

# Tutorial Avogadro

Barra de herramientas:



## Herramienta de dibujo (F8)



Insertar átomo

Borrar átomo



## Herramienta de navegación (F9)



Para la molécula



## Herramienta de manipulación (F10)



Para átomos



### 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 3 átomos

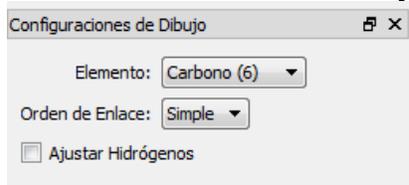


**Actividad 1:** Crear una molécula de CO<sub>2</sub> y optimizar su estructura.

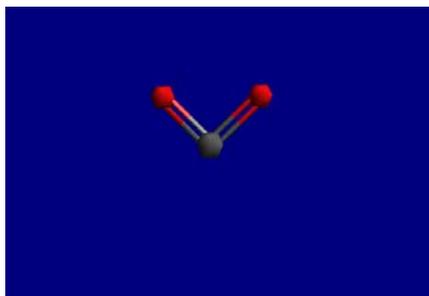
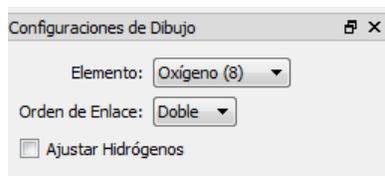
Seleccionar la herramienta de dibujo



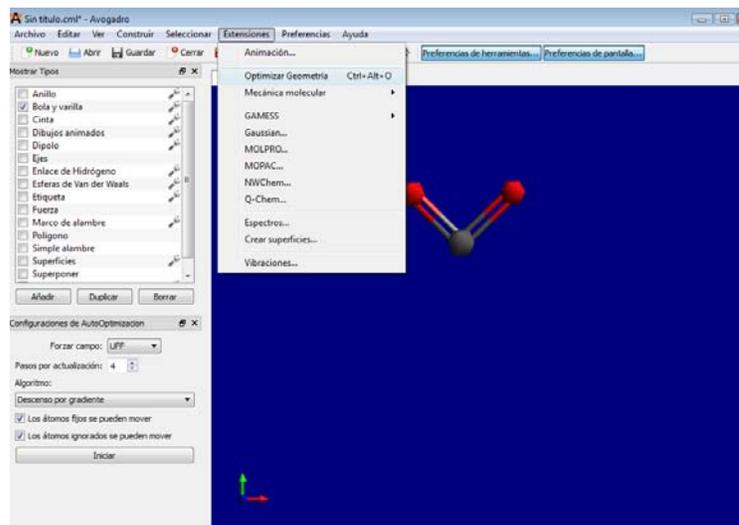
Seleccionar elemento carbono y dibujarlo



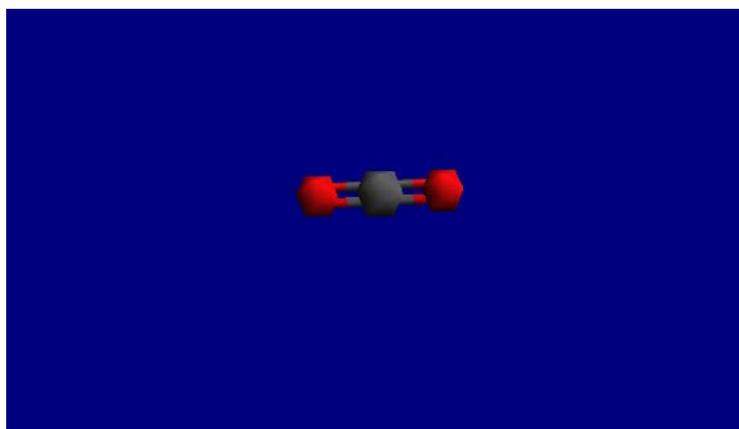
Luego cambiar elemento a oxígeno enlace doble y dibujar 2 átomos de oxígeno partiendo del átomo de carbono



