



Tutorial

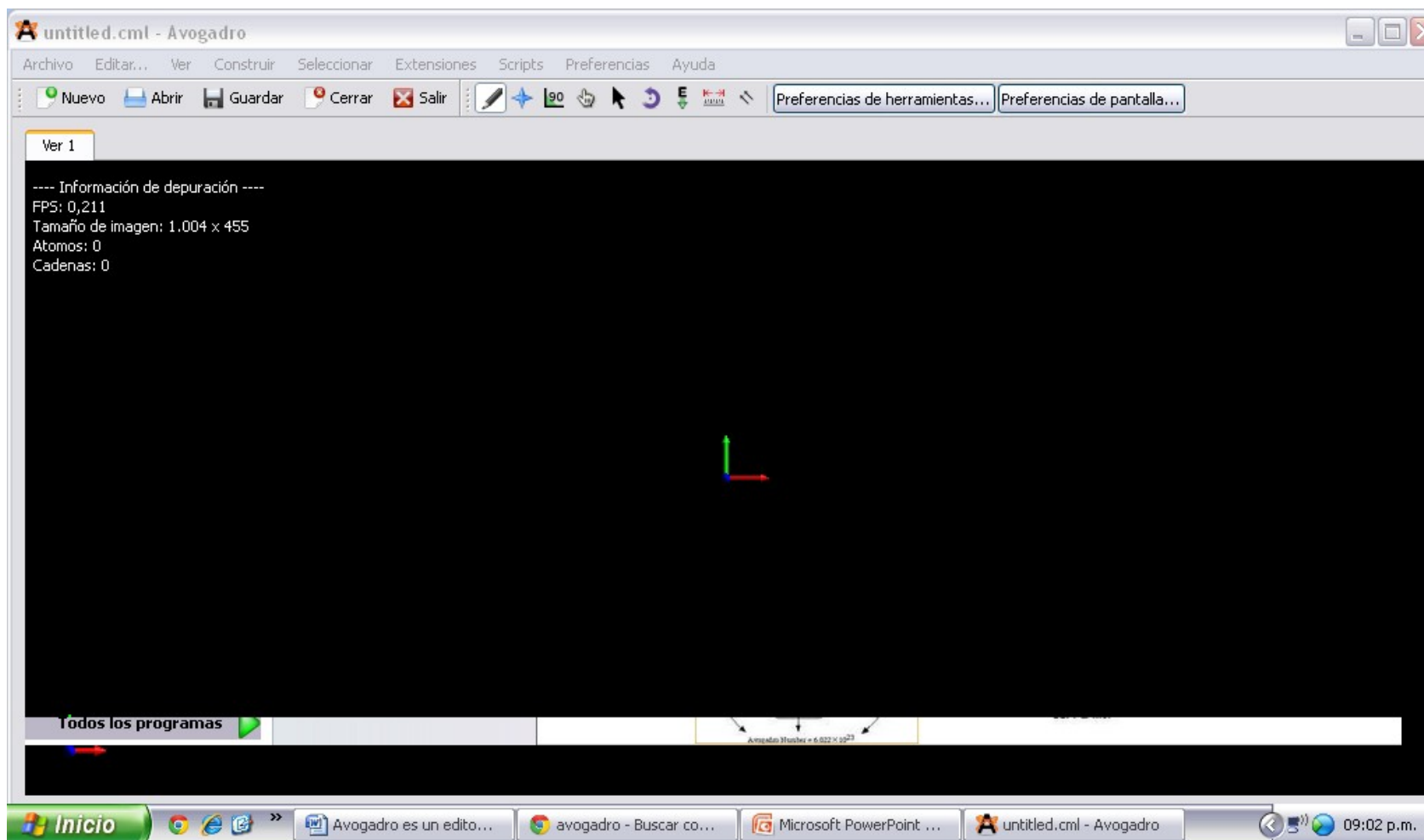
Avogadro

Avogadro é un programa para deseñar estruturas moleculares por ligazóns químicas.

Podes ver en 3D e rotar a estrutura , cambiando a perspectiva visual, e xirando en calquera sentido e dirección só cos movementos do rato.

As vistas das estruturas moleculares son espectaculares.

