\begin{aligned}\gamma &= \delta + \varepsilon \\ \gamma - \delta &= \varepsilon \\ \varepsilon &= \gamma - \delta \\ \varepsilon &= 123^\circ - 89,7524^\circ \\ \varepsilon &= 33,2476^\circ\end{aligned}$$

Si quisiéramos usar el valor de amplitud negativo de δ , debemos interpretar la amplitud del ángulo γ como negativa también, ya que consideramos a sendas amplitudes medidas en el sentido de las agujas del reloj:

$$\begin{aligned}
 \gamma &= \delta + \varepsilon \\
 \gamma - \delta &= \varepsilon \\
 \varepsilon &= \gamma - \delta \\
 \varepsilon &= -123^\circ - (-89,7524^\circ) \\
 \varepsilon &= -33,2476^\circ
 \end{aligned}$$

Con el ángulo ε y H_f podemos averiguar las longitudes de los catetos opuesto y adyacente a este ángulo. Para ello utilizaremos las funciones seno y coseno. Como en el caso anterior, la amplitud del ángulo ε la estamos midiendo positiva en el sentido de las agujas del reloj, por lo tanto debemos utilizarla con un signo negativo para obtener el resultado correcto.

Planteemos la función coseno para el ángulo ε :

$$\begin{aligned}
 \cos(-\varepsilon) &= \text{cateto adyacente} / \text{hipotenusa} \\
 \cos(-\varepsilon) &= (y_{f'} - y_{2''}) / H_f \\
 \cos(-\varepsilon) * H_f &= y_{f'} - y_{2''}
 \end{aligned}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\begin{aligned}
 y_{f'} &= \cos(-\varepsilon) * H_f + y_{2''} \\
 y_{f'} &= \cos(-(-33,2476^\circ)) * 0,8794 + (-3,9688) \\
 y_{f'} &= \cos(33,2476^\circ) * 0,8794 + (-3,9688) \\
 y_{f'} &= 0,8363 * 0,8794 + (-3,9688) \\
 y_{f'} &= 0,7354 + (-3,9688) \\
 y_{f'} &= -3,2334
 \end{aligned}$$

Procedamos a averiguar $x_{f'}$ con la función seno aplicada al ángulo ε , otra vez debemos aplicar un signo negativo delante para dar cuenta de que lo hemos calculado con una amplitud creciente en el sentido de las agujas del reloj:

$$\begin{aligned}
 \sin(-\varepsilon) &= \text{cateto opuesto} / \text{hipotenusa} \\
 \sin(-\varepsilon) &= (x_{f'} - x_{2''}) / H_f \\
 \sin(-\varepsilon) * H_f &= x_{f'} - x_{2''} \\
 \sin(-\varepsilon) * H_f + x_{2''} &= x_{f'}
 \end{aligned}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\begin{aligned}
 x_{f'} &= \sin(-\varepsilon) * H_f + x_{2''} \\
 x_{f'} &= \sin(-(-33,2476^\circ)) * 0,8794 + 6,6324 \\
 x_{f'} &= \sin(33,2476^\circ) * 0,8794 + 6,6324 \\
 x_{f'} &= 0,5483 * 0,8794 + 6,6324 \\
 x_{f'} &= 0,4822 + 6,6324 \\
 x_{f'} &= 7,1146
 \end{aligned}$$

Para conocer $z_{f''}$, ya que no varía con respecto a $z_{1''}$, su valor será:

$$z_{P'} = z_1''$$

$$z_{P'} = 1,8551$$

Resumiendo: éstas son las coordenadas hidrógeno luego de haber girado 123° :

$$x_{P'} = 7,1146$$

$$y_{P'} = -3,2334$$

$$z_{P'} = 1,8551$$

Podemos modificar las coordenadas del hidrógeno (H13) en nuestro archivo fenol_2_operacion_2.mol y guardarlo como fenol_2_operacion_rot_123.mol (Figura 257).

Si abrimos este archivo con el programa DeepView / Swiss PDB-Viewer obtenemos esta representación (Figura 258).

En una vista superior vemos cómo la nueva posición del hidrógeno es la que supusimos. (Figura 259)

7.1146	-3.2334	1.8551	H13	0
--------	---------	--------	-----	---

Figura 257.

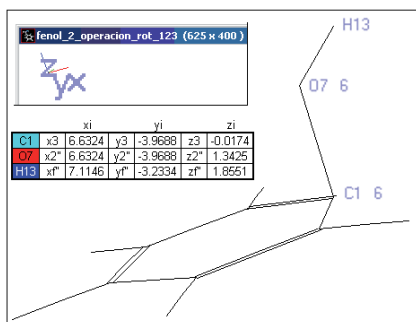


Figura 258.

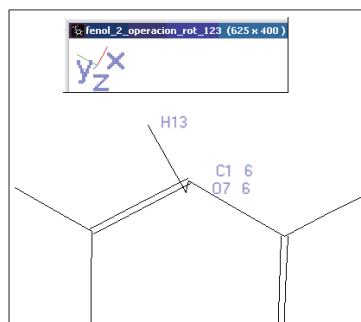


Figura 259.

La pregunta que nos podemos hacer ahora es:

¿Podemos comprobar que el giro fue, efectivamente, de 123° con herramientas del programa DeepView / Swiss PDB-Viewer?

La respuesta es afirmativa, contamos con una herramienta que podemos utilizar para comprobar si nuestra modificación produjo la rotación deseada.

Se trata del botón de medición de ángulos diedros. Recordemos que un ángulo diedro está definido por cuatro puntos en el espacio, los dos puntos centrales establecen un eje que une los dos enlaces externos que serán los lados del ángulo que mediremos. En nuestro caso estos puntos representen la ubicación de los núcleos atómicos y tenemos tres enlaces definidos (Figura 260).

Estas cuatro ubicaciones pueden ser numeradas de dos formas que definirán dos ángulos diedros diferentes, sólo en el signo. El ángulo α que observamos al mirar a lo largo del enlace central, definido por los átomos numerados con 2 y con 3, es el ángulo diedro definido por los

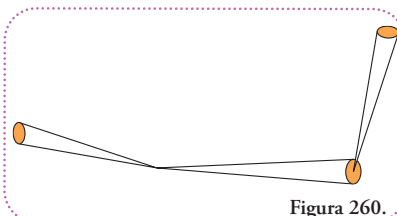


Figura 260.

enlaces 1-2 y 3-4 (Figura 261). ▮

Nuestro grupo de átomos con los que hemos trabajado son tres, el hidrógeno (H13), el oxígeno (O7) y el carbono (C1), nos hace falta un átomo más para definir un ángulo diedro. Elegiremos el átomo de carbono (C3), vecino al C1, ya que con respecto a él la comprobación de la rotación se obtiene inmediatamente. Aunque, si eligiéramos el otro carbono vecino C2, obtendríamos el mismo resultado, sólo que deberíamos hacer más operaciones (Figura 262). ▮



Figura 263.

▮ Para medir un ángulo diedro utilizamos el siguiente botón (Figura 263).

Podemos observar que hay cuatro puntos rojos, que representan los puntos necesarios para poder definir el ángulo diedro y tres letras griegas (omega – ω –, phi – ϕ – y psi – ψ –). Estas letras representan ángulos especialmente definidos para representaciones de proteínas. Nosotros deseamos obtener valores de ángulos diedros de moléculas no proteicas, para ellos debemos activar esta función mientras mantenemos presionada la tecla CTRL (control) del teclado. Entonces, si ejecutamos (Figura 264), el botón cambia de color y aparece una leyenda en letras rojas en inglés **PICK 1ST ATOM (OR HIT 'ESC')**, que quiere decir SELECCIONE EL PRIMER ÁTOMO (O PRESIONE LA TECLA 'ESC'). Debemos elegir el primer átomo (Figura 265). ▮

Una vez hecho esto, aparecerán, sucesivamente, las leyendas: **PICK 2ND ATOM (OR HIT 'ESC')**, para elegir el segundo átomo; **PICK 3RD ATOM (OR HIT 'ESC')**, para elegir el tercero y, finalmente, **PICK 4TH ATOM (OR HIT 'ESC')**, para elegir el último.

Seleccionaremos los átomos en la siguiente secuencia: hidrógeno (H13), oxígeno (O7), carbono (C1) y carbono (C3).

Aparecerá el valor medido y, nuevamente, la primera leyenda para que midamos otro ángulo (Figura 266). ▮

Éste es un esquema de la interpretación del ángulo diedro medido (Figura 267).

Midamos, a continuación, el mismo ángulo diedro en el archivo *fenol_2_operacion_2.mol*, o sea, el archivo de coordenadas antes de calcular la rotación, obtenemos el resultado que se visualiza en la figura 268.

Éste es un esquema de la interpretación del ángulo diedro medido (Figura 269).

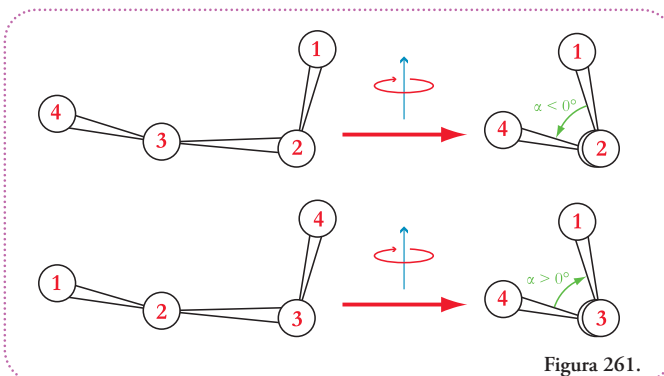


Figura 261.

