

Modelado molecular orientado á Bioloxía do Bacharelato LOXSE. ChemOffice.

Carlos de Paz¹

Resumo

Preséntanse algúns exemplos de utilización das ferramentas informáticas de deseño e modelado molecular. Lonxe de ser un manual de usuario, preténdese cubrir unha primeira aproximación á utilización de ChemDraw e Chem3D tomando como referencia algúns problemas propios dos estudos de Bioloxía no Bacharelato.

Introducción

Dentro do DCB de Bioloxía do Bacharelato está a unidade “Compoñentes moleculares das células: tipos, estruturas, propiedades e papel que desempeñan”, así como o estudo de procesos metabólicos dentro do bloque “Fisioloxía Celular”. Entre os obxectivos se especifica *“ter certa autonomía nas estratexias características da investigación científica (...) utilizando os procedementos propios da Bioloxía para simular pequenas investigacións de xeito teórico (usando o ordenador) (...)”*

Un dos principais obstáculos no ensino-aprendizaxe de Bioloxía no Bacharelato é a observación das biomoléculas como estruturas tridimensionais. A estrutura espacial ten implicacións de suma importancia na práctica totalidade dos procesos biolóxicos e se-la responsable das propiedades dos diferentes compostos e, polo tanto, do seu comportamento. É imprescindible que os alumnos e alumnas acaden unha imaxe mental das biomoléculas máis aló do plano do papel ou o encerado, o que sen dúbida se traduce nun mellor entendemento de estruturas celulares e procesos bioquímicos.

Neste sentido, o paquete ChemOffice é unha potente ferramenta para a EAO da Bioloxía, deseñado para axudar no debuxo, a visualización de estruturas químicas e a organización de datos. Por unha banda, fronte ós clásicos modelos moleculares de varíñas e bolas, os programas informáticos presentan a vantaxe de non ter limitado o número de elementos, o que é particularmente importante no caso que nos ocupa pola imposibilidade que suporía para formar modelos macromoleculares por parte de cada alumno e alumna. Por outra, a diferenza dos modelos estáticos do libro, o encerado, ou as diapositivas e transparencias, os ordenadores permiten interactuar cos modelos xerados poñendo en evidencia a disposición espacial, mediante diferentes códigos de cores e deseños, segundo as fins perseguidas.


Neste documento preséntanse distintos exemplos de creación de moléculas utilizando o ChemOffice. As principais funcións do programa ChemDraw e as posibilidades de visualización tridimensional do Chem3D. Finalmente se presentan outros complementos de aplicación do modelado molecular baseados na Web.

¹ Dpto. de Bioloxía e Xeoloxía. IES “A Sardiñeira”. A Coruña. cdepaz@edu.xunta.es

1. ChemDraw². Técnicas básicas de deseño molecular.

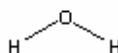
Para ilustrar este apartado o mellor é comezar co máis sinxelo e ir analizando os problemas que xurdan e o xeito de arranxalos.

Empezando de cero: debuxar unha molécula de auga

- Unha vez aberta a aplicación, selecciona-la ferramenta de ligazón simple:  facendo 'clic' sobre ela.
- Apuntar onde se quere situar ún calquera dos átomos.
- Arrastra-lo rato ó tempo que se preme o botón esquerdo ata debuxa-la primeira ligazón. Aparecerá unha liña na zona de debuxo.
- Para engadir a segunda ligazón, situarse sobre un dos extremos da primeira e repeti-lo proceso de arrastre ata que apareza formando o ángulo desexado. O debuxo así obtido será como o que segue:

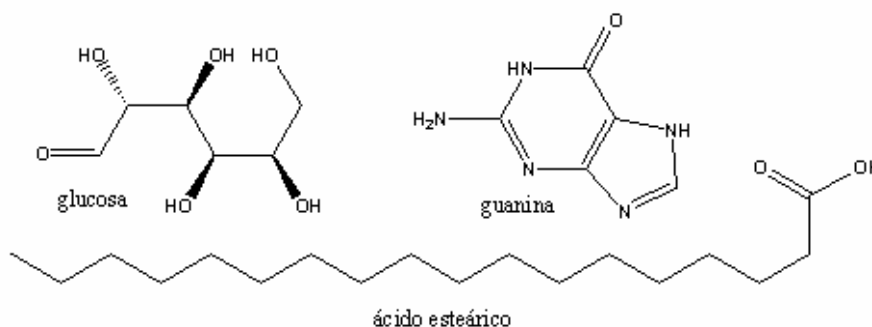


- Para inseri-las letras dos átomos, sitúa-lo cursor sobre a situación desexada ata que quede resaltado cun cadro negro a posición correcta dentro do debuxo (1 para o osíxeno, 2 e 3 para os hidróxenos) e preme-la letra correspondente en cada caso. O resultado é o seguinte:



De cero a cen nun par de parágrafos: debuxo “a man alzada”


Esta é a técnica básica para debuxar moléculas con ChemDraw. Para conseguir estruturas de moléculas máis complexas non hai máis que ir engadindo ligazóns. Dispónse de diferentes tipos (barra á esquerda na seguinte ilustración), incluíndo as características das proxeccións estereoquímicas. Para cambiar de tipo é preciso ter presente que se debe selecciona-la ferramenta correspondente antes de debuxa-la ligazón desexada. Para as ligazóns dobres se parte dunha simple e, coa mesma ferramenta, se fai 'clic' nun dos átomos implicados e se arrastra o rato ata o outro soltando mentres estea destacado. Combinando as ferramentas dispoñibles se poden chegar a debuxar moléculas como as seguintes:

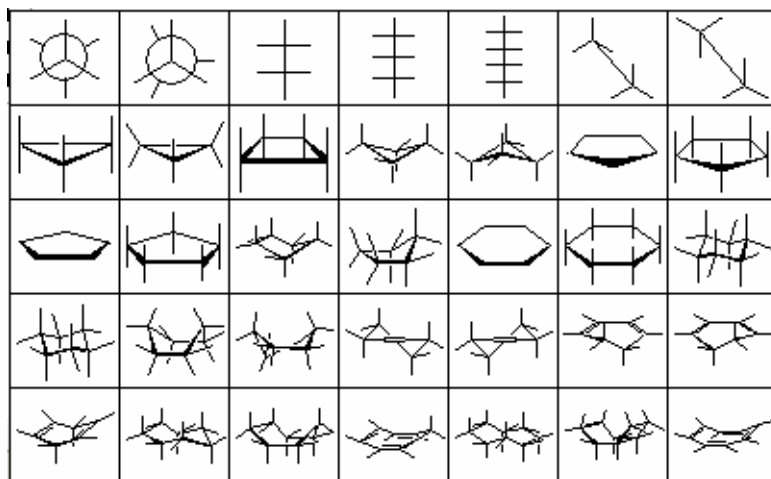


² En todo o artigo se da por suposto que o lector xa domina procedementos informáticos básicos, como recuperar e gardar arquivos ou copiar e pegar obxectos a través do portapapeis de Windows.


A diferenza de ChemDraw con outros programas de deseño gráfico vectorial (CorelDraw, Freehand,...) é que neste caso as estruturas obtidas non son só un conxunto de liñas nesta ou aquela dirección. Ben ó contrario, as liñas representan ligazóns químicas e os vértices que forman cando están xuntas representan elementos químicos; logo se non se indica o contrario, o programa asume que nun vértice existe un Carbono. E do mesmo modo, o programa trata sempre de completa-las valencias dos elementos que interveñen saturando con hidróxenos. Así, nos exemplos anteriores non foi preciso teclear tódolos símbolos químicos que aparecen senón que, por exemplo no caso da glicosa, os hidróxenos de cada grupo hidroxilo apareceron automaticamente o poñe-lo 'O' na súa posición. E o mesmo sucedeu no caso dos hidróxenos asociados ós nitróxenos na guanina.

Aforrando tempo: uso de “ferramentas-atallo”


ChemDraw incorpora un conxunto de galerías que permiten aforra-lo traballo de debuxar “a man alzada” todas e cada unha das moléculas. Moitas das que son do interese nos cursos de bacharelato están listas xa para ser usadas baixo a icona de ferramenta “*Templates*”: . Entre outras, compostos aromáticos, aminoácidos, nucleótidos e desoxirribonucleótidos, hexosas, diferentes estruturas estereoquímicas e conformacións como as da seguinte figura:



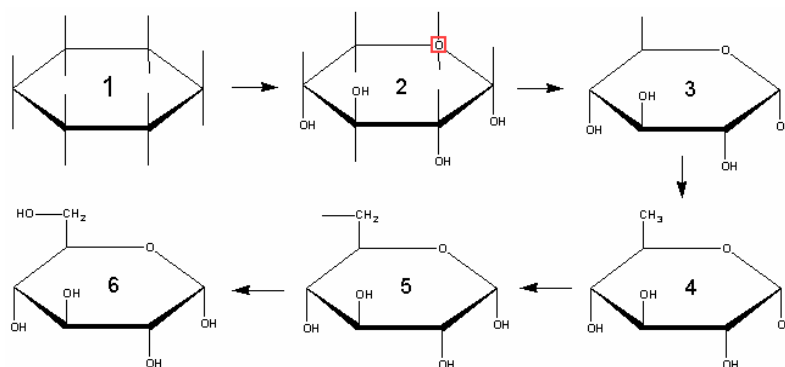
Así, **debuxar unha molécula de glicosa segundo a proxección de Haworth** é do mais sinxelo.

1. Escolle-lo anel axeitado na galería de conformacións.
2. Situa-lo osíxeno e os grupos hidroxilo nas situacións axeitadas.
3. Coa ferramenta ‘*borrador*’  eliminamos as ligazóns que non nos interesan, facendo ‘clic’ sobre os elementos que queremos eliminar. Lembremos que o programa satura con hidróxeno se non se indica outra cousa, polo que en realidade non estamos eliminando ligazóns químicas da molécula, só liñas no debuxo.
4. Colocamos o C⁶ tecleando o ‘C’ mentres a súa posición está destacada cun cadríño negro³.




³ E preciso deseleccionar primeiro a ferramenta borrador e seleccionar calquera de ligazón.

5. Engadimos unha ligazón coa ferramenta de ligazón continua () dende o CH₃ que apareceu en posición 6 no paso anterior.
6. Colocámo-lo grupo hidroxilo do C⁶ facendo 'clic' na letra 'O' cando está resaltada a súa posición.
- A secuencia está representada na seguinte ilustración:

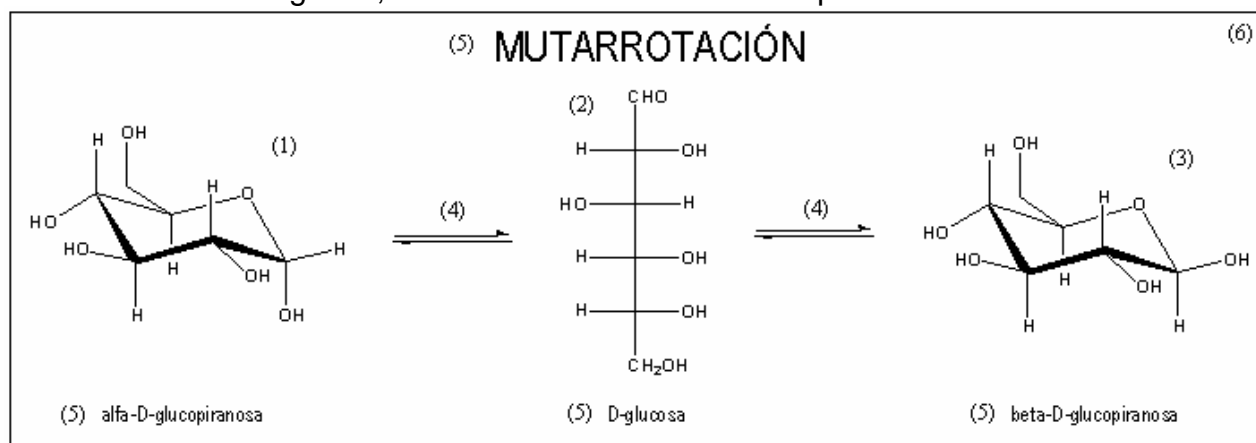
O cadro vermello sobre o osíxeno hemiacetalico no paso 2 indica que existe algunha incongruencia de valencias na estrutura. Novamente vemos que non se trata só dun programa de debuxo.