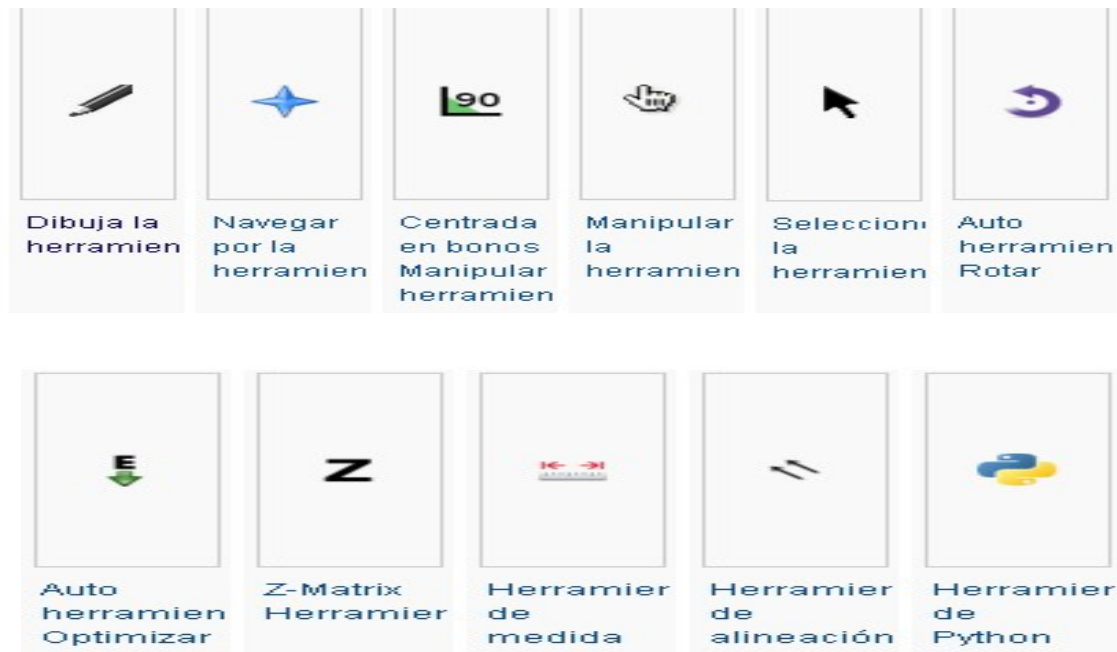
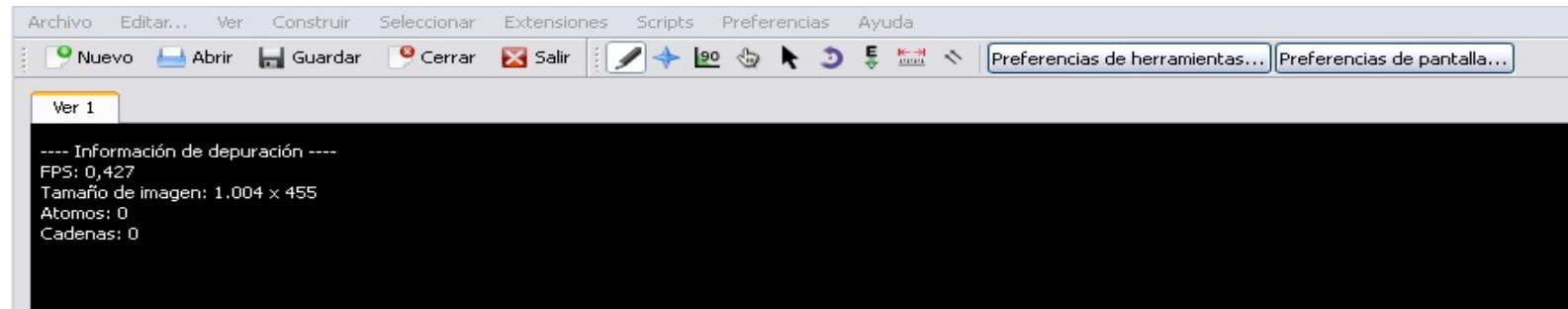
A primeira vez que abra Avogadro
presenta unha pantalla como se mostra
a continuación



Ferramenta de preferencias

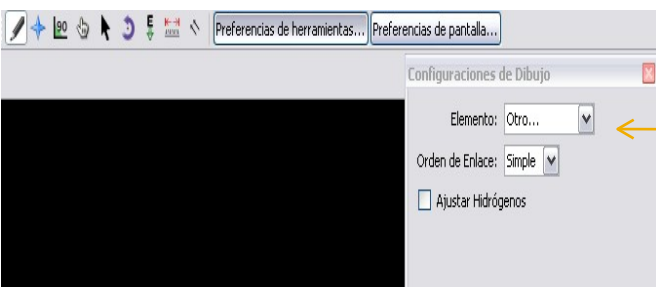
Ao premer, as seguintes iconas son activados na Barra de ferramentas

(Cando se pasa o rato sobre as iconas aparece unha breve descripción delas)