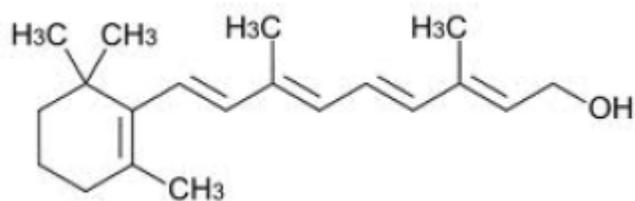
Luego optimizar la estructura:



Se obtiene la siguiente molécula:



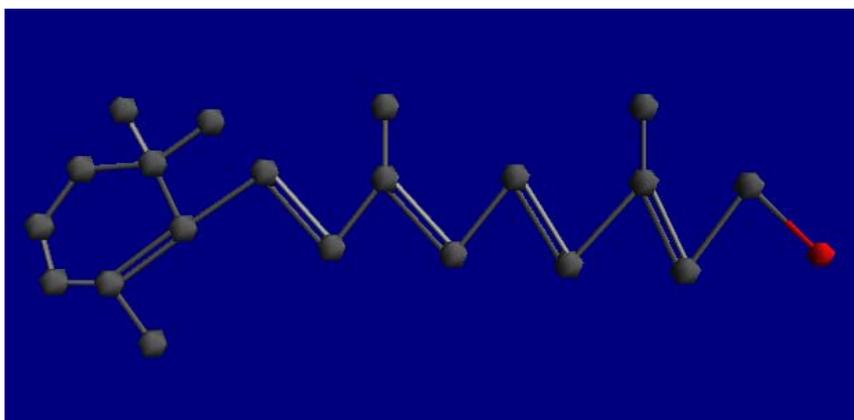
## Actividad 2: Dibujar una molécula vitamina A



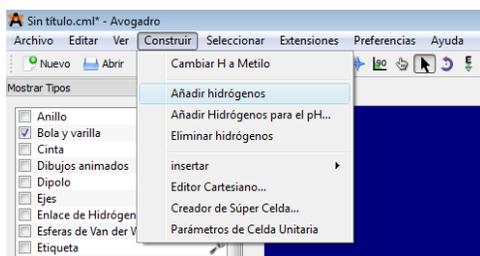
Primero dibujar la estructura con la herramienta de dibujo a la estructura



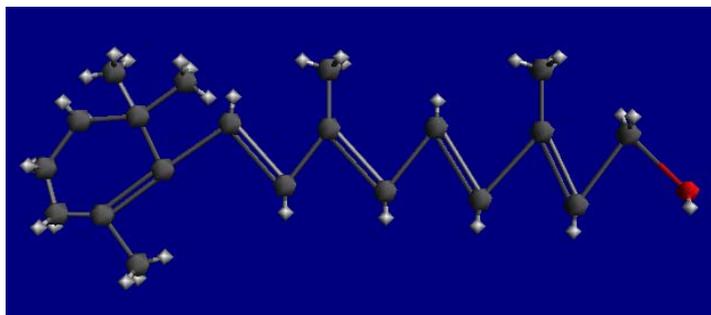
lo más parecido posible



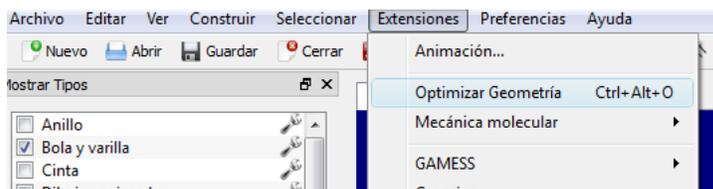
Una vez dibujada la molécula a mano, hay que agregarle los átomos de hidrógeno, para ello:



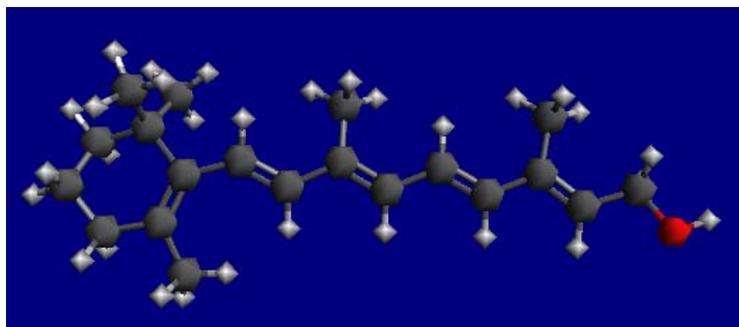
Se obtiene la siguiente estructura:



Luego hay que optimizar la geometría de la molécula:

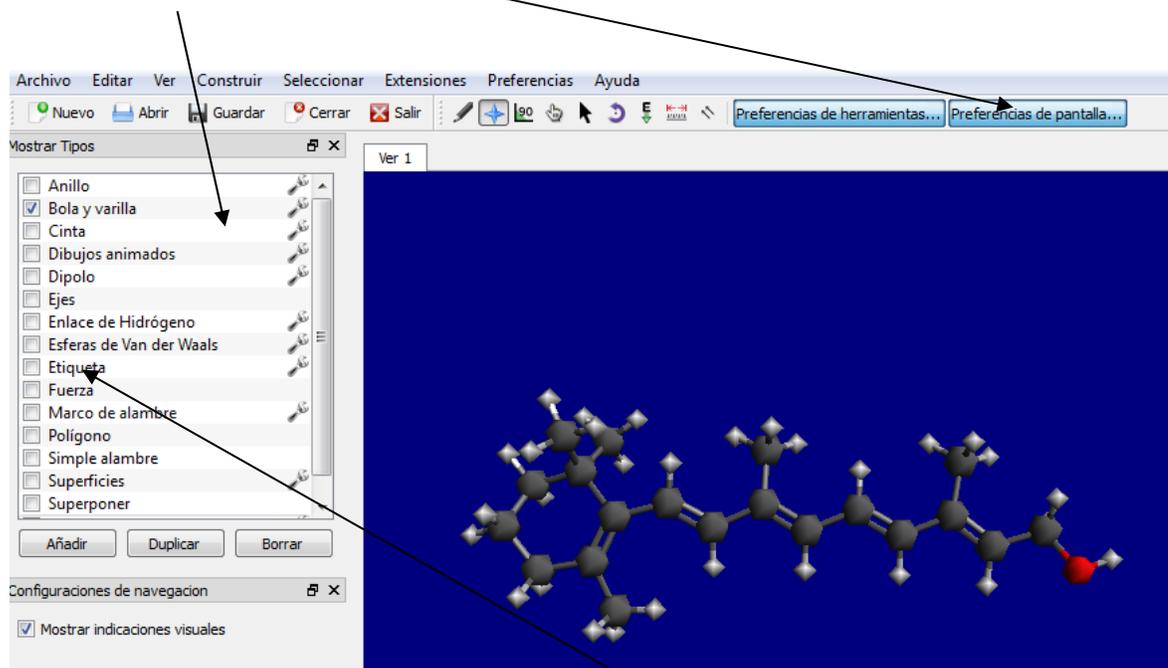


Se obtiene la molécula terminada



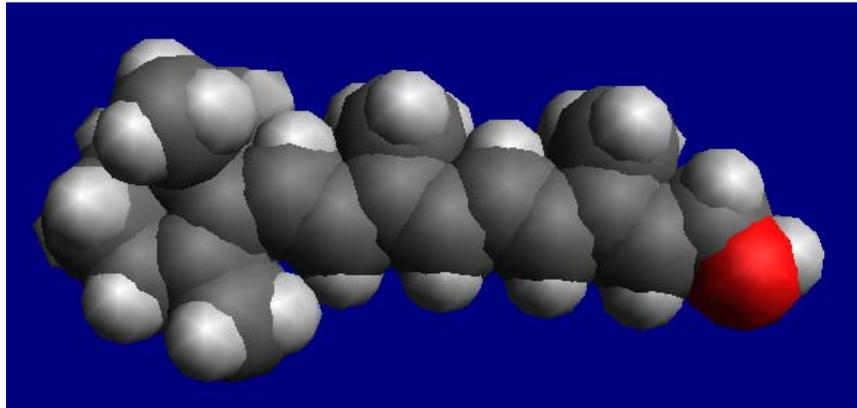
Para visualizarla de otra manera debe estar activo preferencia de pantalla