E non menos sinxelo sería **elaborar un esquema de reacción** para ilustra-lo fenómeno da mutarrotación, si se utiliza a galería de hexosas:


1. Escollemos na galería de hexosas a forma alfa-piranososa e facemos 'clic' sobre a zona de traballo.
2. Seleccionamos na mesma galería a forma aberta (proxección de Fisher) e facemos 'clic' na zona de traballo.
3. Escollemos a forma beta-piranososa e a dispoñemos á dereita da anterior.
4. Na ferramenta  (frechas), seleccionamos as frechas indicadoras de equilibrio químico e, pinchando co botón esquerdo do rato e arrastrando antes de soltalo, debuxamos unha frecha entre as formas alfa-piranososa e aberta, e outra entre a aberta e a beta-piranososa.
5. Engadimos coa ferramenta texto , os nomes das moléculas e un título para o esquema. Logo de seleccionala, facemos 'clic' sobre a zona onde queremos-lo texto.
6. Introducimos, para remata-lo esquema, unha 'Casiña Sombreada' seleccionándoa na ferramenta 'elementos de debuxo' , e arrastrando o punteiro en diagonal desde o ángulo superior esquerdo ó inferior dereito.

Na ilustración seguinte, os números fan referencia os pasos indicados no texto.



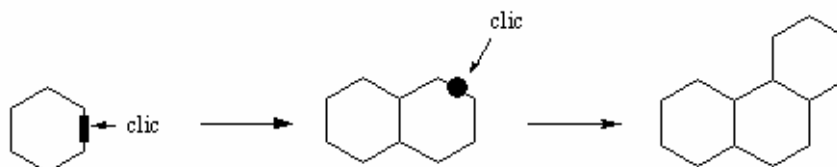



Con ChemDraw é doado debuxar estruturas complexas nas que interveñen aneis, gracias as **'ferramentas para aneis'** (imaxe da esquerda). Para ilustralo, reproducirémo-la estrutura do ciclo esterano (ciclopentano-perhidro-fenantreno),

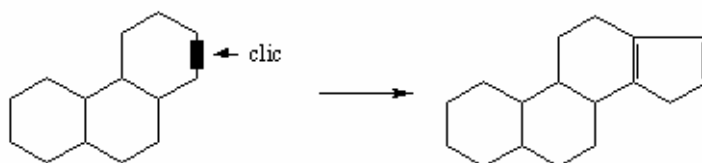
1. Escollémo-la ferramenta 'anel de ciclo-hexano' ('*cyclohexane ring*')  e facemos 'clic' na zona de traballo. Agora hai que ter en conta que dous aneis pódense conxugar, compartindo dous átomos, ou xuntar mediante un enlace de tipo *Spiro* (compartindo un só átomo). Para debuxar este último, coa mesma ferramenta seleccionada, debemos pasa-lo punteiro sobre o átomo compartido e logo facer 'clic' para coloca-lo segundo ciclo.




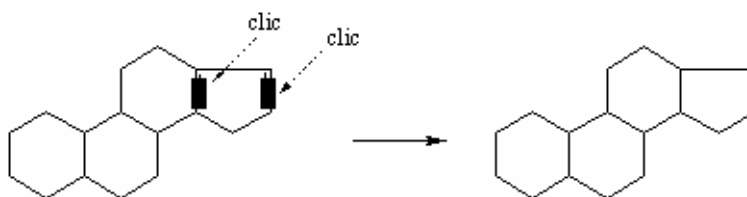
2. No caso do ciclo esterano a selección debe facerse sobre a ligazón entre os dous átomos compartidos.

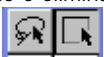


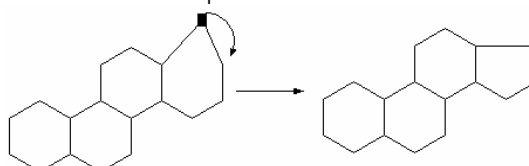
3. Seleccionamos o ciclo pentano na disposición que nos interesa na galería de aneis aromáticos , e para debuxala nos fixamos en ter resaltada a ligazón onde se ten que conxugar.




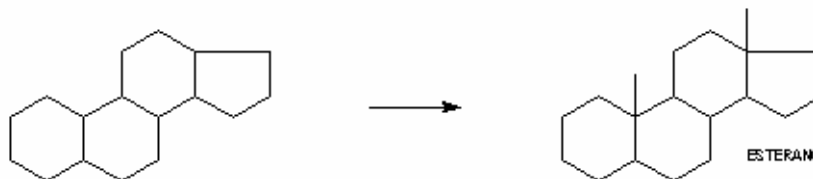
4. Para eliminar as dobres ligazóns que non interesan, utilizámo-la ferramenta 'borrador'  e facemos 'clic' sobre elas⁴.



⁴ Outro xeito de poñelo ciclo pentano sería colocar un ciclo hexano e elimina-lo carbono que lle sobra. Para facer iso, logo de ter colocado o hexano, activamos unha das ferramentas de selección . A continuación, mantendo presionada a tecla SHIFT (maiúsculas), movemos o carbono que queremos eliminar ata situalo enriba dun calquera dos carbonos cos que estaba unido. Ó solta-la tecla SHIFT, o ciclo-hexano converteuse nun ciclo-pentano.



5. Xa só queda inseri-las ligazóns correspondentes ós dous grupos metilo, para o que utilizaremos a ferramenta 'ligazón sinxela'  de igual xeito que o indicado na paxina 2.