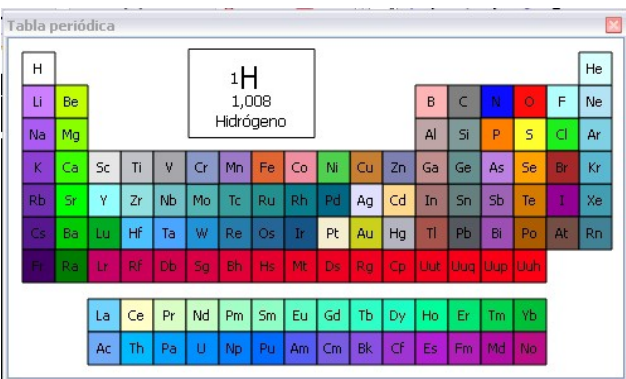




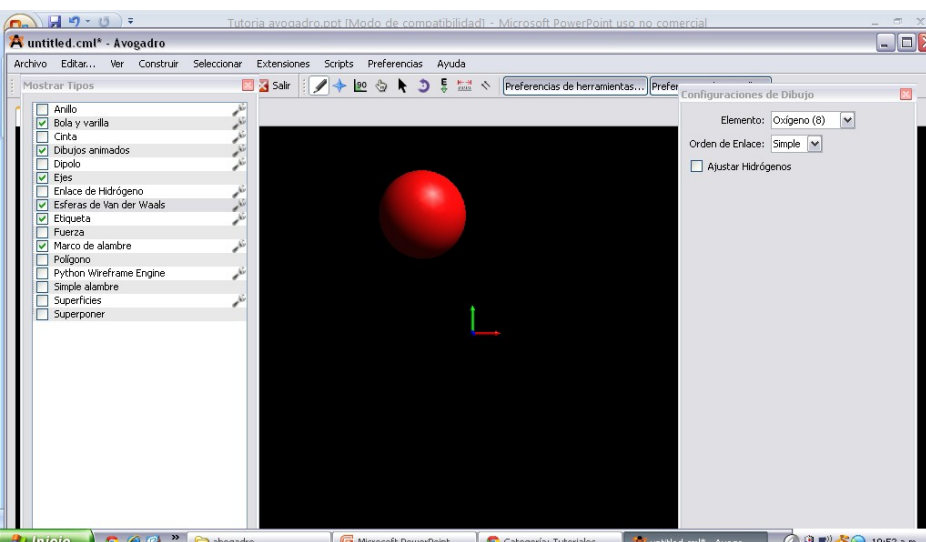
A ferramenta de debuxo é a principal forma para construír moléculas.



Pode seleccionar o elemento a ser usado no menú despregable.



Na opción "Otro" aparece unha táboa periódica completa. A orde de enlace (simple, dobre ou triplo) pódese configurar nun menú despregable.



Se temos activado o lapis facendo clic na pantalla, debuxamos o átomo que seleccionados, neste caso o osíxeno.

Supresión

Se cre que cometeu un erro ou queres eliminar un átomo concreto, facendo clic co botón dereito do rato sobre o átomo, este é eliminado.

Teña presente que se "Axuste hidróxeno" está activado, non se poden eliminar os hidróxenos engadidos, a función de axustar a hidróxeno axusta o número de átomos de hidróxeno e, polo tanto, automaticamente engade o hidróxeno eliminado de novo.

Moléculas de construción

Se vai debuxar unha molécula máis complexa:

O botón esquerdo do rato sobre un átomo existente, mantendo o botón do rato e arrastra a outro lugar vai crear unha conexión entre o átomo existente o novo.

Exemplos nos vídeos:

[Como crear unha molécula con Avogadro](#)

[Moléculas con Avogadro](#)

Se precisa cambiar un átomo existente, pode seleccionar o elemento e prema nel.



Aliñar molécula: A ferramenta de navegación permite que move a molécula ao redor da escena.

Premendo na molécula: rotámola

Premendo sobre un átomo en particular, a continuación, rotación, translación o zoom prodúcese en relación con ese átomo. Se non, a navegación é en relación ao centro da molécula.



A ligazón ferramenta de manipulación de enlace central.



Manipulando a ferramenta

A ferramenta permite manipular para mover átomos individuais ou fragmentos seleccionados no espazo.

Non sempre saen ben á primeira, ou que a optimización da xeometría non deu a xeometría que interesa.

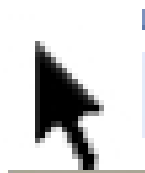
Avogadro ten dúas ferramentas para axudar na manipulación de moléculas que xa foron elaboradas.

Estas son as [centradas Bonos manipular ferramentas](#) e a [ferramenta Manipulación](#) .

Ambas permiten a manipulación de unha molécula existente.

Moitas ferramentas poden traballar en calquera átomo ou faga clic en unha selección de átomos.

