

BrandyMol 1.0

BrandyMol ha sido desarrollado como Proyecto Fin de Carrera de la Titulación de Informática de Sistemas para el Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Málaga.

Es una *FrontEnd* que permite realizar cálculos de Modelización Molecular y Semiempíricos sobre moléculas orgánicas haciendo uso de dos paquetes de programas totalmente gratuitos:

- [TINKER-Software Tools for Molecular Design](#): Un paquete de Modelización Molecular muy completo que permite el uso de diferentes campos de fuerza para alcanzar la optimización de sistemas moleculares con gran eficiencia.
- MOPAC 7.0. La versión académica del paquete MOPAC de cálculo semiempírico. Aunque esta versión no está recomendada para la producción de trabajo científico es muy útil para aprender correctamente el manejo del programa.

Esta *FrontEnd* requiere para su correcto funcionamiento la instalación de un programa para dibujar moléculas:

- Las estructuras se generarán inicialmente dibujándolas en [MDL-ISIS Draw 2.5](#), un programa de dibujo totalmente gratuito que requiere adicionalmente la instalación de su [ayuda](#) y un [Add-In](#) para nombrar las moléculas.

La visualización de las cargas electrostáticas y de las vibraciones moleculares se realiza con el uso de un visor Java de código abierto para estructuras químicas en tres dimensiones [Jmol](#). Este visor es una miniaplicación (*applet*) interactiva para el navegador web con altas prestaciones para compuestos químicos, cristales, materiales y biomoléculas. (*Debes de tener instalado y actualizado Java en tu ordenador*).

A lo largo de toda la asignatura haremos uso de **BrandyMol 1.0**. El instalador de este programa descarga los programas adicionales necesarios y requiere una conexión a Internet para su correcto funcionamiento. Por el momento este software sólo está diseñado para el sistema operativo Windows.

- Descargar [BrandyMol: Programa de Instalación](#)