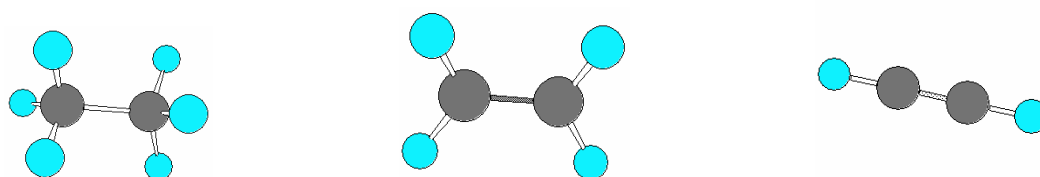
Como se pode apreciar, ChemDraw pon ó noso dispor unha ampla gama de ferramentas de debuxo vectorial que permiten a creación de representacións químicas no plano, incluíndo moléculas e reaccións, dun xeito sinxelo e rápido, baixo unha aparencia dun típico contorno Windows, coas vantaxes que iso implica no manexo das funcións do programa.


2. Chem3D. Unha pantalla tridimensional.

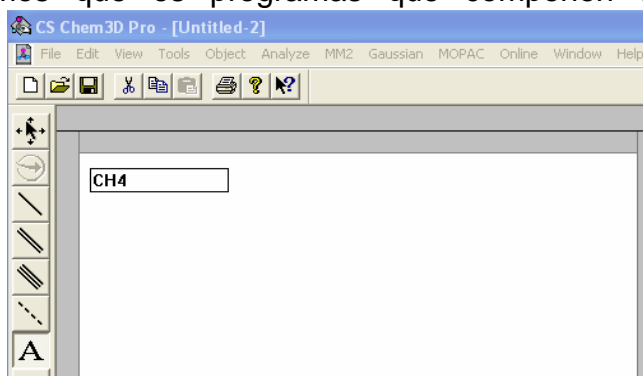
Chem3D é un programa que permite a construción e a análise de modelos químicos, que ademais son interactivos.

Un bo exemplo da súa utilidade, partindo do máis sinxelo, é a visualización da **disposición das catro ligazóns do carbono**. Este é un aspecto chave para se introducir na química orgánica do bacharelato en disposición de entender outras cuestións máis complexas, como algunha das que trataremos máis adiante.

O primeiro é a construción do modelo. Chem3D non é un programa de debuxo como ChemDraw polo que non dispón de tantas ferramentas como aquel. Si utilizámo-la ferramenta 'ligazón sinxelo' e actuamos como se de ChemDraw se tratara aparecerá unha molécula de etano; coa mesma ferramenta se facemos 'clic' non pasa nada. Si utilizámo-la de dobre ligazón aparecerá o eteno e, loxicamente, se usámo-la de triple ligazón a molécula que nos aparecerá será o etino. Semella que non imos ser quen de debuxa-lo metano.

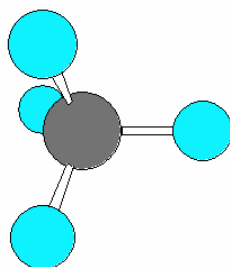


En realidade, é así que entenderemos que os programas que compoñen o ChemOffice verdadeiramente "*saben o que é a química*". Para debuxar o metano, imos utilizar un sistema de comunicación co ordenador idéntico ó que utilizaríamos co alumnado. Escribiremo-la fórmula empírica na fiestra que se abre ó seleccionar a ferramenta de texto  ⁵.

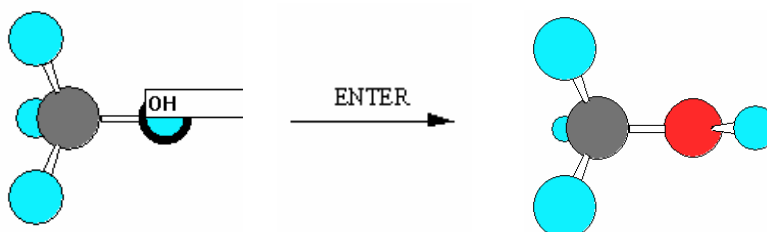


⁵ Tamén se pode abri-la fiestra de texto facendo 'dobre clic' na zona de traballo mentres está activada calquera das ferramentas de ligazón.

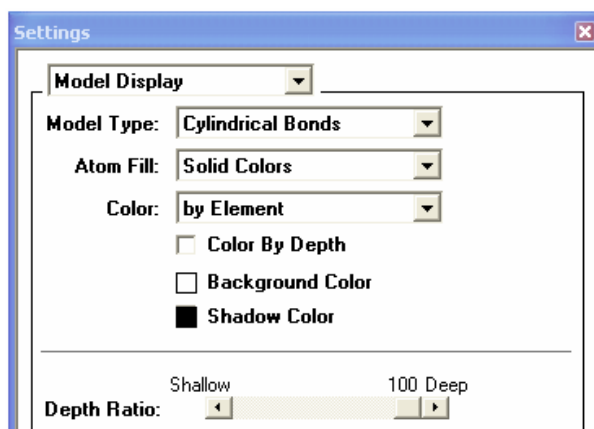
Queda claro que falamos co ordenador en termos químicos máis que informáticos. Só resta acepta-la entrada premendo 'ENTER' e aparecerá no lugar do texto unha imaxe tridimensional do metano.