A [Ferramenta Seleccionar](#) permite facer seleccións e, a continuación, traballar sobre estas seleccións usando unha ferramenta diferente. Por exemplo, un grupo de cinco átomos pode ser seleccionado coa [Ferramenta Seleccionar](#) e os átomos poden ser movidos, mediante a Ferramenta de Manipular e premer no botón esquerdo do rato sobre a selección mentras moves o rato ata a configuración desexada



Configuracións de selección de átomos e moléculas

A ferramenta de selección permite operar nas seccións das moléculas.



O modo de selección para seleccionar átomos individuais cando se preme, os residuos biomolecular (por exemplo, aminoácidos, ácidos nucleicos) ou unha molécula enteira.

Prema nun átomo ou fragmento para seleccionalo.

Prema noutro átomo ou fragmento para marcar e desmarcar a primeira.

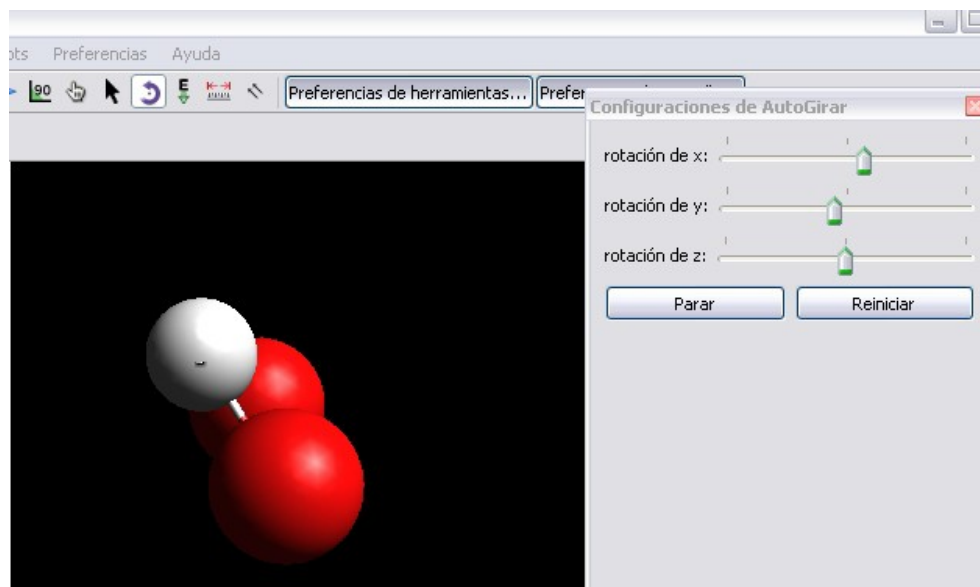
Manteña premida a tecla Maiúscula para seleccionar múltiples átomos ou fragmentos.

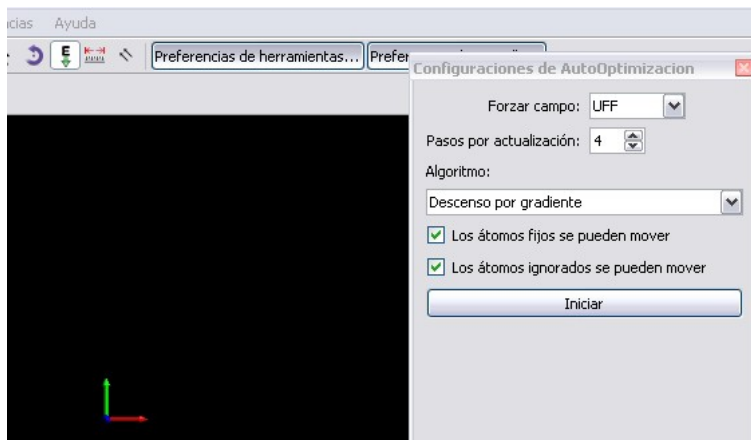
Mantéñase presionada a tecla de control para cambiar as seleccións.

Arrastre o rato por todo o espazo para "banda elástica" para seleccionar un conxunto de átomos



- A ferramenta **AutoRotate** permite que xire continuamente unha molécula no espazo, por exemplo, para unha presentación.
- Hai dúas formas de definir a rotación:
- Fai clic e arrastra en calquera lugar na xanela de moléculas – Para isto utilízase unha liña vermella. A dirección da liña vai determinar o sentido de rotación e a lonxitude da liña vai determinar a velocidade de rotación. Canto máis longa sexa a liña, máis rápido é a rotación. A rotación comezará tan pronto se solta o botón do rato.
- Arrastre un control deslízante para virar ao longo do x, y, ou eixe z Move o control deslizante para a dereita para virar á dereita, mover á esquerda para virar esquerdo. Canto máis lonxe se move o control deslizante, máis rápida será a rotación.
- Prema na pantalla para deter a rotación.
- Prema na molécula para reiniciar a rotación.