Aparece esta ventana

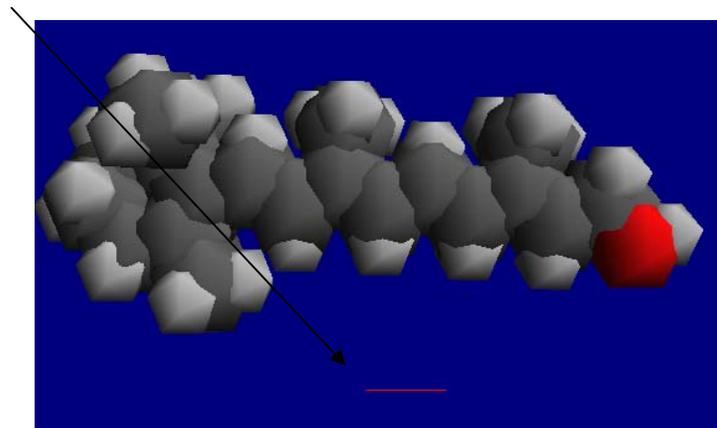


Seleccionar Esferas de Van der Waals clickeando en el cuadrado

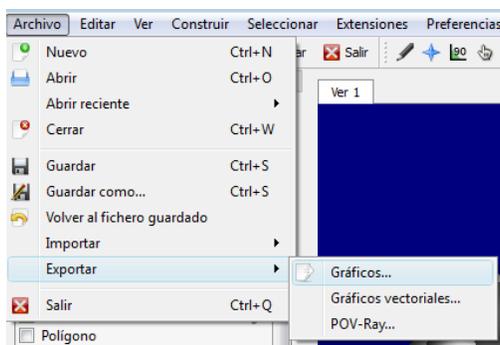
Se obtiene:



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:

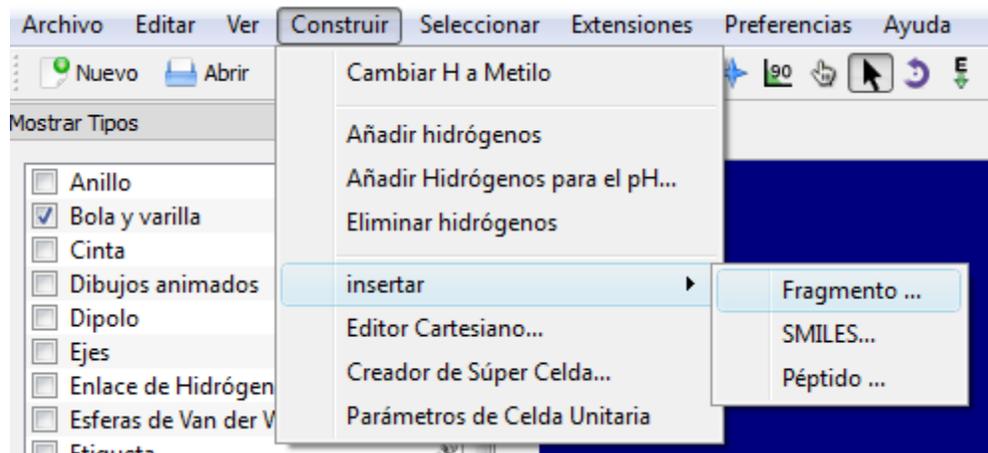


Para guardar una imagen de la estructura obtenida ir a Archivo, luego Exportar y luego Gráfico

