

Tutorial Avogadro

Barra de herramientas:



Consejo: mantener los menús “Preferencias de herramientas” y “Preferencias de pantalla” siempre activas.

Herramienta de dibujo (F8)



Insertar átomo

Borrar átomo



Herramienta de navegación (F9)



Para la molécula

Rotar Agrandar/achicar Mover



Herramienta de manipulación (F10)



Para átomos

Rotar Agrandar/achicar Mover



Herramienta de selección (F11)



Pulsar para seleccionar átomos individuales y arrastrar para seleccionar varios átomos.

Herramienta de rotación automática



Permite rotar la molécula con el botón izquierdo del mouse, el largo y la dirección de la línea que se dibuja indica la dirección y la velocidad de la rotación.

Herramienta de optimización automática



Pulsar para optimizar la estructura.

Herramienta para medir



Seleccionar hasta 4 átomos: distancias, ángulos y diedros.

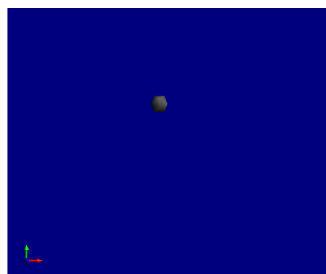
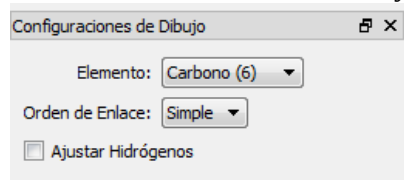


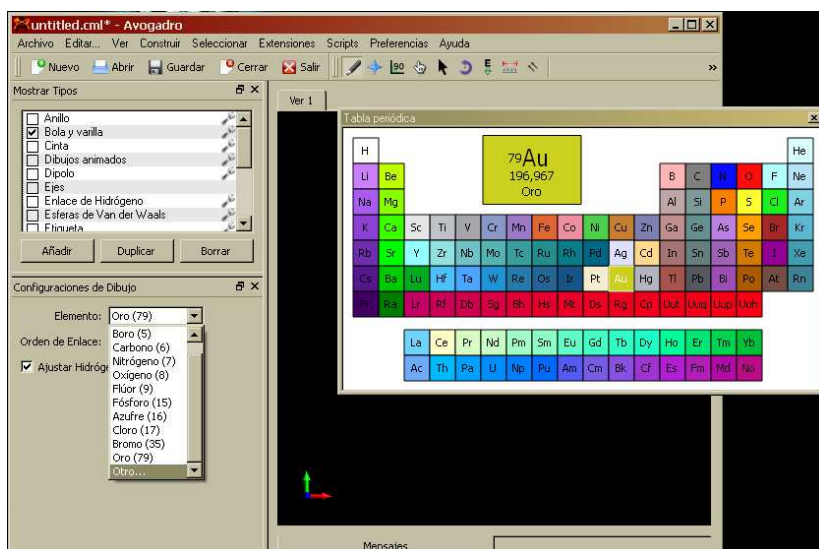
Actividad 1: Crear una molécula de CO₂ y optimizar su estructura.

Seleccionar la herramienta de dibujo



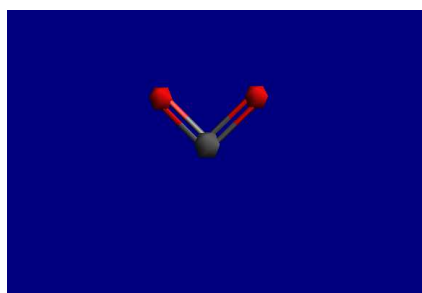
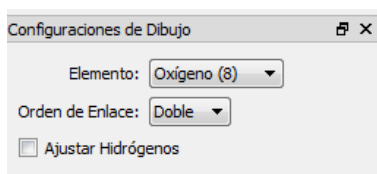
Seleccionar elemento carbono y dibujarlo