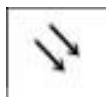
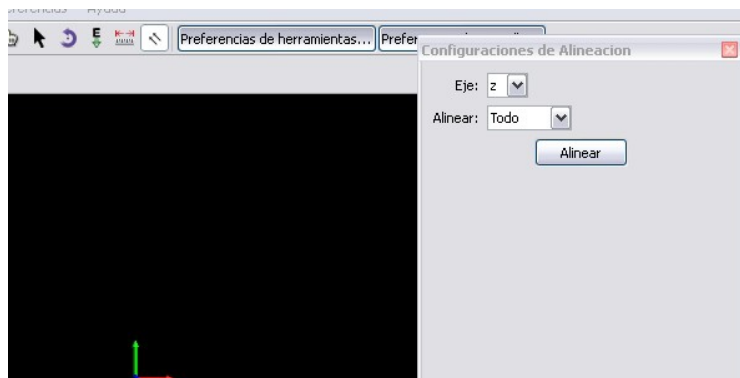




Configuración de **optimización automática**, para optimizar a xeometría dunha molécula.



A ferramenta de medición para medir as distancias, os ángulos ou ángulo diedro. Prema en dous átomos para medir a distancia. Prema en tres átomos para medir o ángulo entre eles. Preme en catro átomos para medir o ángulo diedro entre eles. Botón dereito do rato para borrar a medición e a lista de átomos seleccionados.



A **ferramenta de aliñamento** pode ser empregada para aliñar as moléculas dun marco específico de referencia.

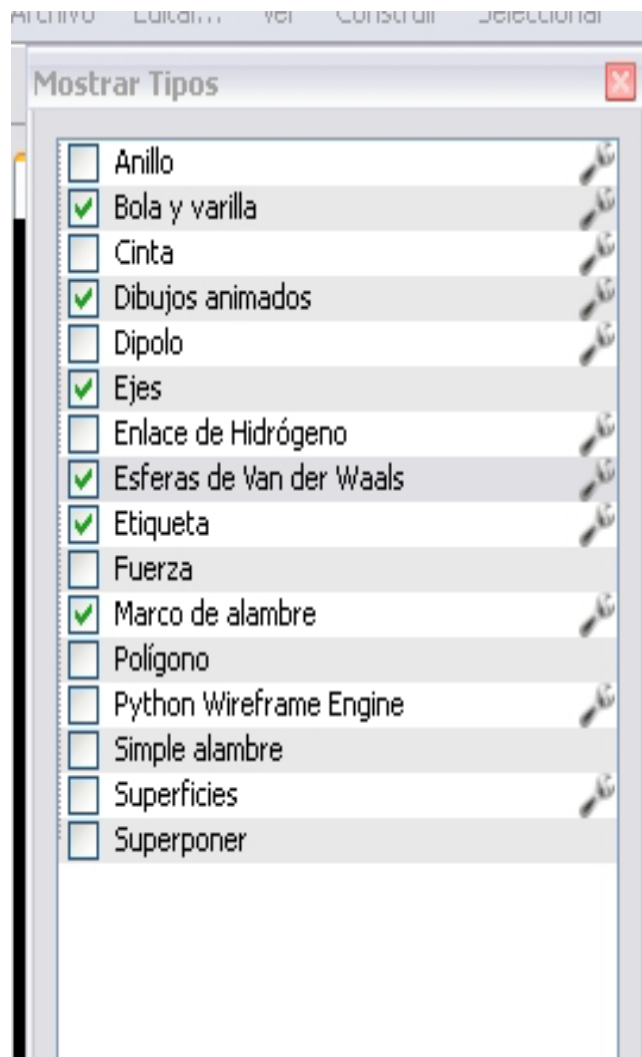
Avogadro soporta Desfacer / Refacer.

Todas as operacións de deseño pode ser desfeita e refeita usando os elementos de menú axeitado no menú de edición.

Se algunha vez comete un erro simplemente seleccione Editar-Defacer (ou Ctrl + Z).

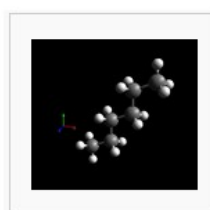
Unha vez que estamos satisfeitos coa molécula que deseñamos, a gardamos usando Ficheiro-Gardar como ...

Preferencias de Pantalla



Permite amosar diferentes tipos de moléculas.