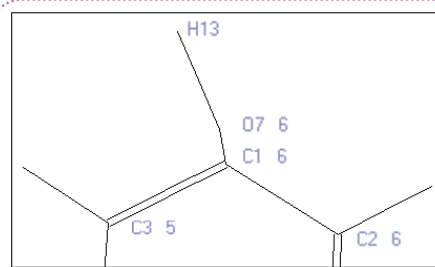


Figura 262.

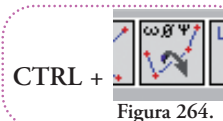


Figura 264.



Figura 265.



Figura 266.

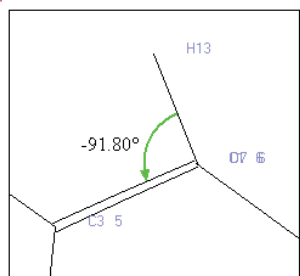


Figura 267.



Figura 268.

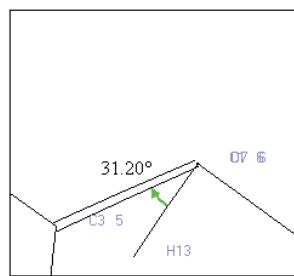


Figura 269.

Como dijimos, lo importante de estas medidas es el módulo y no el signo. Si sumamos los módulos de las amplitudes medidas, es decir, tomando todo valor como positivo obtenemos el ángulo de 123° que fue nuestra elección.

$$|-91,80^\circ| + |31,20^\circ| = 123,00^\circ$$

Si superponemos ambos esquemas observamos las posiciones antes y después de la modificación de coordenadas (Figura 270).

Como en la resolución general, ahora debemos volver a su posición original al oxígeno y obtener la posición final del hidrógeno.

Comenzaremos por realizar la operación contraria a la OPERACIÓN 2. Llamaremos a ésta OPERACIÓN -2.

Observemos un esquema del conjunto de átomos carbono (C1), oxígeno (O7) e hidrógeno (H13) a lo largo del eje y (Figura 271).

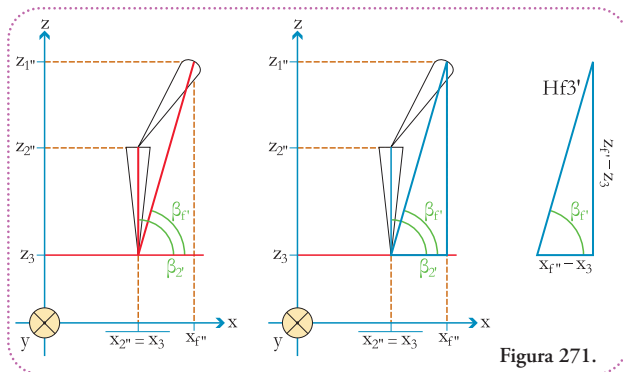


Figura 271.

Aplicando el Teorema de Pitágoras, obtenemos:

$$\begin{aligned} Hf3' &= ((x_F' - x_3)^2 + (z_F' - z_3)^2)^{1/2} \\ Hf3' &= ((7,1146 - 6,6324)^2 + (1,8551 - (-0,0174))^2)^{1/2} \\ Hf3' &= (0,4822^2 + 1,8725^2)^{1/2} \\ Hf3' &= (0,2325 + 3,5063)^{1/2} \\ Hf3' &= 3,7388^{1/2} \\ Hf3' &= 1,9336 \end{aligned}$$

Aplicando la función trigonométrica tangente podemos calcular β_F' :

$$\begin{aligned} \text{tg}(\beta_F') &= \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente} \\ \text{tg}(\beta_F') &= (z_F' - z_3) / (x_F' - x_3) \\ \beta_F' &= \text{arctg}((z_F' - z_3) / (x_F' - x_3)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\beta_f &= \arctg ((1,8551 - (-0,0174)) / (7,1146 - 6,6324)) \\ \beta_f &= \arctg (1,8725 / 0,4822) \\ \beta_{f'} &= \arctg (3,8832) \\ \beta_f &= 75,5590^\circ\end{aligned}$$

Como vamos a realizar operaciones, exactamente, inversas de las que realizamos, las nombraremos con un signo menos (-) adelante. 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 272).

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 β_2 , por lo tanto, son las coordenadas del oxígeno que ya las hemos calculado.

Debemos, sí, calcular las coordenadas del hidrógeno (x_f, y_f, z_f). Comenzaremos calculando la amplitud del ángulo β_f . La diferencia entre β_f y $\beta_{f'}$ es la misma que entre β_2 y β_2' , ya que giramos el conjunto en solidario, sabiendo que β_2' vale 90° , entonces planteamos:

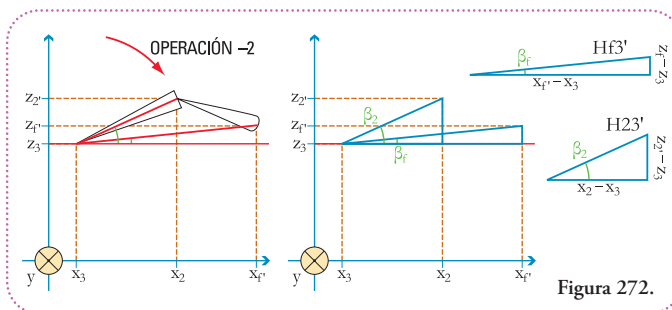
$$\begin{aligned}\beta_{f'} - \beta_f &= \beta_2 - \beta_2' \\ \beta_{f'} - \beta_f &= \beta_2 - 90^\circ \\ \beta_f &= \beta_2 - 90^\circ + \beta_{f'} \\ \beta_f &= 28,5639^\circ - 90^\circ + 75,5590^\circ \\ \beta_f &= 14,1229^\circ\end{aligned}$$

Calculemos la coordenada x_f , usaremos la función trigonométrica coseno:

$$\begin{aligned}\cos(\beta_f) &= \text{cateto adyacente} / \text{hipotenusa} \\ \cos(\beta_f) &= (x_f - x_3) / Hf3' \\ \cos(\beta_f) * Hf3' &= x_f - x_3 \\ \cos(\beta_f) * Hf3' + x_3 &= x_f\end{aligned}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\begin{aligned}x_f &= \cos(\beta_f) * Hf3' + x_3 \\ x_f &= \cos(14,1229^\circ) * 1,9336 + 6,6324 \\ x_f &= 0,9698 * 1,9336 + 6,6324 \\ x_f &= 1,8752 + 6,6324 \\ x_f &= 8,5076\end{aligned}$$



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

$$y_F = y_{F'}$$

$$y_F = -3,2334$$

La coordenada z_F la calcularemos aplicando la función seno al ángulo β_F :

$$\begin{aligned}\text{sen}(\beta_F) &= \text{cateto opuesto} / \text{hipotenusa} \\ \text{sen}(\beta_F) &= (z_F - z_3) / Hf3' \\ \text{sen}(\beta_F) * Hf3' &= z_F - z_3 \\ \text{sen}(\beta_F) * Hf3' + z_3 &= z_F\end{aligned}$$

Para ordenar mejor el resultado damos vuelta la ecuación:

$$\begin{aligned}z_F &= \text{sen}(\beta_F) * Hf3' + z_3 \\ z_F &= \text{sen}(14,1229^\circ) * 1,9336 + (-0,0174) \\ z_F &= 0,2440 * 1,9336 + (-0,0174) \\ z_F &= 0,4718 + (-0,0174) \\ z_F &= 0,4544\end{aligned}$$

Resumamos nuestros resultados:

$$\begin{aligned}x_F &= 8,5076 \\ y_F &= -3,2334 \\ z_F &= 0,4544\end{aligned}$$

Las coordenadas para el oxígeno (O7) son las mismas que obtuvimos al final de la operación 1:

$$\begin{aligned}x_2' &= 7,8268 \\ y_2' &= -3,9688 \\ z_2' &= 0,6328\end{aligned}$$

Modificando las coordenadas en el archivo .mol y guardándolo con el nombre de fenol_2_operacion_-2.mol, el resultado lo vemos en la **Figura 273**.

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 (OPERACIÓN -1) para posicionar el oxígeno y el hidrógeno en sus posiciones finales (**Figura 274**).

Observemos el triángulo que se ha formado definido por el eje auxiliar paralelo al eje y y la

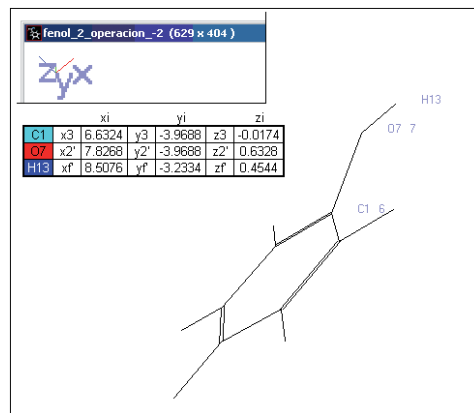


Figura 273.

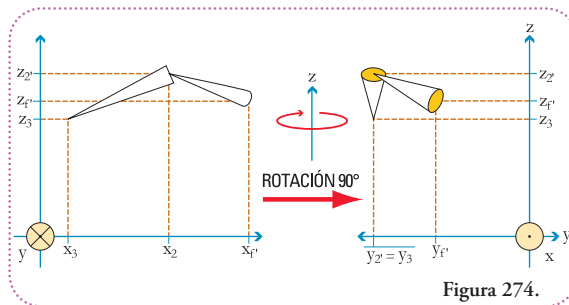


Figura 274.