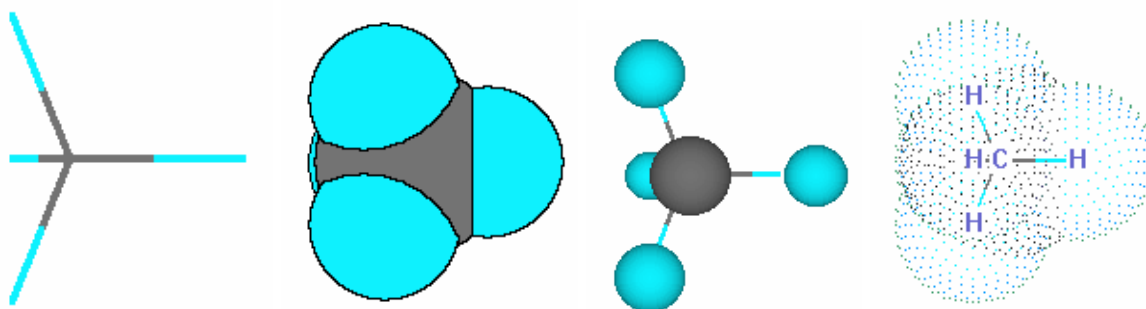
Si o que se pretende é debuxalo metanol, non teríamos máis que face-la substitución dun hidroxeno por un grupo hidroxilo, facendo 'dobre clic' sobre un dos hidróxenos, escribindo "OH" na etiqueta de texto que se abre e premendo ENTER.




O programa incorpora diversos tipos de modelos (de arame, de variñas, de bolas e variñas, de casquete,...), modos de cor e tramas. Todos son accesibles desde o menú 'View' na opción 'Settings...'. Ó seleccionala ábrese unha fiestra como a seguinte:



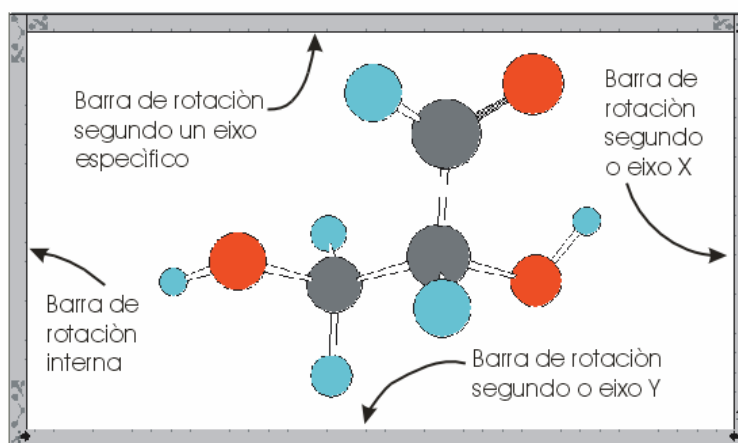
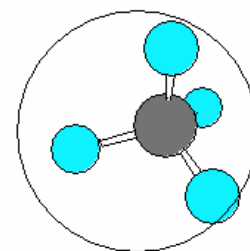
Combinando estas opcións con algunhas das que están no menú 'Object' pódense obter diferentes imaxes da mesma molécula. Exemplo de estas capacidades son as seguintes representacións:



Pero “un modelo científico dun obxecto é unha imitación simplificada do mesmo que ten por finalidade axudar a entendelo mellor. Os modelos créanse para representar sistemas inaccesibles, moi grandes ou moi pequenos. Para que un modelo sexa útil deberá explicar o comportamento e natureza de sucesos relacionados con el, e permitir facer prediccións que poidan ser investigadas mediante a experimentación para demostrar ou rexeita-la súa validez”⁶. E, así vistas, as anteriores non deixan de ser representacións no plano de estruturas tridimensionais. O verdadeiro potencial do programa está na posibilidade de efectuar rotacións tipo “man libre” usando a ferramenta

‘Track-Ball’ . Esta ferramenta imita unha esfera na que está contido o modelo molecular. Arrastrando o punteiro mantendo pulsado o botón esquerdo do rato, faise xirar a esfera e, polo tanto, a molécula. Se se apunta fora do círculo que representa a esfera pódense facer rotacións segundo o eixo Z.



Existen ademais outros controladores para facer diferentes rotacións nos marcos da fiestra de traballo. Con todos eles, é doado move-las moléculas por un espazo virtual simulando as tres dimensións dun xeito moi intuitivo, como se tivésemos as moléculas nas mans.



Para xirar respecto ós eixes X e Y, só hai que preme-lo botón esquerdo do rato sobre as barras correspondentes e arrastra-lo punteiro ó longo delas.

Para realizar unha rotación interna temos que seleccionar⁷ un átomo, unha ligazón ou un fragmento que teña a lo menos un átomo seleccionado unido a outro non seleccionado. Se se selecciona só un átomo, o fragmento que queda estacionario defínese polo átomo conectado que presente o número de serie máis baixo. Se se selecciona un fragmento, os átomos non seleccionados serán os que quedarán inmóbiles.

⁶ Tomado do Módulo “Desfile de Modelos” en Domus (A Coruña).

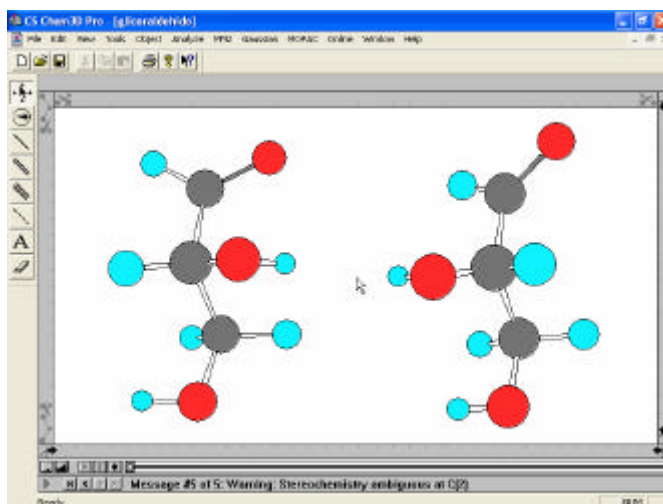
⁷ Para seleccionar hai que ter activada a ferramenta de desprazamento  ou a ferramenta man-libre  e facer ‘clic’ sobre o obxecto desexado (átomo ou ligazón). Para seleccionar máis dun elemento pódese trazar co punteiro un cadro que englobe os obxectos ou ben ir facendo ‘clic’ sobre cada un deles mantendo pulsada a tecla SHIFT (maiúsculas).