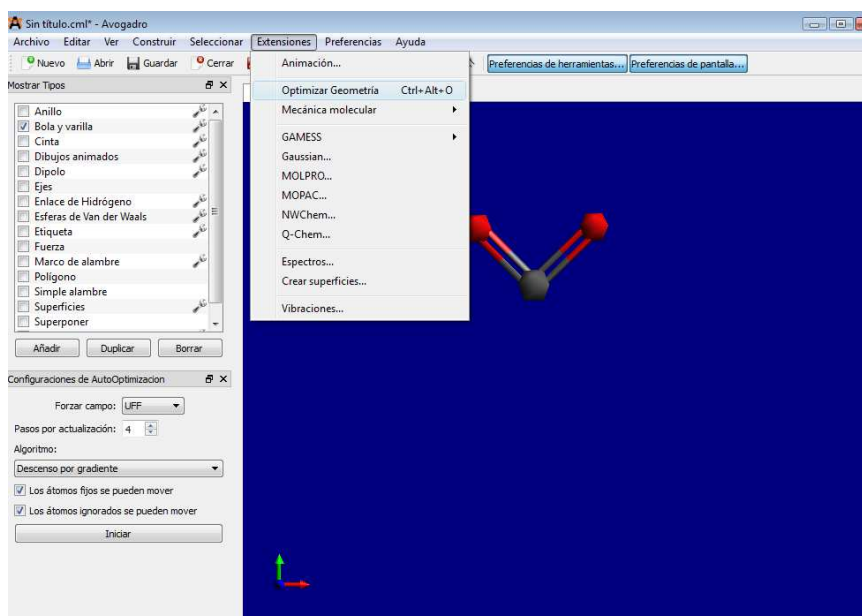


Aclaración: si quisiéramos seleccionar algún elemento que no se encuentra en la lista, seleccionamos la opción "Otro" de la solapa "Elemento" y se despliega una tabla periódica completa para seleccionar el átomo deseado.

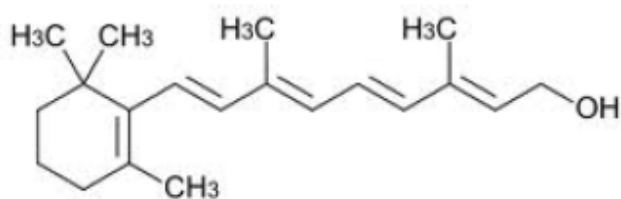
Luego cambiar elemento a oxígeno enlace doble y dibujar 2 átomos de oxígeno partiendo del átomo de carbono. Para ello presionar el mouse sobre el átomo de carbono, arrastrar y soltar para producir el enlace.



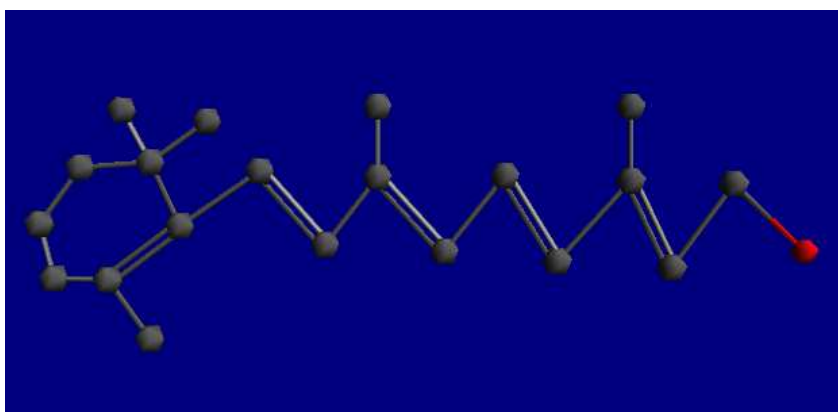
Luego optimizar la estructura seleccionando "Optimizar geometría" dentro del menú "Extensiones" como muestra la impresión de pantalla:



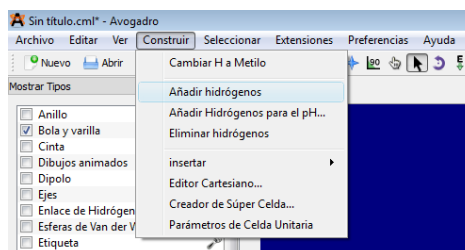
Actividad 2: Dibujar una molécula vitamina A