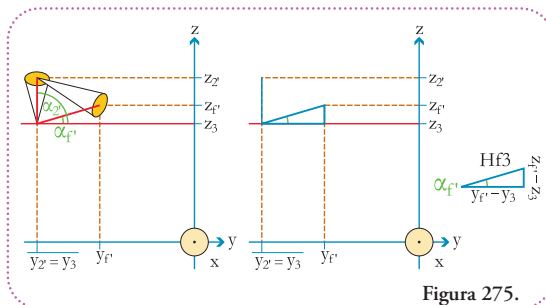


Figura 275.

posición del hidrógeno (Figura 275).

Debemos calcular $Hf3$ y α_F

Aplicando el Teorema de Pitágoras, obtenemos:

$$\begin{aligned}
 Hf3 &= ((y_F - y_3)^2 + (z_F - z_3)^2)^{1/2} \\
 Hf3 &= ((-3,2334 - (-3,9688))^2 + (0,4544 - (-0,0174))^2)^{1/2} \\
 Hf3 &= (0,7354^2 + 0,4718^2)^{1/2} \\
 Hf3 &= (0,5408 + 0,2226)^{1/2} \\
 Hf3 &= 0,7634^{1/2} \\
 Hf3 &= 0,8737
 \end{aligned}$$

Aplicando la función trigonométrica tangente podemos calcular α_F :

$$\begin{aligned}
 \text{tg}(\alpha_F) &= \text{cateto opuesto} / \text{cateto adyacente} \\
 \text{tg}(\alpha_F) &= (z_F - z_3) / (y_F - y_3) \\
 \alpha_F &= \arctg((z_F - z_3) / (y_F - y_3)) \\
 \alpha_F &= \arctg((0,4544 - (-0,0174)) / (-3,2334 - (-3,9688))) \\
 \alpha_F &= \arctg(0,4718 / 0,7354) \\
 \alpha_F &= \arctg(0,6416) \\
 \alpha_F &= 32,6842^\circ
 \end{aligned}$$

Como anteriormente, la diferencia entre los ángulos α_2 y α_2 (que ya lo hemos calculado luego de realizar la operación 1) debe ser la misma que entre α_F y α_F , ya que volvimos a rotar todo el conjunto en solidario.

Si lo escribimos en ecuaciones:

$$\begin{aligned}
 \alpha_F - \alpha_F &= \alpha_2' - \alpha_2 \\
 -\alpha_F &= \alpha_2' - \alpha_2 - \alpha_F \\
 \alpha_F &= -\alpha_2' + \alpha_2 + \alpha_F \\
 \alpha_F &= -90^\circ + 1,5334^\circ + 32,6842^\circ \\
 \alpha_F &= -55,7824^\circ
 \end{aligned}$$

Este resultado menor que cero nos indica que α_F está medido hacia abajo, es decir, en el sentido de las agujas del reloj, como podemos apreciar en el esquema de la figura 276.

Ahora ya tenemos todos los datos para calcular las coordenadas finales (x_F , y_F , z_F) del hidrógeno.

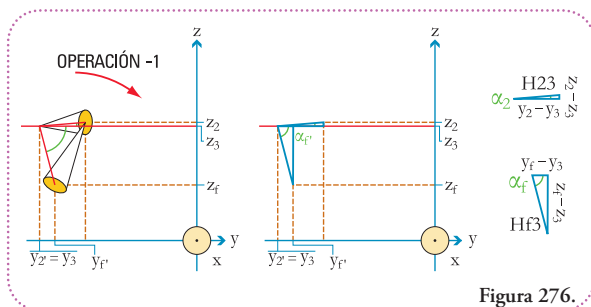


Figura 276.

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:

$$\begin{aligned}x_f &= x_f \\x_f &= 8,5076\end{aligned}$$

Con respecto a la coordenada y_f podemos utilizar la función coseno aplicada al ángulo α_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:

$$\begin{aligned}y_f &= \cos(\alpha_f) * Hf3 + y_3 \\ y_f &= \cos(-55,7824^\circ) * 0,8737 + (-3,9688) \\ y_f &= 0,5623 * 0,8737 + (-3,9688) \\ y_f &= 0,4913 + (-3,9688) \\ y_f &= -3,4775\end{aligned}$$

Bien, 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:

$$\begin{aligned}z_f &= \sin(\alpha_f) * Hf3 + z_3 \\ z_f &= \sin(-55,7824^\circ) * 0,8737 + (-0,0174) \\ z_f &= -0,8269 * 0,8737 + (-0,0174) \\ z_f &= -0,7225 + (-0,0174) \\ z_f &= -0,7399\end{aligned}$$

Las coordenadas finales del hidrógeno H13 luego de una rotación de 123° en el sentido de las agujas del reloj son:

$$\begin{aligned}x_f &= 8,5076 \\y_f &= -3,4775 \\z_f &= -0,7399\end{aligned}$$

Las coordenadas del oxígeno vuelven a ser las originales (Figura 277). ▶▶

$$\begin{aligned}x_2 &= 7,8268 \\y_2 &= -3,3188 \\z_2 &= 0,0000\end{aligned}$$

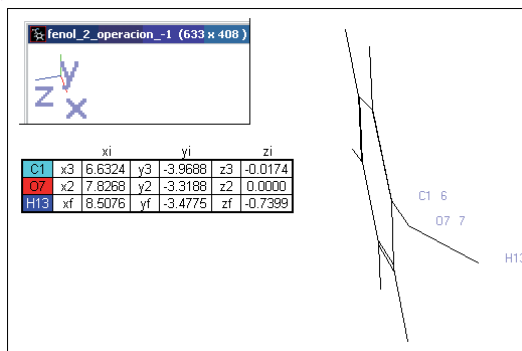


Figura 277.

Nuevamente, debemos comprobar que nuestro objetivo de calcular unas coordenadas que roten el hidrógeno (H13) 123° se haya alcanzado y que no se hayan alterado las distancias de los enlaces (Figura 278). ▶▶



Figura 278.

Como observamos al medir el ángulo diedro entre los átomos: hidrógeno (H13), oxígeno (O7), carbono (C1) y carbono (C3) tenemos un módulo de amplitud de 123° lo cual era nuestro objetivo.

Con respecto a la distancia entre átomos y los ángulos entre enlaces observamos lo siguiente (Figura 279). ▶▶

Al comparar estos valores con el archivo sin modificar, notamos que los valores son iguales a los resultantes de la operación 2 y no presentan desviaciones significativas de los de partida. (Tabla 2)

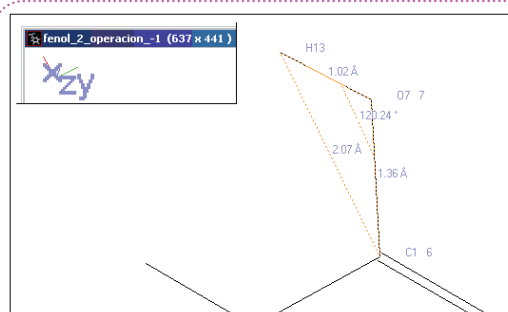


Figura 279.

Tabla 2.

	fenol_2.mol	fenol_2_operacion_-1.mol
Ángulo C1-O7-H13	120,00°	120,24°
Longitud C1-O7	1,36 Å	1,36 Å
Longitud O7-H13	1,01 Å	1,02 Å
Longitud C1-H13	2,06 Å	2,07 Å

Hemos culminado un cálculo de suma utilidad en el modelado de moléculas complejas. Para terminar presentaremos, a modo de ejemplo, otros grupos oxidrilos (-OH) presentes en moléculas frecuentes en nuestra vida cotidiana. Dibujaremos las siguientes moléculas en ACD/ChemSketch (Freeware) y, luego, observaremos las características tridimensionales en DeepView / Swiss PDB-Viewer.

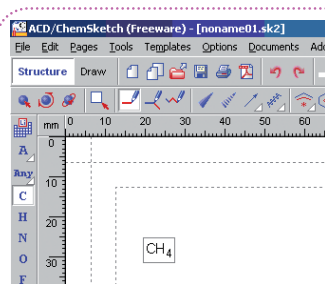


Figura 280.

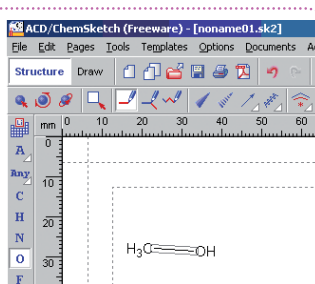


Figura 281.

Metanol ($\text{H}_3\text{C-OH}$)

Primero, dibujamos un CH_4 y, luego, agregamos un OH (el programa, automáticamente, sustituye un hidrógeno (H) por el grupo que estamos agregando) (Figuras 280 y 281).

Seleccionamos el botón de optimización para una representación tridimensional (Figura 282).

Y obtenemos (Figura 283).

Lo guardamos como archivo MDL Molfile (*.mol) con el nombre de metanol.mol. A continuación, debemos abrir este archivo en DeepView / Swiss PDB-Viewer (Figura 284).

Observemos que las longitudes de los enlaces y el ángulo que forman son similares a nuestro caso de trabajo.

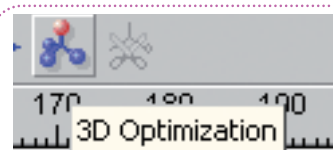


Figura 282.

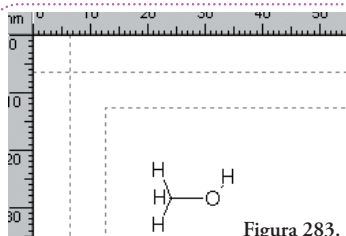


Figura 283.

Etanol ($\text{H}_3\text{C-H}_2\text{C-OH}$)

Procedemos de manera similar a la construcción del metanol pero, agregamos un CH_4 más al inicial, antes de agregar el OH y optimizamos para una representación tridimensional (Figuras 285 y 286).