Tamén é posible indica-lo número exacto de graos de xiro facendo 'dobre clic' sobre calquera das barras.

Xirar para ver: rotacións co gliceraldehido

Proponse agora unha actividade co Chem3D que permite evidencia-las propiedades do gliceraldehido debidas o carbono asimétrico da súa estrutura.

O primeiro será crear dous modelos do gliceraldehido (CHO-CHOH-CH₂OH), un para a forma D- e outro para a L-, xuntos na mesma fiestra do programa.



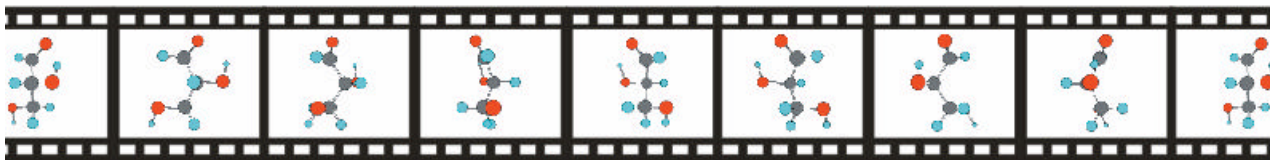
A idea é propoñer ós alumnos e alumnas que, utilizando tódalas ferramentas de rotación á súa disposición, traten de coloca-las dúas moléculas na mesma disposición espacial. Unha posibilidade sería sinala-lo carbono nº 2 –quiral- e usa-la barra de rotación interna. Outra sería fixar os carbonos 1 e 3 e usala barra de rotación segundo un eixo específico. En calquera caso, o alumnado chegaría de seu á certeza de que a proposta non se pode resolver. Sería o momento de introducir o concepto de isomería estrutural.




Moléculas, cámara,...¡ACCIÓN!


Por suposto que é posible gardar tódolos modelos creados no formato propio do programa (*.C3D, *.C3T) para recuperalos en novas sesións de traballo. Pero tamén é posible exportalos a diferentes formatos de imaxe (GIF, PNG, TIF, WMF,...) que permiten incluílos en calquera documento nun procesador de texto, programas gráficos ou mesmo páxinas web.

Outra interesante opción do Chem3D e a creación de animacións dun xeito verdadeiramente sinxelo. A seguinte ilustración amosa unha secuencia⁸ na que se aprecia un xiro completo respecto o eixo Y, dunha molécula do D-gliceraldehido. Esta función fai posible que a molécula describa de forma autónoma un movemento previamente designado polo usuario, gravando unha imaxe por cada desprazamento que se faga con calquera dos controis destinados ó efecto.

⁸ A ilustración a xeito de tira cinematográfica (páx. 10) foi creada para este documento con outros programas. Únicamente as moléculas que aparecen dentro dos cadríños foron xeradas con Chem3D.



Para grava-la película hai que utiliza-los controis, , situados por debaixo da barra de desprazamento segundo o eixo Y. Ó preme-la icona de gravación () o programa pasa a ese estado. A partir de entón, e mentres non se deteña esta función (), se xerará un fotograma por cada desprazamento que se faga, ben sexa no modo man-libre ou mediante as diferentes barras.

Para reproducir-la secuencia, de xeito ininterrompido (de diante a atrás e viceversa), non hai máis que lle dar ó control de reprodución ()


Para que a transición sexa suave e o máis uniforme posible (sen saltos) é preciso crear un elevado número de fotogramas. A xeito de exemplo, a secuencia anterior é o resumo dun xiro completo que dura algo menos de medio minuto e ten un total de 68 fotogramas. Con esa taxa son perceptibles os saltos. A visualización será tanto mellor canto máis nos acheguemos a unha relación de 25 fotogramas/segundo.

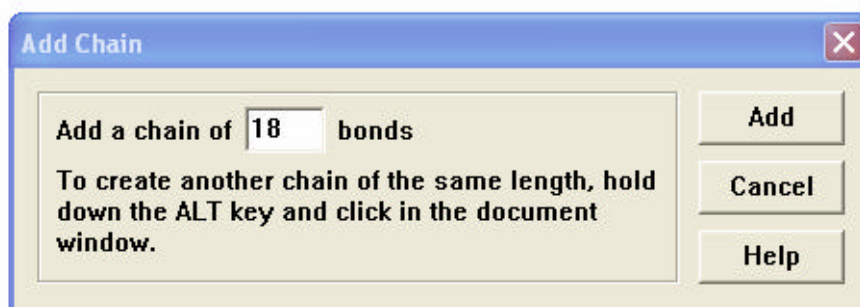
3. Cada cousa é para o que é

Se ben tanto ChemDraw como Chem3D son programas independentes e autónomos, o certo é que cando se utilizan conxuntamente a produtividade medra considerablemente.

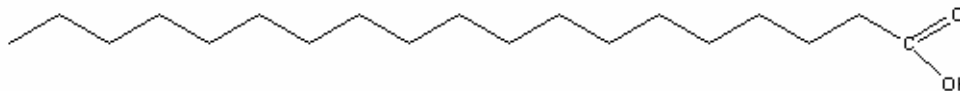
As posibilidades de debuxo de estruturas de Chem3D con respecto a ChemDraw están moi limitadas, mentres que a edición de modelos tridimensionais con este último programa non van máis aló da representación de diferentes proxeccións moleculares (Fisher, Haworth, Newman, etc..). Por fortuna, a conectividade entre as dúas aplicacións é total. Por iso, o máis cómodo e práctico é utilizar ChemDraw para debuxa-las moléculas e logo importalas desde Chem3D para visualizar e analiza-los modelos.


Estudia-las **implicacións estruturais da introducción de dobres ligazóns nas cadeas alifáticas dos ácidos graxos** é cuestión de copiar e pegar.