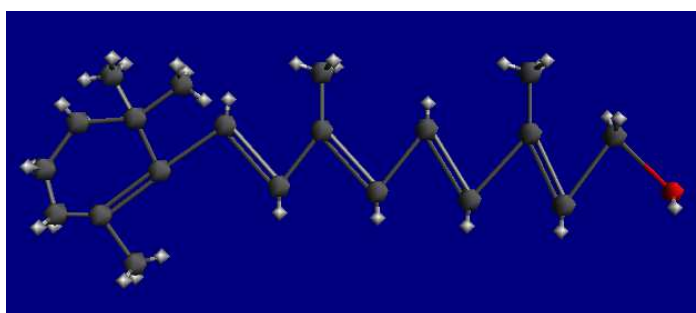
Primero dibujar la estructura con la herramienta de dibujo a la estructura dibujada arriba  lo más parecido posible



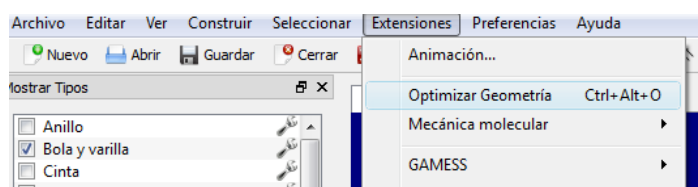
Una vez dibujada la molécula a mano, hay que agregarle los átomos de hidrógeno, para ello seleccionar "Añadir hidrógenos" del menú "Construir":



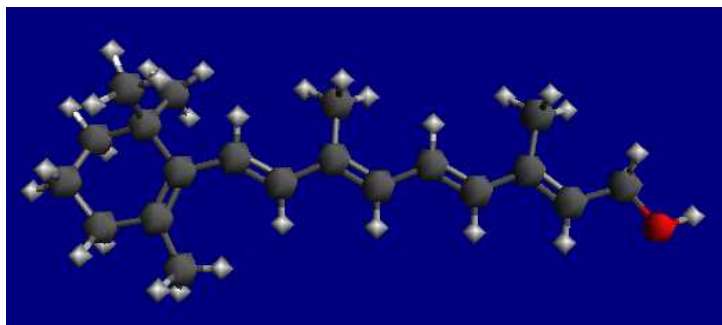
Se obtiene la siguiente estructura:



Luego hay que optimizar la geometría de la molécula del mismo modo que se explicó en la actividad 1:

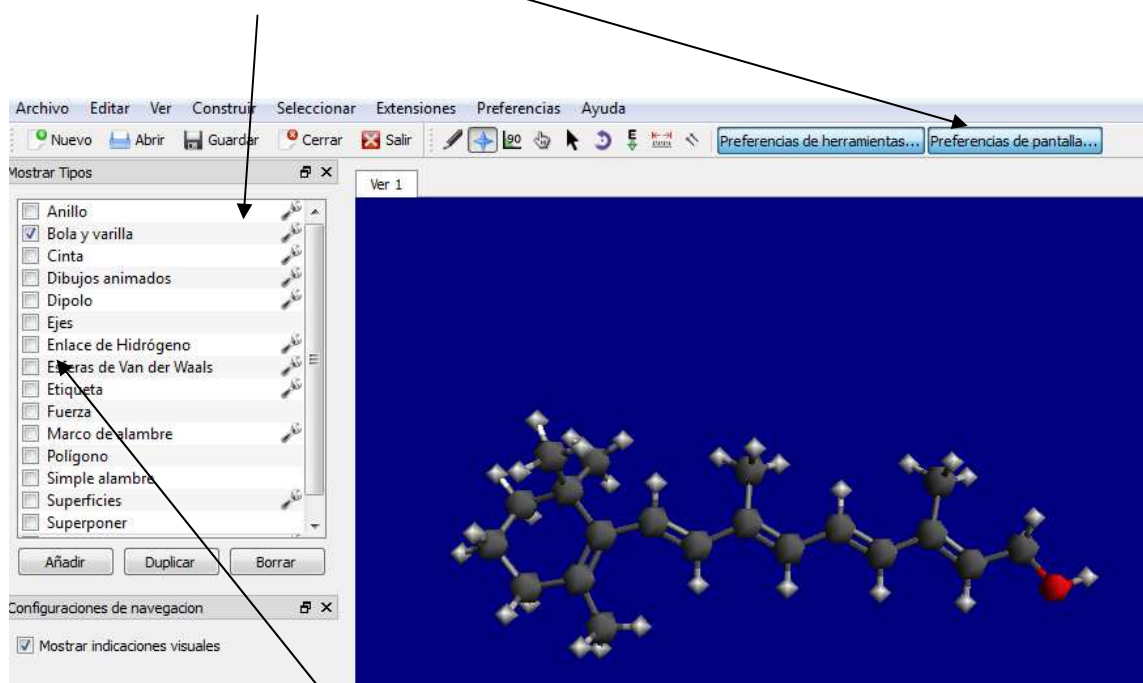


Se obtiene la molécula terminada



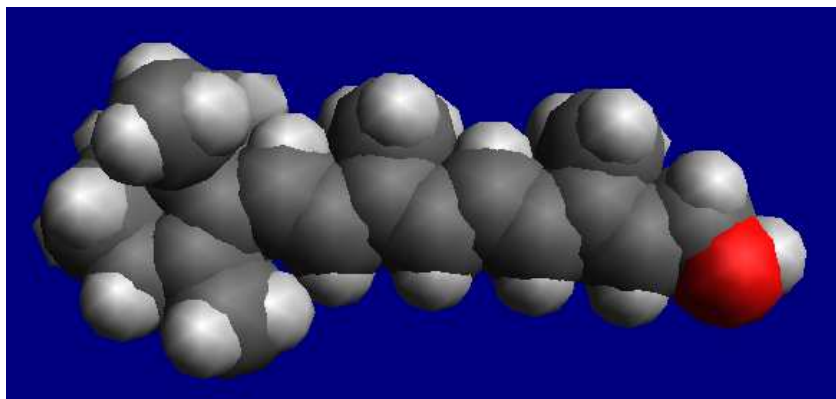
Para visualizarla de otra manera debe estar activa la pestaña "Preferencia de pantalla", al hacerlo es posible seleccionar diferentes modos de visualización (ver panel izquierdo)

Aparece esta ventana

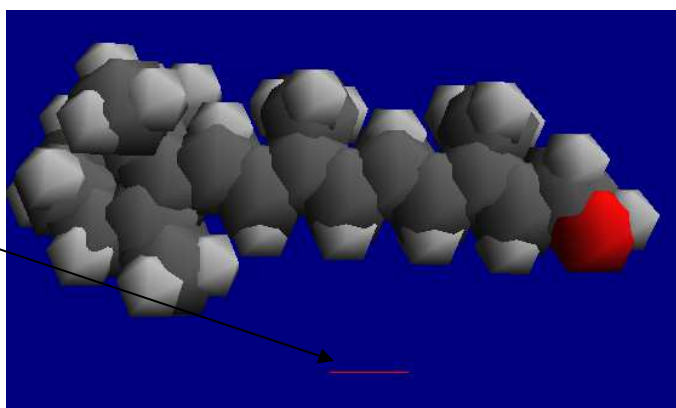


Seleccionar "Esferas de Van der Waals" clickeando en el cuadrado

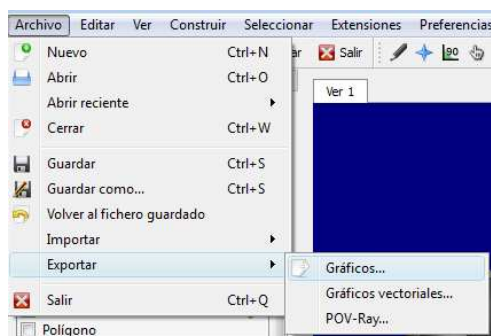
Se obtiene:



Para animar presionar la herramienta de rotación automática y comenzar animación dibujando una línea con el botón izquierdo del mouse, la molécula comenzará a girar:

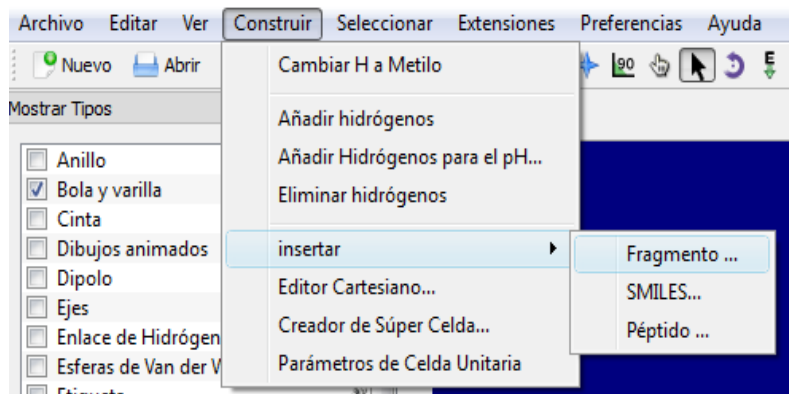


Para guardar una imagen de la estructura obtenida ir a Archivo, luego Exportar y luego Gráfico