Lo guardamos como archivo MDL Molfile (*.mol) con

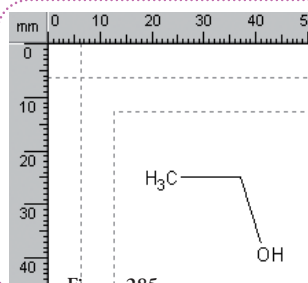


Figura 285.

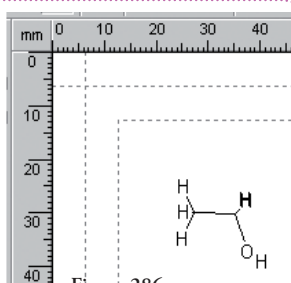


Figura 286.

el nombre de etanol.mol. Ahora debemos abrir este archivo en DeepView / Swiss PDB-Viewer.

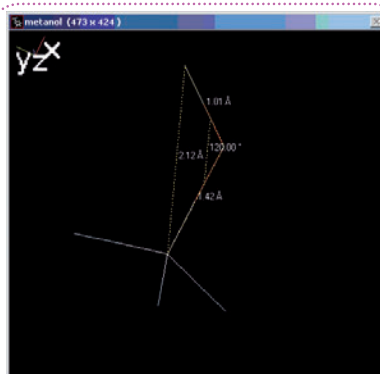


Figura 284.

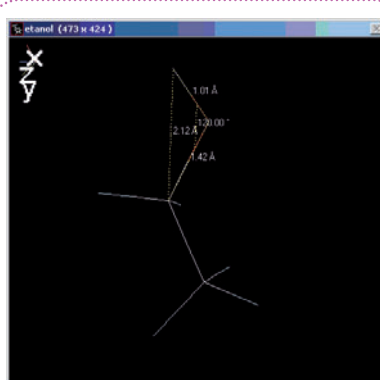


Figura 287.

Isopropanol

Procedemos de manera similar a la construcción del etanol pero, agregamos un CH_4 más al carbono del centro, antes de agregar el OH y optimizamos para una representación tridimensional (Figuras 288 y 289).

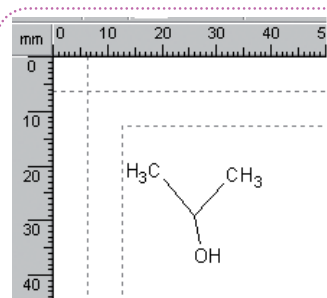


Figura 288.

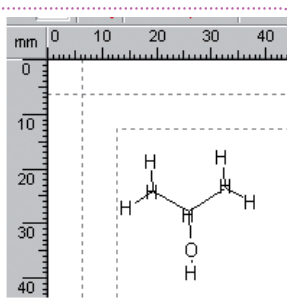


Figura 289.

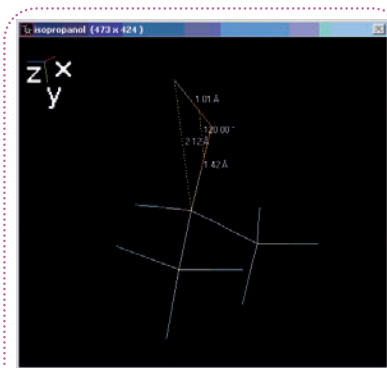


Figura 290.

Lo guardamos como archivo MDL Molfile (*.mol) con el nombre de isopropanol.mol. Luego, debemos abrir este archivo en

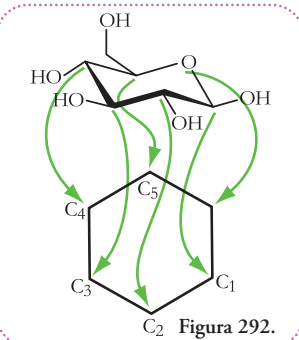


Figura 292.

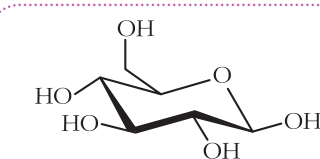


Figura 291.

DeepView / Swiss PDB-Viewer (Figura 290).

Como era de esperar los valores de distancias y ángulos no cambian.

Glucosa ($C_6H_{12}O_6$)

Esta molécula es un poco más difícil de construir, ya que es cíclica y tiene carbonos asimétrico (quirales), que hay que determinar correctamente.

Observemos una representación tridimensional de la glucosa que nos permitirá asignar en el ACD/ChemSketch (Freeware) la orientación de los oxidrilos y los hidrógenos (Figura 291).

Cinco carbonos y un oxígeno están formando un anillo de seis miembros (Figura 292).

Tomaremos de referencia el plano que corta el anillo y observaremos que los oxidrilos que apuntan hacia arriba o hacia abajo de dicho plano (amarillo) (Figura 293).

Así podemos decir que el oxidrilo del carbono 1 está hacia arriba, el del carbono 2 está apunta hacia abajo, el del carbono 3 está hacia arriba y el del carbono 4 está hacia abajo. Con respecto al carbono 5, éste está unido al carbono 6 por un enlace que apunta hacia arriba del plano.

Comenzaremos, entonces, primero por dibujar un ciclohexano, directamente, apretando su botón (Figura 294)

El resultado lo visualizamos en la figura 295.

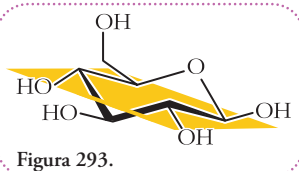


Figura 293.

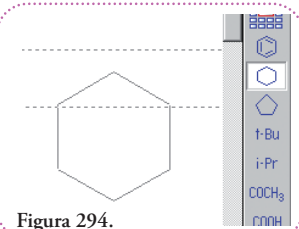


Figura 294.

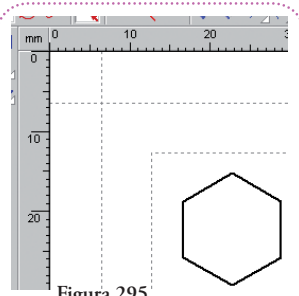


Figura 295.

Luego debemos agregar el oxígeno, los oxidrilos y el enlace carbono 5 – carbono 6 en la orientación correcta. Para ello usaremos la representación de enlaces en forma de cuña. La cuña continua indica que el extremo ancho sobresale del plano del papel, por el contrario, la cuña guionada indica que el extremo ancho se encuen-

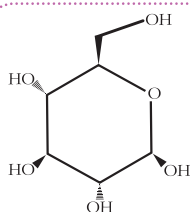


Figura 297.

tra por detrás del plano del papel (Figura 296).

Una vez realizada la ubicación de los grupos el resultado es el que se ve en la figura 297.

Optimizamos para una representación en tres dimensiones (Figura 298), y guardamos la estructura con el nombre de glucosa.mol. Al abrirla en DeepView / Swiss PDB-Viewer obtenemos (Figuras 299 y 300).

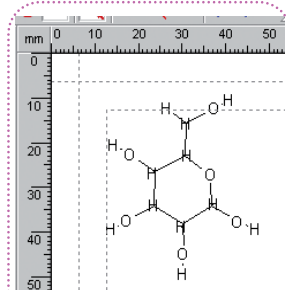


Figura 298.

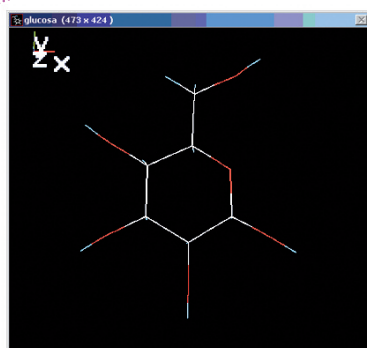


Figura 299.

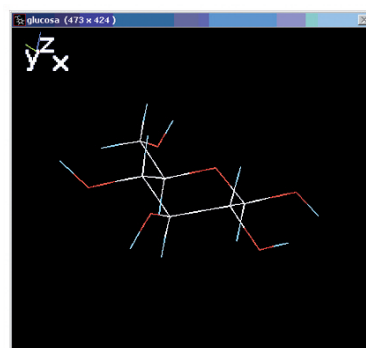


Figura 300.

Podemos notar la orientación alternada arriba y abajo de los oxidrilos y el enlace al carbono 6.

Sacarosa (azúcar de mesa; $C_{12}H_{22}O_{11}$)

Esta molécula es la más compleja de esta serie, pero podemos representarla con las mismas técnicas que usamos para construir las anteriores.

Ésta es una representación donde observamos la ubicación de los oxidrilos y los enlaces a los carbonos 6 (Figura 301).

Para comenzar agregaremos los sustituyentes a un ciclohexano y a un ciclopentano, representados por un hexágono y un pentágono, respectivamente, que luego uniremos (Figura 302).

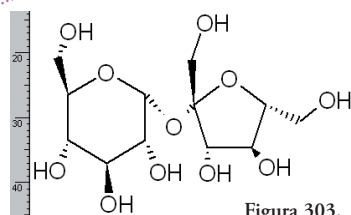


Figura 303.

El resultado se ve en la figura 303.

Luego de optimizar para una representación tridimensional, obtenemos la figura 304.

Guardamos esta representación en el archivo sacarosa.mol. Lo abrimos en DeepView / Swiss PDB-Viewer y podemos observar (Figuras 305 y 306).

Todos estos son modelos creados por un programa de computación que asigna distancias y ángulos a partir de sus propias bases de datos. Sería deseable contar con alguna medida directa

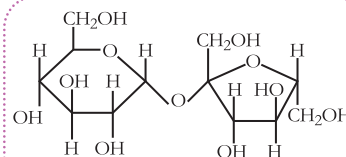


Figura 301.