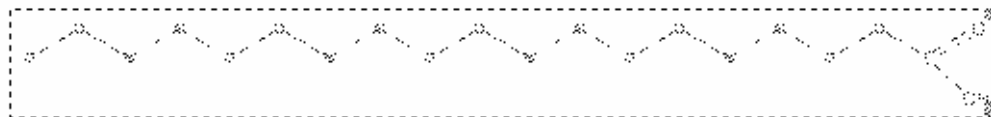
1. Abrímo-los programas Chem3D e ChemDraw.
2. En ChemDraw, debuxamos unha molécula de ácido esteárico (18:0). Utilizamos a ferramenta 'acyclic chain'  indicando 18 carbonos na fiestra que abre o facer 'clic' na zona de traballo:



3. Modificámo-lo extremo da molécula para transformalo nun grupo carboxilo.

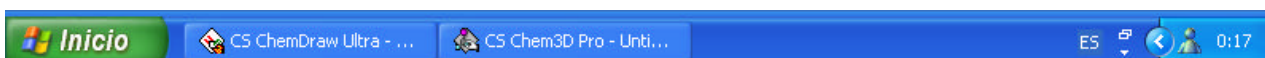


4. Seleccionámo-la molécula coa ferramenta rectangular  quedando marcada coa seguinte aparencia:

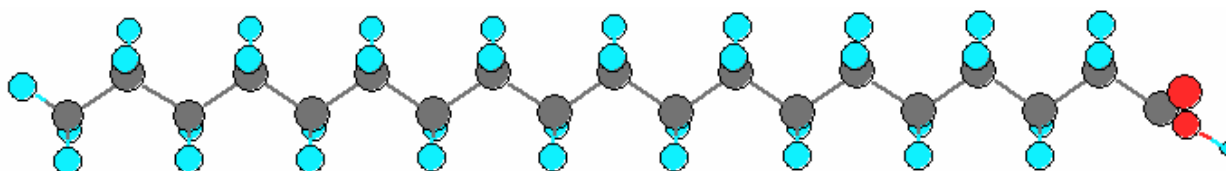



e a copiamos ó portapapeis de Windows mediante a opción 'Copy' do menú 'Edit'

5. Activámo-lo Chem3D facendo 'clic' no botón da barra de tarefas:



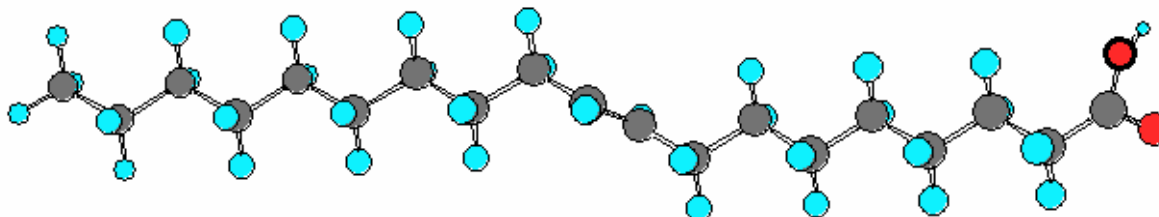
6. Pegamos coa opción 'Paste' do menú 'Edit', aparecendo xa un modelo molecular do ácido esteárico na fiestra de traballo:



7. De volta no ChemDraw (facendo 'clic' na barra de tarefas), introducimos unha dobre ligazón entre o carbono 9 e o 10 do ácido esteárico (coa ferramenta de ligazón sinxela  facendo 'clic' nun deles e arrastrando ata o outro).

8. Seleccionamos toda a molécula e a copiamos ó portapapeis de Windows (Edit./Copy).

9. Se activa Chem3D na barra de tarefas e se pega (Edit./Paste) aparecendo un novo modelo, esta vez do ácido oleico (18:1^o), no que se pode apreciar a inflexión na cadea alifática ó nivel da dobre ligazón.



4. Net Power

É evidente que moitos problemas, dos que se prantexan nas aulas de Bioloxía de Bacharelato, son moito máis complexos do que ata aquí se veu. Dous exemplos servirán para ilustrar esta aseveración: un, a estrutura molecular das membranas biolóxicas, e outro, a estrutura do nucleosoma. Aínda que semella imposible deseñar modelos moleculares destas dúas estruturas, e outras de semellante ou maior complexidade, o

certo é que nin sequera fai falla que estraguémo-lo tempo en facelo. En Internet hai multitude de recursos esperando ser utilizados.

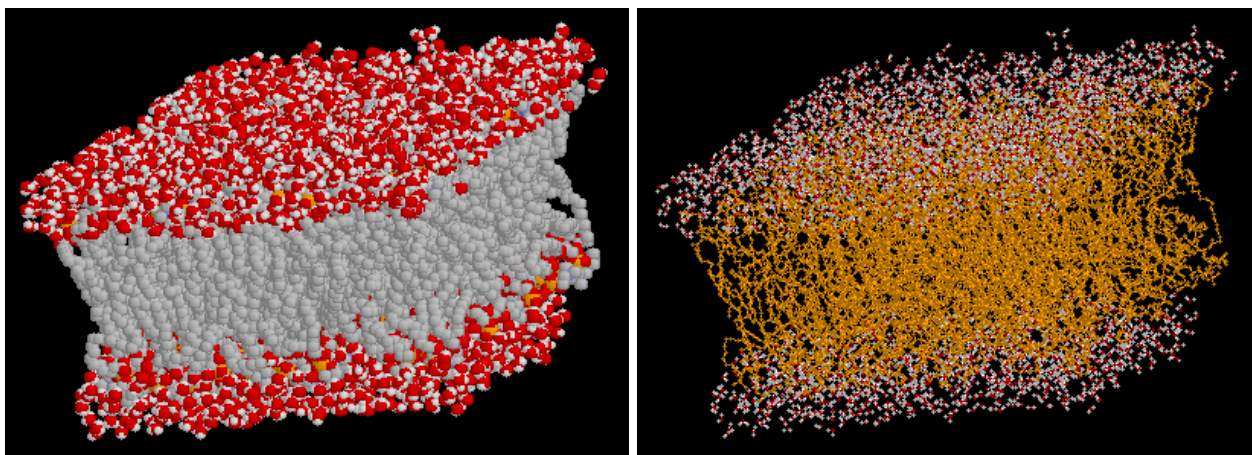
Un dos formatos electrónicos máis estendidos cando se fala de modelos moleculares é o PDB (Protein Data Bank), formato que é importable e exportable desde Chem3D. En realidade isto pode ser máis útil se queremos deseña-los nosos propios modelos e logo colocalos nun servidor de internet para, por exemplo, que os nosos alumnos podan acceder a eles.