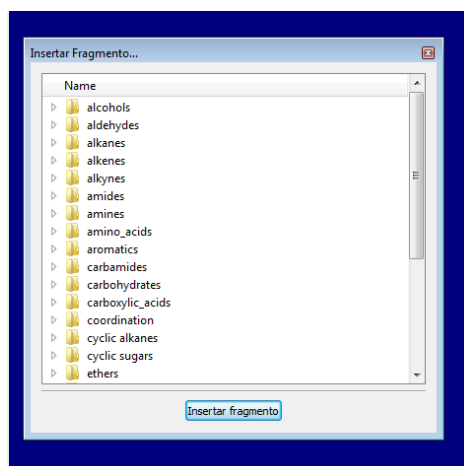


Actividad 3: Construir el aminoácido metionina. Para ello insertaremos el aminoácido que se encuentra como parte de plantados de moléculas que tiene Avogadro y lo copiaremos.

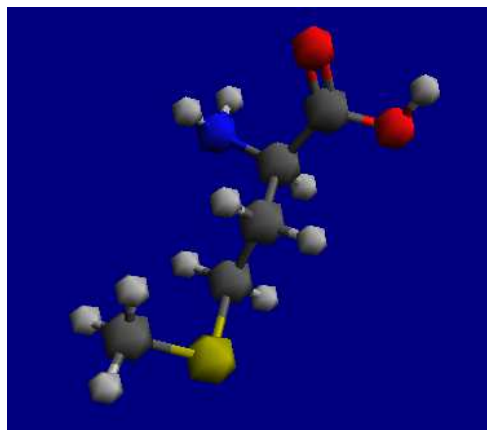
Ir a la opción "Construir", luego "insertar" y luego "Fragmento".



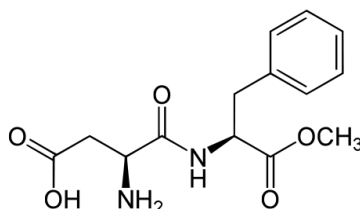
Aparecerá la siguiente ventana:



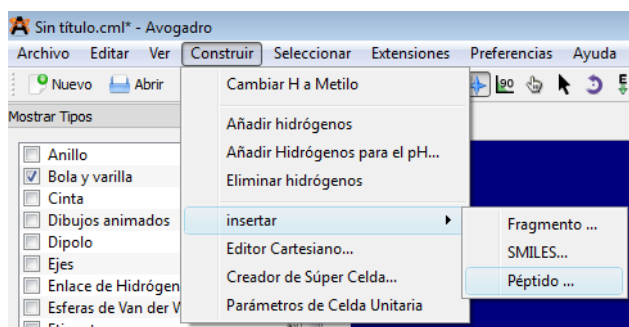
Ir a `share/avogadro/fragments/amino_acids` y seleccionar `D-methionine.cml`. Se cargará el aminoácido en la ventana.



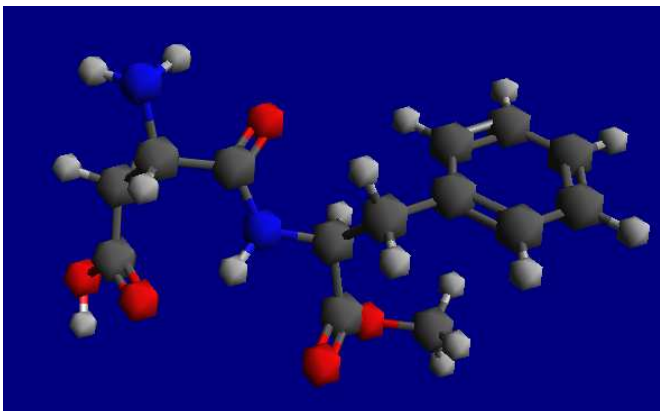
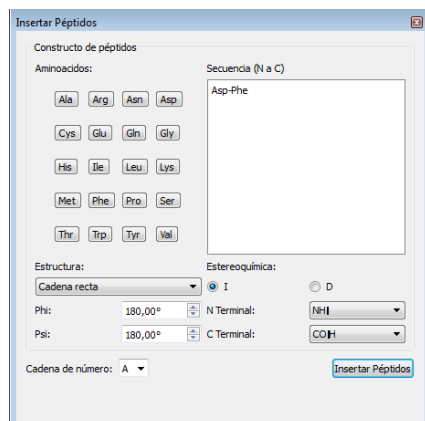
Actividad 4: Construir una molécula de aspartamo (N-(L- α -Aspartil)-L-fenilalanina, 1-metil ester). Para ello pueden partir de un péptido formado por los aminoácidos ácido aspártico (Asp) y fenilalanina (Phe).