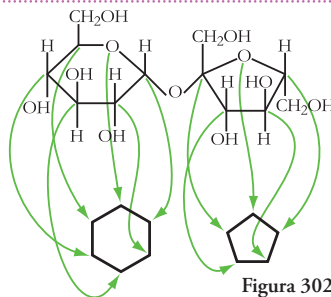


Figura 302.

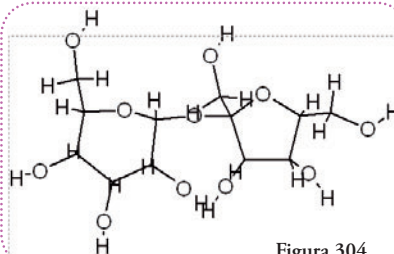


Figura 304.

de las distancias de los enlaces hidrógeno-oxígeno y carbono-oxígeno de un grupo oxidrilo del fenol y moléculas parecidas.

Existe una base de datos que agrupa estructuras de pequeñas moléculas obtenidas por difracción de rayos X por interposición de cristales de estas moléculas.

Esta base de datos se llama Cambridge Structure Database y contiene, hasta el año 2008, alrededor de 450.000 compuestos caracterizados, estructuralmente, por difracción de rayos x. Es posible buscar los datos estructurales de un grupo oxidrilo de la siguiente forma esquemática:

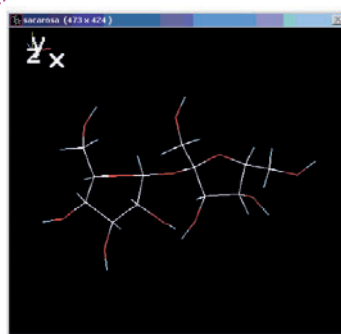


Figura 305.

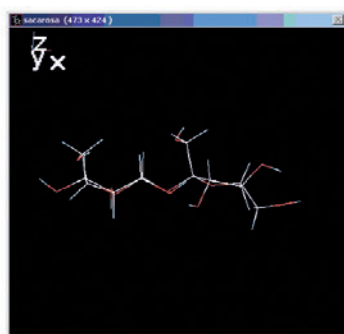


Figura 306.

1. Dibujar el grupo de tres átomos C-O-H.
2. Especificar el parámetro que deseamos que liste de las estructuras que contienen el grupo de átomos. Analizaremos la distancia media entre el hidrógeno y el oxígeno (dHO), entre el oxígeno y el carbono (dCO) y entre el hidrógeno y el carbono (dHC), también el ángulo entre los enlaces (aHOC) (Figura 307).

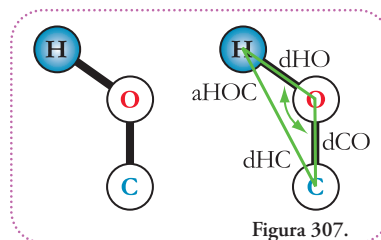


Figura 307.

Es posible especificar características más precisas, para cada átomo, de forma tal de restringir la búsqueda a cierto tipo de grupos oxidrilos. Para el hidrógeno especificaremos que establezca sólo una unión. Para el oxígeno sólo dos, para el carbono sólo tres. Aunque parece redundante, las especificaciones para el hidrógeno y el oxígeno, conviene hacerlo para asegurar que no haya casos especiales que sean incluidos en el resultado. El tipo de enlace, también, es posible determinarlo, ambos enlaces serán simples. El carbono está determinado como cíclico insaturado es decir, aromático, que forma parte de un sistema cíclico en el cual se alternan enlaces simples con dobles.

3. Ejecutar la búsqueda
4. Analizar la lista de los datos obtenidos para los parámetros requeridos.

Así, la búsqueda arrojó 12.005 registros que contienen uno o más de nuestros grupos oxidrilos tal cual los especificamos.

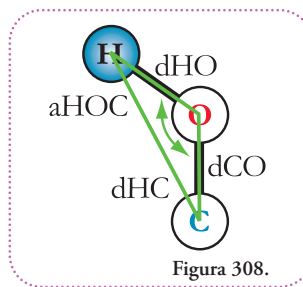
Estos son demasiados datos para trabajar. Restringiremos nuestra búsqueda al compuesto fenol. Extendemos las determinaciones que hicimos para el carbono al resto de los carbonos de molécula y a los hidrógenos que van unidos a ellos.

Realizamos nuevamente la búsqueda y obtenemos 65 registros que contienen 78 grupos

oxidrilos (Tabla 3 y Figura 308).

Tabla 3.

	N= 78 casos C-OH (fenol)	Desvío estándar
dHC [Å]	1,89	0,12
dHC [Å]	0,90	0,12
dCO [Å]	1,36	0,03
aHCO [°]	111,79	6,77



Este número es más tratable y podemos comparar los parámetros pedidos determinados experimentalmente con los mismos parámetros generados por el programa ACD/ChemSketch (Freeware) (Tabla 4).

Tabla 4.

	fenol_2.mol	N= 78 casos C-OH (fenol)	Diferencia	% de error
Ángulo C1-O7-H13 \equiv aHCO	120,00°	111,79°	8,21°	7
Longitud C1-O7 \equiv dCO	1,36 Å	1,36 Å	0,00 Å	0
Longitud O7-H13 \equiv dHO	1,01 Å	0,90 Å	0,11 Å	11
Longitud C1-H13 \equiv dHC	2,06 Å	1,89 Å	0,17 Å	8

Los resultados muestran que los valores puestos por el programa difieren alrededor del 10% con respecto a los valores obtenidos, experimentalmente. En el caso del ángulo era esperable ya que por la TRePEV el oxígeno presenta una geometría tetraédrica al considerar los 2 pares electrónicos no compartidos.

Si lo deseáramos, podríamos ajustar las coordenadas del archivo .mol tal que reprodujeran estos valores.

¿Cómo lo haríamos?

Todas las operaciones necesarias ya las hemos realizado en general. Observemos qué enlaces son los que varían, la distancia del carbono al oxígeno no cambia, entonces, sólo, la distancia del oxígeno es la que varía y el ángulo entre los enlaces, por lo tanto, nuevamente, sólo variando la posición del hidrógeno lograremos satisfacer estas distancias.

No debemos olvidar que la distancia entre el hidrógeno y el carbono será resultante de satisfacer las distancias entre el carbono y el oxígeno y, éste y el hidrógeno y el ángulo entre los enlaces respectivos.

Intento de generalización

Con este caso particular de rotación de 123° del hidrógeno, hemos comprobado la utilidad de la solución, en general, con la que comenzamos el capítulo. Intentaremos, por último, expresar una función matemática cuya entrada sean las coordenadas iniciales y un ángulo; y, su salida, sea las coordenadas finales. Más allá del esfuerzo matemático para llegar a esta formulación algebraica, la utilidad de esta función será que la podremos codificar en un algoritmo que pueda ser computado, automáticamente, y repetidas veces para tener las coor-

denadas finales luego, no de una rotación, sino de cuántas deseemos estudiar, pero a su vez, no sólo de un par de enlaces particulares sino que a cualquier par de enlaces.

Razonemos un poco alrededor de esta función que aún desconocemos. Debemos reconocer todos los datos necesarios para que se pueda aplicar en general, es decir, a cualquier par de enlaces que deseemos estudiar.

Esta función es, en realidad, un conjunto de tres funciones, una para cada coordenada:

$$\begin{aligned}x_f &= f(\gamma, x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, x_3, y_3, z_3) \\y_f &= f(\gamma, x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, x_3, y_3, z_3) \\z_f &= f(\gamma, x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, x_3, y_3, z_3)\end{aligned}$$

Si quisiéramos tener todas las relaciones entre las variables expresadas en función sólo de las coordenadas iniciales y en una única fórmula, se generaría una expresión tan complicada que sería difícil escribirla.

Sería como darnos cuenta que una mamushka sola no puede equilibrar la balanza ya que del otro lado la mamushka que vemos tiene en su interior varias más (Figura 309).

Una solución es repartir el trabajo en etapas o capas. Éstas son las etapas de cálculo para hallar una rotación en general.

Primera capa de ecuaciones:

$$\begin{aligned}x_f &= x_f \\y_f &= \cos(\alpha_f) * ((y_f - y_3)^2 + (z_f - z_3)^2)^{1/2} + y_3 \\z_f &= \sin(\alpha_f) * ((y_f - y_3)^2 + (z_f - z_3)^2)^{1/2} + z_3 \\\alpha_f &= -90^\circ + \arctg((z_2 - z_3) / (y_2 - y_3)) + \arctg((z_f - z_3) / (y_f - y_3))\end{aligned}$$

Segunda capa de ecuaciones:

$$\begin{aligned}x_f &= \cos(\beta_f) * ((x_f' - x_3)^2 + (z_f' - z_3)^2)^{1/2} + x_3 \\y_f &= y_f' \\z_f &= \sin(\beta_f) * ((x_f' - x_3)^2 + (z_f' - z_3)^2)^{1/2} + z_3 \\\beta_f &= \arctg((z_2' - z_3) / (x_2' - x_3)) - 90^\circ + \arctg((z_f' - z_3) / (x_f' - x_3))\end{aligned}$$

Tercera capa de ecuaciones:

$$\begin{aligned}x_f' &= \sin(-\varepsilon) * ((x_1'' - x_2'')^2 + (y_1'' - y_2'')^2)^{1/2} + x_2'' \\y_f' &= \cos(-\varepsilon) * ((x_1'' - x_2'')^2 + (y_1'' - y_2'')^2)^{1/2} + y_2'' \\z_f' &= z_1'' \\\varepsilon &= \gamma - \arctg((x_1'' - x_2'') / (y_1'' - y_2''))\end{aligned}$$

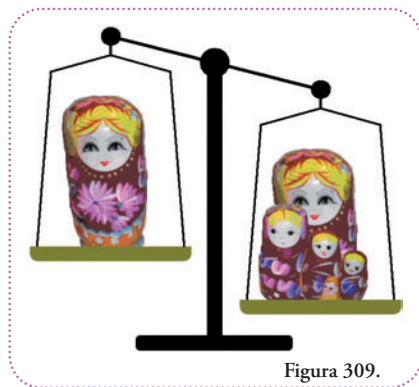


Figura 309.