A posibilidade de baixar moléculas da rede, para logo manipulalas en Chem3D, é desde logo posible tamén, pero seguramente menos necesario toda vez que se pode integra-la observación das mesmas, incluíndo as rotacións e visualizacións segundo diferentes tipos de modelos, nos propios navegadores de internet. Para iso o propio é instalar un conector (plug-in) no noso sistema: Chemscape CHIME⁹. Outra posibilidade é usar un programa independente do navegador: RASMOL¹⁰. Ámbolos dous son gratuítos.

Queda fora dos obxectivos de esta presentación facer unha descrición en detalle deste software, pero preséntanse algunha imaxes, visualizadas en Internet Explorer 6 co plug-in Chime instalado, que ilustran as súas posibilidades:

Modelos de **membrana plasmática**

(<http://www2.uah.es/biomodel/model2/bicapa/inicio.htm>)



A primeira imaxe corresponde a un modelo mediante a opción 'Display/SpaceFill'¹¹ (modelos de casquete). Na segunda, a opción é 'Display/Wireframe' (modelos de arame) e a opción 'Select/Hetero/Non solvent' que resalta en cor laranxa as zonas hidrofóbicas do modelo.

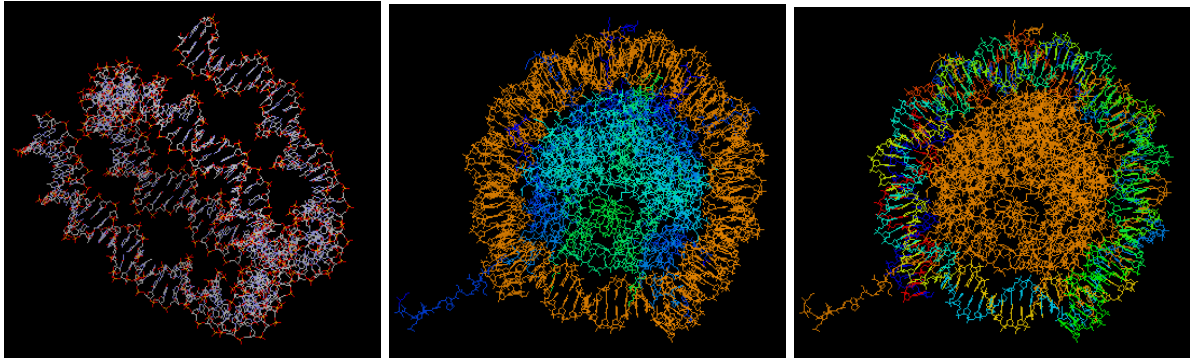
Modelos do **Nucleosoma**

No primeiro modelo ocultouse a parte proteica para ve-la disposición da fibra de ADN. Na segunda pódense ver as diferentes histonas representadas por distintas cores e as cadeas de ADN ó seu arredor en cor laranxa ('Select/Nucleic/Nucleic'), e na terceira se destacou a parte proteica no seu conxunto ('Select/Protein/Protein').

⁹ Instalación e uso de *Chemscape Chime* en <http://www.pntic.mec.es/mem/moleculares/programa/tutorial/chime.html>

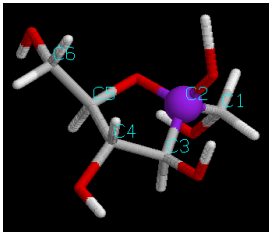
¹⁰ RASMOL para calquera plataforma, incluíndo RASWIN, en: <http://www.umass.edu/microbio/rasmol/getras.htm>

¹¹ Tódalas opcións son accesibles no menú contextual que se abre pulsando o botón dereito do rato sobre a fiestra do navegador.



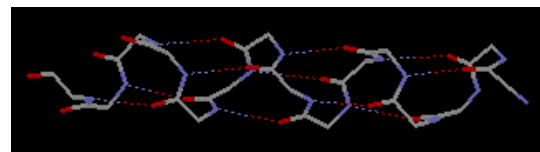
Xa se está utilizando esta tecnoloxía en educación, máis en niveis universitarios, e tamén existen xa iniciativas dirixidas ó ensino secundario. Bo exemplo de iso é o BIOMODEL3¹² (Bioquímica Estructural para Enseñanza Secundaria) do que se pode conseguir unha versión para traballar localmente sen conexión a Internet solicitándoa ó seu autor, Ángel Herráez Sánchez da Universidade de Alcalá de Henares.

Algunhas imaxes do **BIOMODEL-3** :



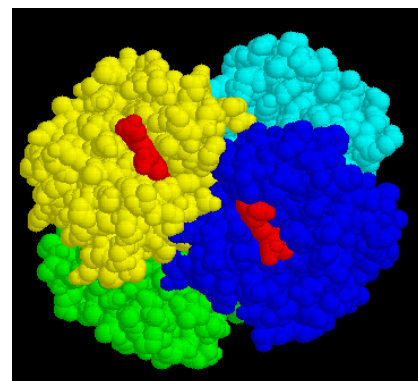
A Fructosa cos carbonos numerados e o carbono anomérico destacado.

A alfa-hélice con cadeas laterais ocultas e amosando as pontes de hidróxeno que a estabilizan.



A típica representación a xeito de cinta, útil na visualización de proteínas grandes.

Representación da Hemoglobina. Cada unha das cadeas polipeptídicas está representada nunha cor diferente e o grupo hemo noutro.



Pódese atopar máis ligazóns útiles referidas a modelado molecular en:
<http://www.bioxeo.com/modelos>

¹² <http://www2.uah.es/biomodel/model3/inicio.htm>