Por exemplo, diferentes visionés de proteínas



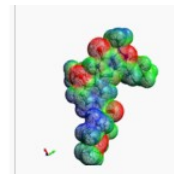
Ejes



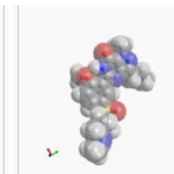
Proteína de dibujos animados



Dipolo



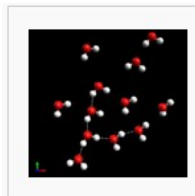
Superficie



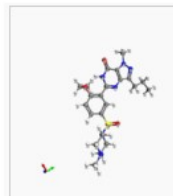
Van der Waals Esferas



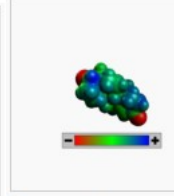
Fuerzas



De enlaces de hidrógeno

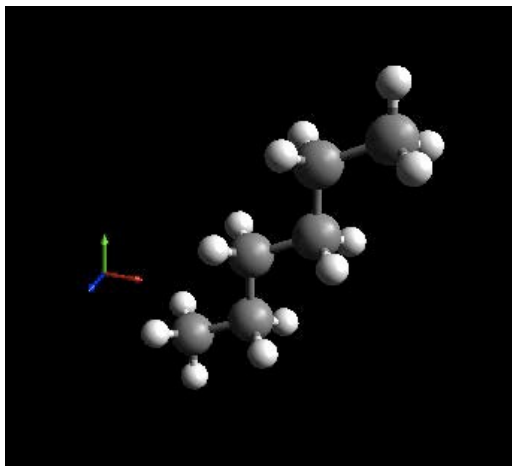


Las etiquetas



Superposición

Exemplos de preferencias de Pantalla



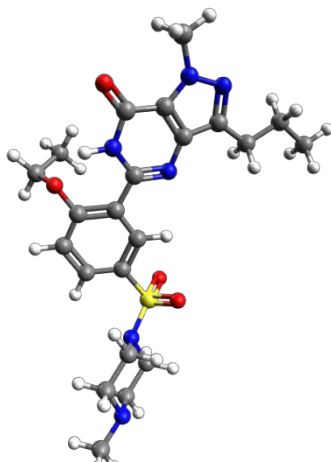
Eixe

A pantalla eixes engadir X, Y e Z, con base na orixe.

O eixe X é vermello.

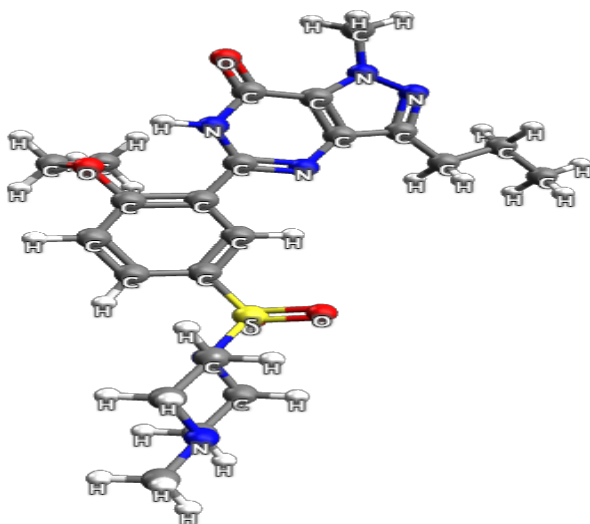
O eixe Y é azul.

O eixe Z é verde



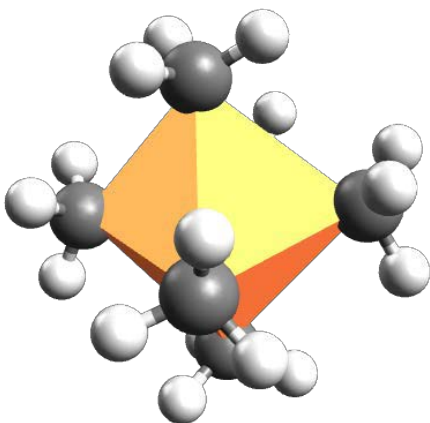
Bolas e Paus

O tipo de representación de bola e pau é un estándar para química.



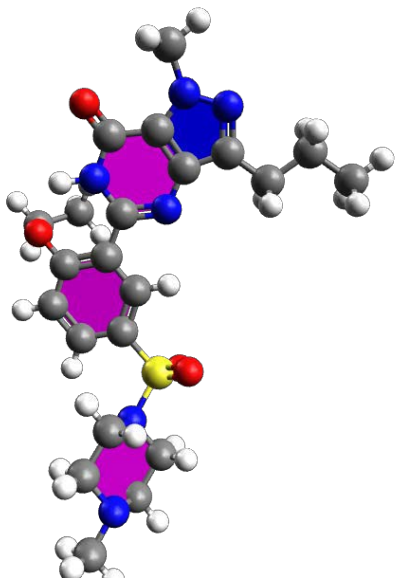
Etiqueta

Amosar a etiqueta axuntarase anotacións de texto ligados a átomos e enlaces. Ambos os átomos e os enlaces serán etiquetados. As etiquetas dos obxectos desaparecerán cando están lonxe para ser lexibles.