Cuarta capa de ecuaciones:

$$\begin{aligned}x_1'' &= \cos(\beta_1') * ((x_1 - x_3)^2 + (z_1 - z_3)^2)^{1/2} + x_3 \\y_1'' &= y_1' \\z_1'' &= \sin(\beta_1') * ((x_1 - x_3)^2 + (z_1 - z_3)^2)^{1/2} + z_3 \\\beta_1' &= 90^\circ - \arctg((z_2' - z_3) / (x_2 - x_3)) + \arctg((z_1' - z_3) / (x_1 - x_3)) \\x_2'' &= x_3 \\y_2'' &= y_3 \\z_2'' &= ((x_2 - x_3)^2 + (z_2 - z_3)^2)^{1/2} + z_3\end{aligned}$$

Quinta capa de ecuaciones:

$$\begin{aligned}x_1' &= x_1 \\y_1' &= \cos(\alpha_1') * ((y_1 - y_3)^2 + (z_1 - z_3)^2)^{1/2} + y_3 \\z_1' &= \sin(\alpha_1') * ((y_1 - y_3)^2 + (z_1 - z_3)^2)^{1/2} + z_3 \\\alpha_1' &= 90^\circ - \arctg((z_2 - z_3) / (y_2 - y_3)) + \arctg((z_1 - z_3) / (y_1 - y_3)) \\x_2' &= x_2 \\y_2' &= y_3 \\z_2' &= ((y_2 - y_3)^2 + (z_2 - z_3)^2)^{1/2} + z_3\end{aligned}$$

Para obtener las coordenadas buscadas para otros ángulos, aprovecharemos a presentar el uso de los programas tipo planilla de cálculo que nos facilitará la resolución en cuanto al orden de los cálculos intermedios. Usaremos el programa de este tipo más popular el MICROSOFT OFFICE EXCEL. Hay muchas versiones y, generalmente, viene preinstalado y listo para ser usado en cualquier computadora hogareña cuyo sistema operativo sea Windows.

¿En qué consiste el un programa de planillas de cálculo?

Lo ilustramos con un ejemplo sencillo; supongamos que vamos a la verdulería a comprar manzanas, bananas y duraznos. Cada producto tiene su precio por kilogramos, supongamos que el precio del kg de manzana fuera de \$10,-, de bananas \$8,- y de duraznos \$12,-. Podemos calcular el costo de cualquier compra sabiendo cuántos kg compramos de cada producto y multiplicándolo por su precio por kg. Luego, sumamos los montos finales y tenemos el costo final de nuestra compra de frutas. Pero supongamos que debemos hallar el costo, no de una compra sino de 100 compras distintas; los programas de planillas de cálculo nos permiten armar una función que nos devolverá el costo final de la compra si nosotros le indicamos, únicamente, los kg de fruta de cada tipo. En EXCEL sería así, la pantalla inicial nos muestra celdas en las cuales podemos escribir texto, a modo de etiquetas, o indicar que en esa celda aparezca el resultado de una operación entre dos o más celdas. Como podemos observar, cada celda está identificada por una columna (letras mayúsculas) y por una fila (en números).

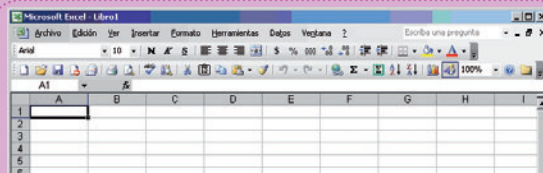


Figura 310.

(Figura 310).

Para resolver nuestro ejemplo escribiremos en la celda A1 lo que representa el número que escribiremos en la celda B1. Haremos lo mismo con las celdas A2 y A3, este es el resultado (Figura 311).

Vemos que los valores en las celdas B1, B2 y B3 son los pesos que cuesta el kg de cada fruta.

A continuación, debemos indicar celdas similares para la cantidad de fruta que tendrá una compra y el costo de cada una. (Figura 312).

Vemos cómo indicamos, fácilmente, multiplicación de los kg de manzana (B5) por el costo de un kg de la fruta (B1). Una operación entre celdas se llama fórmula; para indicar que escribiremos una fórmula comenzaremos con un signo de igual (=) luego el nombre de la celda (B5), la operación que deseamos hacer, en este caso la multiplicación indicada con un asterisco (*), y la otra celda (B1) por la cual queremos multiplicar a la primera (B5).

Para el ítem banana la fórmula será “=B6*B2”; y para el ítem durazno será “=B7*B3”.

Para realizar la suma final, escribiremos en la celda que deseamos que aparezca el costo de la compra (en este caso será la celda B13) la siguiente fórmula “=suma(B9:B11)”. El igual cumple la misma función que antes, indica que queremos que aparezca en esa celda el resultado de una operación entre celdas. La palabra “suma” indica el nombre de la función que queremos que realice, en este caso, justamente, se trata de la suma de celdas. Para esta función debemos indicar el rango, es decir cuáles celdas queremos que sume. Lo indicamos entre paréntesis y, entre la celda inicial del rango y la final, escribimos los dos puntos (:) para ordenar que sume de la celda B9 hasta la B11 inclusive. (Figura 313).

Como no hemos indicado la cantidad de kg de cada fruta el resultado será cero. Pero supongamos que nuestra compra es de 3 kg de manzanas 2 de bananas y medio kg de duraznos. (Figura 314).

De inmediato obtenemos el resultado de los cálculos parciales (\$30,- de manzanas, \$16,- de bananas y \$6,- de duraznos) y el costo final (\$52,-).

	A	B	C	D
1	\$ Kilo de manzana	10		
2	\$ Kilo de banana	8		
3	\$ Kilo de durazno	12		
4				

Figura 311.

	A	B
1	\$ Kilo de manzana	10
2	\$ Kilo de banana	8
3	\$ Kilo de durazno	12
4		
5	Kilos comprados de manzana	
6	Kilos comprados de banana	
7	Kilos comprados de durazno	
8		
9	\$ Costo de manzana	=B5*B1
10	\$ Costo de banana	
11	\$ Costo de durazno	
12		

Figura 312.

	A	B
1	\$ Kilo de manzana	10
2	\$ Kilo de banana	8
3	\$ Kilo de durazno	12
4		
5	Kilos comprados de manzana	
6	Kilos comprados de banana	
7	Kilos comprados de durazno	
8		
9	\$ Costo de manzana	0
10	\$ Costo de banana	0
11	\$ Costo de durazno	0
12		
13	\$ Costo total	=suma(B9:B11)

Figura 313.

	A	B
1	\$ Kilo de manzana	10
2	\$ Kilo de banana	8
3	\$ Kilo de durazno	12
4		
5	Kilos comprados de manzana	3
6	Kilos comprados de banana	2
7	Kilos comprados de durazno	0.5
8		
9	\$ Costo de manzana	30
10	\$ Costo de banana	16
11	\$ Costo de durazno	6
12		
13	\$ Costo total	52
14		

Figura 314.

Esta planilla de cálculo puede respondernos, fácilmente, otras cuestiones como por ejemplo, ¿cuánto sería el costo si los precios variaran (como lo hacen según la estación)? Supongamos que aumentara el kg de banana, de \$8,- a \$8,50,- y disminuyera el kg de durazno, de \$12,- a \$8,30. La planilla recalcula todos los valores que se ven afectados por estos cambios y tenemos nuestro valor final, automáticamente. (Figura 315).

Bien, este ejemplo sencillo nos servirá para hacer la planilla que nos recalculará las coordenadas de los hidrógenos para obtener las coordenadas que necesitamos.

	A	B
1	\$ Kilo de manzana	10
2	\$ Kilo de banana	8.5
3	\$ Kilo de durazno	8.3
4		
5	Kilos comprados de manzana	3
6	Kilos comprados de banana	2
7	Kilos comprados de durazno	0.5
8		
9	\$ Costo de manzana	30
10	\$ Costo de banana	17
11	\$ Costo de durazno	4.15
12		
13	\$ Costo total	51.15
14		

Figura 315.

Cuando hablamos de la generalización de los resultados obtenidos a lo largo del capítulo, distinguimos cinco capas de ecuaciones con sus relaciones entre sí. La resolución no consiste en otra cosa que escribir, correctamente, las ecuaciones en una planilla de cálculos e indicarle los valores iniciales. El programa hará las cuentas por nosotros, las cuales no son pocas.

Antes de ir directamente a la planilla de cálculos debemos conocer algunas particularidades del código de escritura en EXCEL. Nosotros usaremos las funciones trigonométricas y sus inversas que tienen una notación particular en EXCEL. Esta es la equivalencia: (Tabla 5).

Tabla 5.