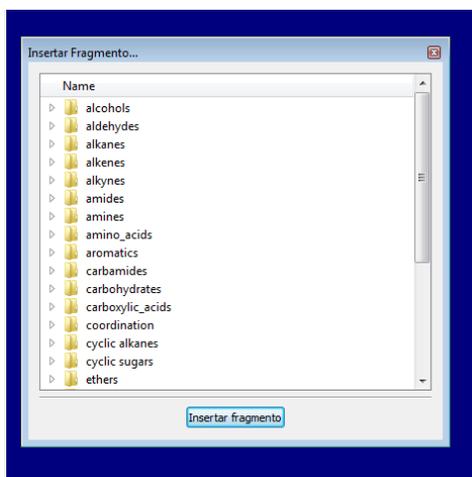


**Actividad 3:** Construir un aminoácido metionina. Para ello insertaremos el aminoácido y lo copiaremos.

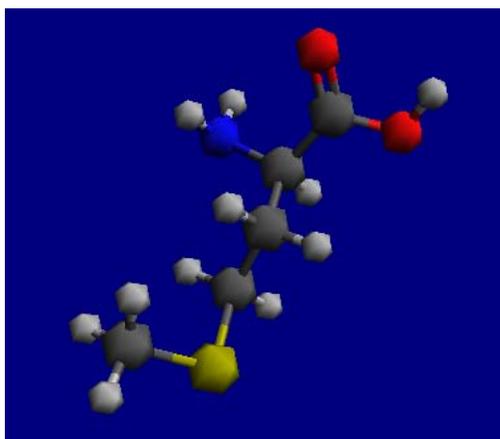
Ir a la opción Construir, luego insertar y luego Fragmento.



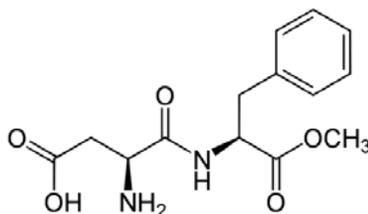
Aparecerá la siguiente ventana:



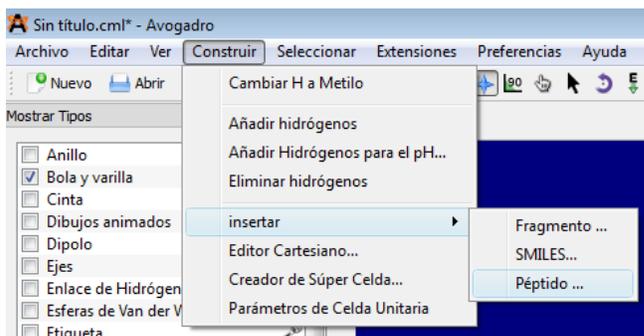
Seleccionar amino\_acids y luego D-methionine.cml, se cargará el aminoácido en la ventana. Repitiendo el procedimiento aplicado para la vitamina A construir la molécula.



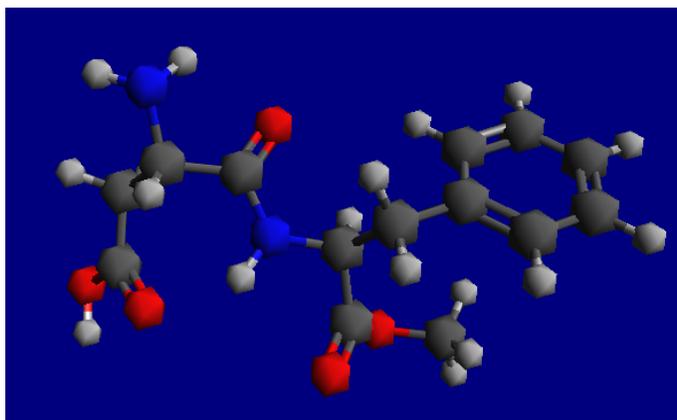
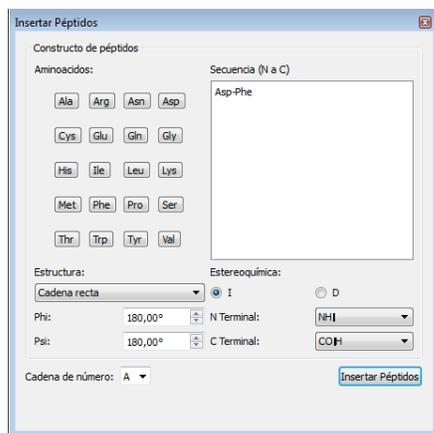
**Actividad 4:** Construir una molécula de aspartamo (N-(L- $\alpha$ -Aspartil)-L-fenilalanina, 1-metil ester). Para ello pueden partir de un péptido formado por los aminoácidos ácido aspártico (Asp) y fenilalanina (Phe).



Para ello ir a Construir, insertar, Péptido



Crear el péptido Asp-Phe y finalizar la molécula agregando un grupo metilo (CH<sub>3</sub>).



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