Polígono

A presentación de polígonos ten a súa base en tetraedros, pirámides, octaedro, etc para centros atómicos. Esta opción de visualización é moi popular nas estruturas do estado sólido e reflicte a coordinación en torno aos centros metálicos.

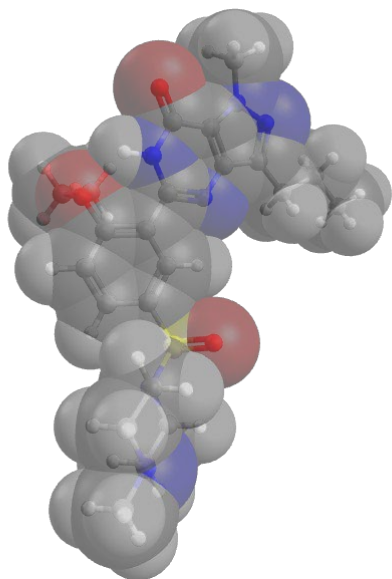


Anel

O tipo de visualización: anel de cor/aneis pechados.

Tres aneis de membros son de cor vermello. Ciclos de catro eslavóns son verdes. Aneis de cinco membros son azuis. Aneis de seis membros son cor de rosa / vermello.

Ciclos de sete membros son amarelos.



Esferas Van der Waals

Ilustra todos os átomos como esferas cunha completa radio de Van der Waals.

A opacidade / transparencia das esferas pode ser controlada.

[Ver máis en http://avogadro.openmolecules.net/wiki/Category:Display](http://avogadro.openmolecules.net/wiki/Category:Display)

MENU ARQUIVO

Novo

Abrir

Abrir recentes: Unha lista de ficheiros recentemente. **Pechar**

Gardar como ...

Volver ao arquivo gardado

Importación

Arquivo de molécula

Traxectoria ...

Obter

Traer estrutura química ...

Obter a URL ...

Exportación

Gráficos ...

Gardar un arquivo de gráficos bitmap da escena actual en BMP, PNG, JPEG ou GIF.

Graficos Vectoriais..

Gardar un arquivo PDF, PostScript, SVG ou a versión da escena actual.

POV-Ray

Garda un arquivo e incluso hai unha [POV-Ray](#) Ray-tracing programa para producir unha imaxe de alta calidade axeitado para un cartel ou para outros fins.

Saír de Avogadro, pechar todos os documentos abertos.

Menú Edición

Contido

Cortar
Copiar
Pegar
Borrar
Seleccionar Todo
Non Seleccionar nada

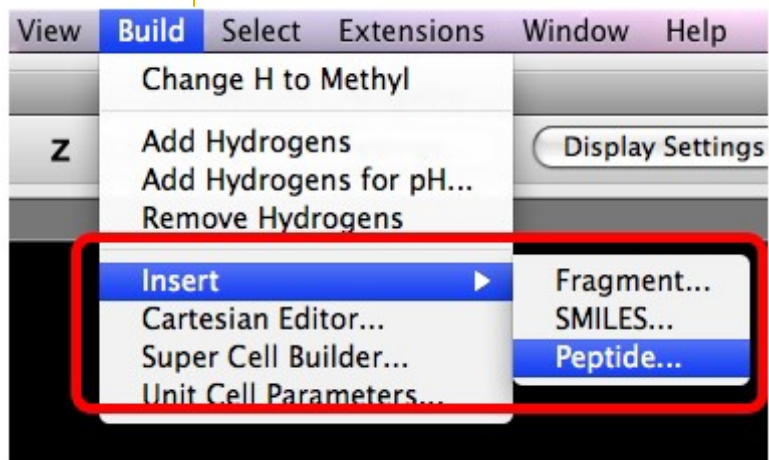
Menú Extension (En
inglés, lembre de usar
Google Chrome ou calquera
tradutor a linguaxe non manipula
Inglés)

[Propiedades dos ángulos](#)
[Propiedades de bonos](#)
[de GAMESS](#)
[Inserte péptido](#)
[Mecanica Molecular](#)
[POV-Ray](#)
[Espectros](#)
[Super Builder celular](#)
[Propiedades de torsión](#)
[Unidade da célula](#)
[Vibracións](#)