Función	Nomenclatura matemática	Nomenclatura EXCEL
Seno	sen	SENO()
Coseno	cos	COS()
Tangente	tg	TG()
Arcoseno	arcsen	ARCSEN()
Arcocoseno	arcos	ARCOS()
Arcotangente	arctg	ARCTG()

Una última aclaración que hay que hacer es que la medición de la amplitud de un ángulo se puede hacer de varias formas. Una es la conocida por todos, es la medición por grados sexagesimales (°) y otra, sumamente útil, es la de medición por radianes (rad) (para más detalles ver apéndice al final del libro). Así como una amplitud α en grados (°) puede ser:

$$0^\circ \leq \alpha < 360^\circ$$

En radianes esta amplitud estará en el rango de valores:

$$0 \leq \alpha < 2\pi \text{ rad} = 6,2832 \text{ rad}$$

La conversión de un sistema a otro es muy sencilla, se hace por regla de tres simple al establecer la equivalencia entre 360° y $6,2832 \text{ rad}$. Podemos establecer la siguiente igualdad:

$$360^\circ = 6,2832 \text{ rad}$$

$$1^\circ = (6,2832 / 360) \text{ rad}$$

$$1^\circ = 0,0175 \text{ rad}$$

En EXCEL los ángulos se miden en radianes, pero hay una función para transformar el valor en grados sexagesimales automáticamente de modo que tampoco tendremos que hacer esa cuenta. La función se llama GRADOS, transforma radianes a grados. La función inversa a esta se llama RADIANES, transforma grados a radianes. Ejemplificaremos, brevemente, el uso de las funciones trigonométricas inversas y estas funciones de transformación. Observemos la tabla que tiene los valores transformados de unas unidades a otras (Figura 316).

G	H
Angulo en grados	45
Angulo de 45° en radianes	0.7854
Seno de 0.7854	0.7071
Seno de 0.7854 expresado en grados	0.7071
Arcoseno 0.8509 en radianes	0.7854
Arcoseno 0.8509 en grados	45

Figura 316.

Y observemos la construcción de las fórmulas que dan estos resultados. Transformación del valor “45”, que para nosotros representa un ángulo de 45° en un ángulo de 0,7854 rad (Figura 317).

G	H
Angulo en grados	45
Angulo de 45° en radianes	=RADIANES(H2)

Figura 317.

A este ángulo expresado en radianes le calculamos el seno (Figura 318).

G	H
Angulo en grados	45
Angulo de 45° en radianes	0.7854
Seno de 0.7854	=SENO(H4)

Figura 318.

A este ángulo expresado en grados le calculamos el seno. Observemos que podemos formar una fórmula componiendo funciones. Es decir, como argumento de la función SENO podemos poner la función RADIANES aplicada a la celda que contiene el “45” (H2).

G	H
Angulo en grados	45
Angulo de 45° en radianes	0.7854
Seno de 0.7854	0.7071
Seno de 0.7854 expresado	=SENO(RADIANES(H2))

Figura 319.

Esto es útil que ya que nos ahorra tener que definir una celda en la cual esté el resultado de la transformación. Esto mismo es lo que hemos hecho aquí (celda H4) sólo con fines didácticos (Figura 319).

Seno de 0.7854 expresado en grados	0.7071
Arcoseno 0.8509 en radianes	=ASENO(H8)

Figura 320.

Ahora, queremos recuperar los valores de los ángulos a partir del resultado de la aplicación de la función trigonométrica seno. Esta fórmula dará el valor del ángulo en radianes (Figura 320).

Seno de 0.7854 expresado en grados	0.7071
Arcoseno 0.8509 en radianes	0.7854
Arcoseno 0.8509 en g	=GRADOS(ASENO(H8))

Figura 321.

Nuevamente, utilizamos el recurso de la composición de funciones para obtener el resultado en las unidades que deseamos (Figura 321).

Y estamos en condiciones de transcribir las ecuaciones generales que hemos hallado al lenguaje de la planilla de cálculos EXCEL.

A continuación mostramos los resultados de la transcripción de las cinco capas de fórmulas para obtener las coordenadas de rotación 170° del hidrógeno a partir de nuestro modelo de fenol.mol (Figuras 322 a 325).

A1		B1	
Coordenadas iniciales		Coordenadas iniciales	
1	Coordenadas iniciales		
2		HIDROGENO	
3	x1	7.8522	x1
4	y1	-2.3024	y1
5	z1	0.0242	z1
6		OXYGENO	
7	x2	7.8268	x2
8	y2	-3.3188	y2
9	z2	0.0000	z2
10		CARBONO	
11	x3	6.6324	x3
12	y3	-3.9688	y3
13	z3	-0.0174	z3
14			
15	Quinta capa de ecuaciones		
16			
17	x1'' = x1	7.8522	
18	y1'' = cos($\alpha 1'$) * ((y1 - y3) ² + (z1 - z3) ²) ^{1/2} + y3	-3.9650	
19	z1'' = sen($\alpha 1'$) * ((y1 - y3) ² + (z1 - z3) ²) ^{1/2} + z3	1.6445	
20	$\alpha 1' = 90^\circ - \arctg((z2 - z3) / (y2 - y3)) + \arctg((z1 - z3) / (y1 - y3))$	89.8699	
21			
22	x2'' = x2	7.8268	
23	y2'' = y2	-3.9688	
24	z2'' = ((y2 - y3) ² + (z2 - z3) ²) ^{1/2} + z3	0.6320	

Figura 322.

45	Segunda capa de ecuaciones:		
46			
47	x4'' = cos($\beta 1'$) * ((x2'' - x3) ² + (x1'' - z3) ²) ^{1/2} + x3	8.8842	
48	y4'' = y4''	-3.8203	
49	z4'' = sen($\beta 1'$) * ((x2'' - x3) ² + (x1'' - z3) ²) ^{1/2} + z3	0.1162	
50	$\beta 1' = \arctg((z2'' - z3) / (x2 - x3)) - 90^\circ + \arctg((z1'' - z3) / (x1'' - x3))$	3.7251	
51			
52	Primera capa de ecuaciones:		
53			
54	x4' = x4''	8.8842	
55	y4' = cos($\alpha 4'$) * ((y4'' - y3) ² + (x4'' - z3) ²) ^{1/2} + y3	-3.8313	
56	z4' = sen($\alpha 4'$) * ((y4'' - y3) ² + (x4'' - z3) ²) ^{1/2} + z3	-0.1622	
57	$\alpha 4' = -90^\circ + \arctg((z2 - z3) / (y2 - y3)) + \arctg((x4'' - z3) / (y4'' - y3))$	-46.8860	

Figura 324.

26	Cuarta capa de ecuaciones:		
27			
28	x1''' = cos($\beta 1''$) * ((x1'' - x3) ² + (z1'' - z3) ²) ^{1/2} + x3	5.7560	
29	y1''' = y1''	-3.9650	
30	z1''' = sen($\beta 1''$) * ((x1'' - x3) ² + (z1'' - z3) ²) ^{1/2} + z3	1.8495	
31	$\beta 1'' = 90^\circ - \arctg((z2'' - z3) / (x2 - x3)) + \arctg((z1'' - z3) / (x1 - x3))$	115.1581	
32			
33	x2''' = x2	6.6324	
34	y2''' = y2	-3.9688	
35	z2''' = ((x2 - x3) ² + (z2 - z3) ²) ^{1/2} + z3	1.3425	
36			
37	Tercera capa de ecuaciones:		
38			
39	y	170.0000	
40	x4''' = sen(ϕ) * ((x1''' - x2''' ² + (y1''' - y2''' ²) ^{1/2} + x2'''	7.4961	
41	y4''' = cos(ϕ) * ((x1''' - x2''' ² + (y1''' - y2''' ²) ^{1/2} + y2'''	-3.8203	
42	z4''' = z1'''	1.8495	
43	$\phi = y - \arctg((x1''' - x2''') / (y1''' - y2'''))$	-80.2467	

Figura 323.

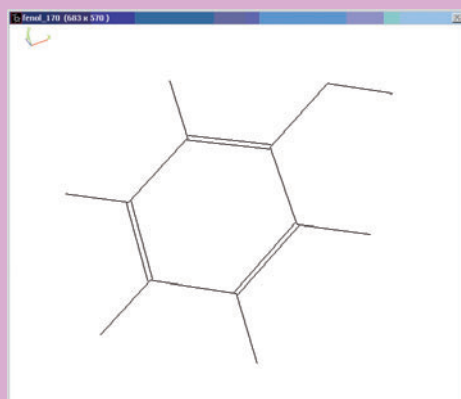


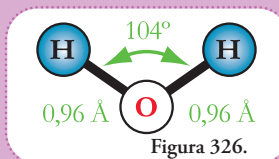
Figura 325.

Actividad

PROBLEMA 1

Coordenadas del agua

Deseamos construir las coordenadas de la molécula de agua (H_2O). La longitud del enlace hidrógeno-oxígeno es de $0,96 \text{ \AA}$ y el ángulo entre los enlaces es de 104° . El origen de coordenadas está ubicado en el oxígeno de modo tal que $x_{\text{O}} = 0$, $y_{\text{O}} = 0$, $z_{\text{O}} = 0$. Dar las coordenadas x_{H1} , y_{H1} , z_{H1} y x_{H2} , y_{H2} , z_{H2} para cada uno de los hidrógenos (Figura 326).



PROBLEMA 2

Se tienen dos átomos ubicados en el espacio cuyas coordenadas en el eje x tienen el mismo valor. Las coordenadas del primer átomo tienen el mismo valor: $x_1 = y_1 = z_1 = 0$. Las coordenadas del segundo átomo son $y_2 = 5,2500$ y $z_2 = 12,0000$.

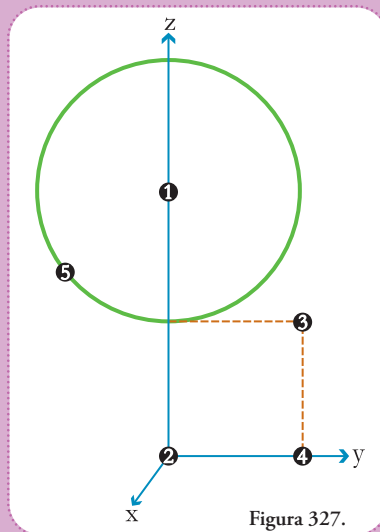
Graficar, esquemáticamente, las posiciones de los átomos, indicar sus coordenadas y averiguar la distancia entre los mismos.