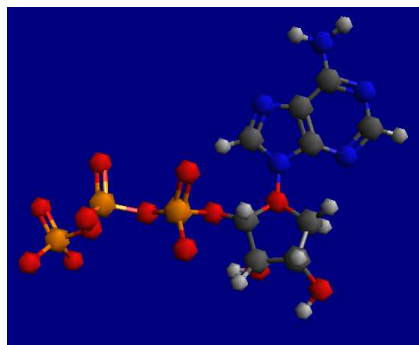
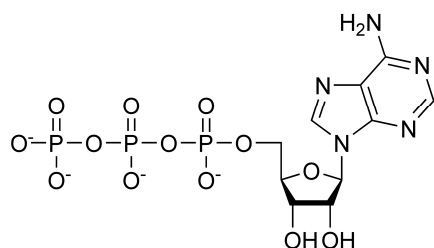
Para ello ir a "Construir", "insertar", "Péptido":



Crear el péptido Asp-Phe cliqueando en el panel izquierdo y finalizar la molécula agregando un grupo metilo (CH_3) en el lugar correspondiente.



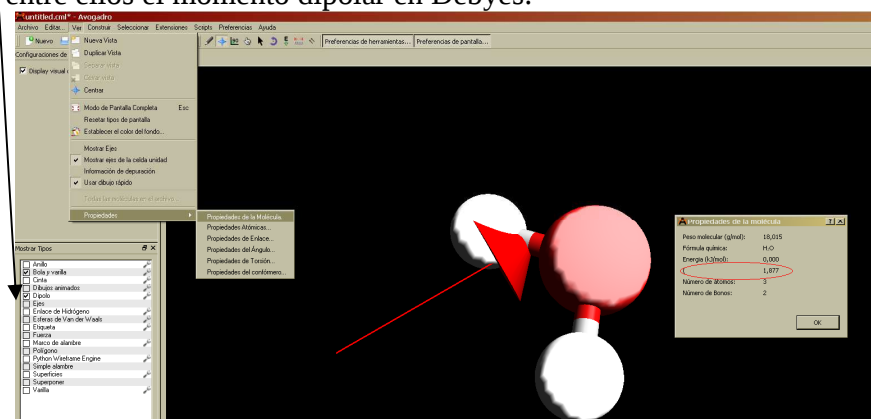
Actividad 5: Construir una molécula de adenosina trifosfato (ATP).



Actividad 6: Cálculo de propiedades moleculares. Determinar si las siguientes moléculas poseen un dipolo permanente: agua (H_2O); disulfuro de carbono (CS_2); metano (CH_4); amoníaco (NH_3); trifluoruro de boro (BF_3).

Para esto, dibujar cada una de las moléculas y, luego de optimizar su geometría, activar la opción **dipolo** de “Preferencias de pantalla”.

Para saber la magnitud del vector momento dipolar, ir al menú "Ver"/ "Propiedades"/ "Propiedades de la molécula". Se abrirá una ventana que reporta varios parámetros de la molécula, entre ellos el momento dipolar en Debyes:



Actividad 7: Integrando herramientas.

Muchas veces resulta más “amigable” dibujar las moléculas en el ChemSketch, pero la visualización es más eficiente con el Avogadro. Esto se puede realizar guardando en el formato correcto la estructura generada en ChemSketch.

- Dibuje su molécula de interés dentro del ChemSketch como hicimos en la guía anterior.
- Optimice su geometría presionando el botón correspondiente en la barra de herramientas.
- Guarde la estructura en el formato de archivo de extensión “.mol”. Para esto vaya al menú “File”/”Save As” y seleccione el formato “.mol”.
- Vuelva al programa Avogadro y pruebe abrir este archivo para su visualización.