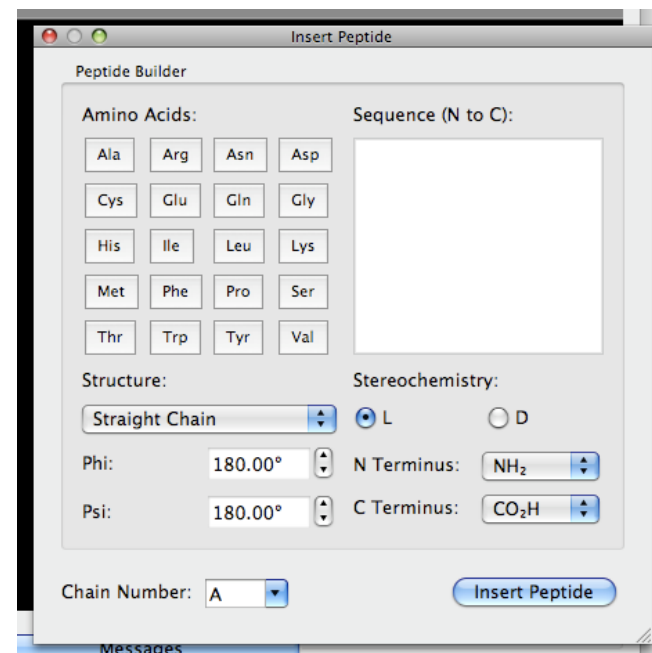
[Átomode Propiedades](#)
[creación de superficies](#)
[Insertar fragmento](#)
[MOPAC](#)
[Propiedades molécula](#)
[Configuración](#)

Como construir un péptido?

Selecione o menú **Construír (Build)** péptido inserir



Xanela do xerador de péptidos.



Insertar Péptidos

Construto de péptidos

Aminoácidos:

Ala	Arg	Asn	Asp
Cys	Glu	Gln	Gly
His	Ile	Leu	Lys
Met	Phe	Pro	Ser
Thr	Trp	Tyr	Val

Secuencia (N a C)

Ala-Ala--Cys-Gly-Tyr-Pro-Pro

Estructura: Cadena recta

Estereoquímica: ☒ I ☐ D

Phi: 180,00° N Terminal: NHI

Psi: 180,00° C Terminal: COH

Cadena de número: A

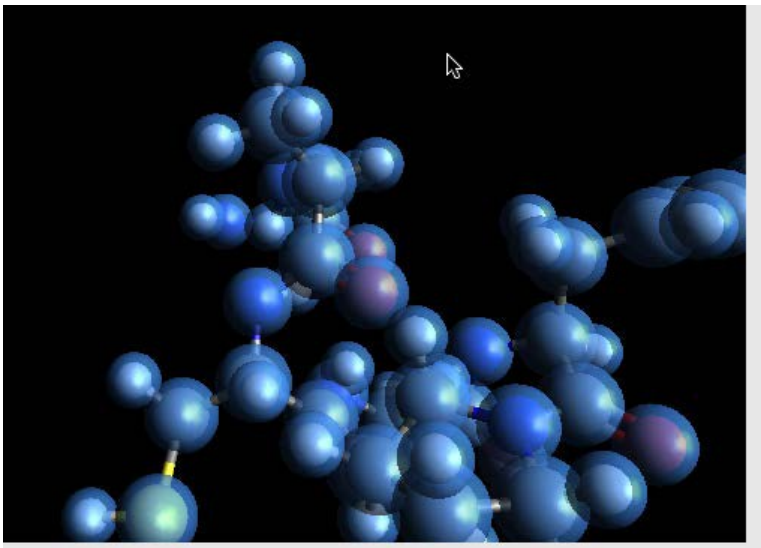
Insertar Péptidos

Pode optar por engadir aminoácidos no novo péptido.

Ao premer no aminoácidos, serán engadidos a secuencia da dereita. O péptido se acumula como unha secuencia.

Pódese seleccionar a **estrutura**

Preme aquí para inserir a secuencia na xanela principal. Os novos oligopéptidos se seleccionarán automaticamente, e a ferramenta de manipulación permitirá a translación e rotación da cadea na posición desexada.



E así obtemos un péptido

Ir a Ver, na barra de ferramentas,
Centrar

Para Gardar

Arquivo

Exportación: Pode garda-lo como:

Gráficos ...

Manter o control de gráficos bitmap da escena actual en BMP, PNG, JPEG ou GIF.

Gráficos Vectoriais ..

Gardar un arquivo PDF, PostScript, SVG ou a versión da escena actual.

POV-Ray

Gardar un arquivo e incluso hai unha [POV-Ray](#) Ray-tracing programa para producir unha imaxe de alta calidade axeitado para un cartel ou para outros fins.

Seguimos aprendiendo e aprovechando as propostas de do Escritorio del Docente



Marcos e Maricel