PROBLEMA 3

Se observa que hay cinco átomos pertenecientes a una misma molécula que presentan el siguiente comportamiento: cuatro de ellos permanecen fijos y no modifican sus posiciones relativas unos a otros. El quinto átomo, en cambio, puede girar libremente alrededor de uno de ellos tal como muestra la figura. Todos los átomos comparten el mismo plano, o sea, el determinado por los ejes y y z . (Figura 333)

Hallar la distancia entre los átomos 2 y 5 cuando los átomos 5, 1 y 3 se encuentran eclipsados (en una misma línea) y en el caso que 5 esté opuesto con respecto a 1.

Datos: la distancia entre los átomos 2 y 4 y entre los átomos 4 y 3 es de 2 \AA . La distancia entre 2 y 1 es el doble que la distancia entre los átomos 2 y 4. El radio de giro del átomo 5 es la mitad que la distancia entre los átomos 1 y 2.



PROBLEMA 4

Nuevamente, tenemos el mismo grupo de cinco átomos del problema anterior. Debemos encontrar la distancia entre el átomo 2 y el 5 en la situación que éste se encuentre en la misma línea con los átomos 1 y 4.

PROBLEMA 5

A lo largo del capítulo hemos trabajado con un modelo de la molécula de fenol (archivo fenol_2.mol) que contiene las coordenadas espaciales de cada átomo y las conexiones entre ellos. A continuación exponemos las coordenadas de los carbonos 1 (C1), carbono 4 (C4) y carbono 5 (C5). El primer valor representa la coordenada en x , el segundo en y , y el tercero en z .

Carbono 1:	6.6324	-3.9688	-0.0174	C1
Carbono 4:	5.3806	-6.0162	-0.0670	C4
Carbono 5:	4.2329	-3.9080	-0.0211	C5

Verificar que las distancias entre estos tres carbonos forman un triángulo equilátero cuyos lados miden $2,40 \text{ \AA}$ como se muestra en la figura generada en el programa DeepView / Swiss-PdbViewer 3.7 (Figura 328).

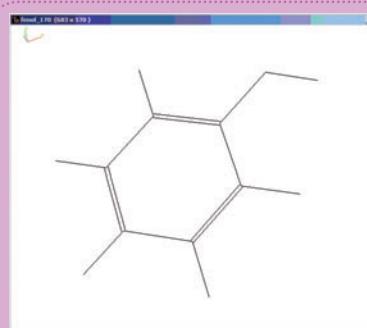


Figura 328.

PROBLEMA 6

El metano es una molécula sencilla (CH_4), los átomos de hidrógeno se disponen de forma tal de estar lo más alejados unos de otros. Si se ubican los vértices de un tetraedro regular en las posiciones de los núcleos de hidrógeno éste encajará perfectamente, por lo tanto, esta molécula se suele representar como un tetraedro regular con el carbono en su centro, equidistante de todos los hidrógenos (Figura 329).

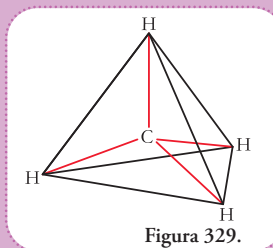


Figura 329.

Calcular el ángulo que forman los enlaces si la longitud de estos es de $1,1 \text{ \AA}$ y si al ubicar uno de ellos paralelo al eje z , con el origen de coordenadas en el carbono todos los demás hidrógenos resultan tener en la coordenada z un valor de $-0,37 \text{ \AA}$.

PROBLEMA 7

Deseamos construir un modelo molecular tal que los hidrógenos extremos estén, exactamente, a 10 \AA uno del otro. Además, ambos deben estar a 9 \AA de un tercer átomo.

Proporcionar las coordenadas que satisfagan las distancias e informar el ángulo que determinan estos tres átomos considerando al átomo mencionado en último lugar como referencia.

PROBLEMA 8

La interpretación de patrones de difracción de rayos X permite observar y medir, experimentalmente, la estructura molecular. Estos datos suelen utilizarse para determinar diferencias y coincidencias entre un modelo propuesto de la molécula expuesta a los rayos X.

Las entradas con los códigos RIGPED³ y VIGDEU⁴ de la base de datos Cambridge Structure Database⁵ de estructuras experimentales de pequeñas moléculas, contienen moléculas de fenol. En RIGPED hay 2 y en VIGDEU hay 1.

³ Publicada por G.Y.S.K.Swamy, B.Sridhar, K.Ravikumar, H.Krishnan en la revista Acta Crystallogr., Sect. C: Cryst. Struct. Commun. en el año 2007 en el volumen 63, en la página 437.

⁴ Publicada por M.Sommovigo, M.Pasquali, P.Leoni, D.Braga, P.Sabatino en la revista Chem. Ber. en el año 1991 en el volumen 127, en la página 97.

⁵ De distribución gratuita para Latinoamérica.

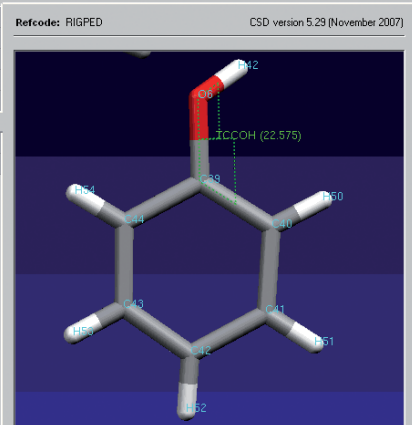


Figura 330.

En el caso el fenol que aparece en VIGDEU el ángulo diedro que forman los carbonos C35 y C36 y el oxígeno O2 y el hidrógeno H62 vale $-31,226^\circ$. En la figura está señalado por la etiqueta TCCOH $(-31,226)$ (Figura 332).

Las coordenadas espaciales (x, y, z) en formato de archivo .pdb (Protein Data Bank) de cada átomo son las indicadas en la figura 333.

Averiguar el ángulo que formarían los enlaces carbono-oxígeno, y la distancia a la que se encontrarían los oxígenos si superpusiéramos los carbonos del enlace.

PROBLEMA 9

Una representación del metanol (H_3COH) tiene las siguientes coordenadas espaciales para el oxígeno: $x_2 = 5,9728$; $y_2 = -5,3847$; $z_2 = 0,0000$ y para el hidrógeno del oxidrilo: $x_1 = 6,4871$; $y_1 = -4,6369$; $z_1 = 0,4476$. El ángulo que forman los enlaces carbono-oxígeno con el enlace oxígeno-hidrógeno es de 120° . El plano que contiene a los átomos de carbono, oxígeno e hidrógeno es perpendicular al plano definido por los ejes x y y . Considerando estas ubicaciones como posiciones iniciales, calcular las nuevas coordenadas del hidrógeno, luego de que éste rote alrededor del eje carbono-oxígeno un ángulo de 180° (Figura 334).

El fenol de RIGPED que nos interesa es el que se visualiza en la figura 330.

Observamos que el ángulo diedro o torcional entre los enlaces carbono-carbono (C39-C40) y oxígeno-hidrógeno (O6-H42) es de $22,575^\circ$. En la figura está señalado por la etiqueta TCCOH $(22,575)$. Éstas son sus coordenadas espaciales (x, y, z) en formato de archivo .pdb (Protein Data Bank) (Figura 331).

C39	UNK	O	1	7.341	14.050	2.985
C40	UNK	O	1	8.150	13.340	2.145
O6	UNK	O	1	7.543	14.146	4.326
H42	UNK	O	1	8.342	14.005	4.638

Figura 331.

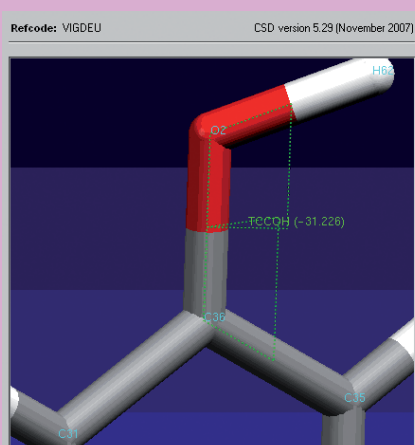


Figura 332.

C36	UNK	O	1	4.992	5.594	-7.293
C37	UNK	O	1	0.684	5.186	-10.953
O2	UNK	O	1	3.949	4.929	-7.785
H62	UNK	O	1	3.674	3.979	-7.116

Figura 333.

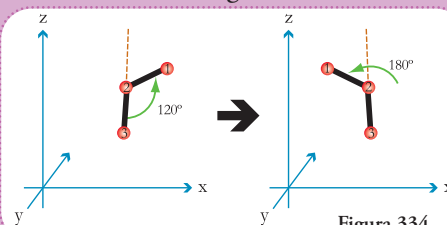


Figura 334.

PROBLEMA 10

Una representación del metanol (H_3COH) tiene las siguientes coordenadas espaciales para el oxígeno:

$$x_2 = 5,9728; y_2 = -5,3847; z_2 = 0,0000 \text{ y}$$

para el hidrógeno del oxidrilo:

$$x_1 = 6,4871; y_1 = -4,6369; z_1 = 0,4476.$$

Para el carbono las coordenadas espaciales son:

$$x_3 = 4,5534; y_3 = -5,3526; z_3 = -0,0279.$$

El ángulo que forman los enlaces carbono-oxígeno con el enlace oxígeno-hidrógeno es de 120° . Considerando estas ubicaciones como posiciones iniciales, calcular las nuevas coordenadas del hidrógeno, luego de que éste rote alrededor del eje carbono-oxígeno un ángulo de 180° .