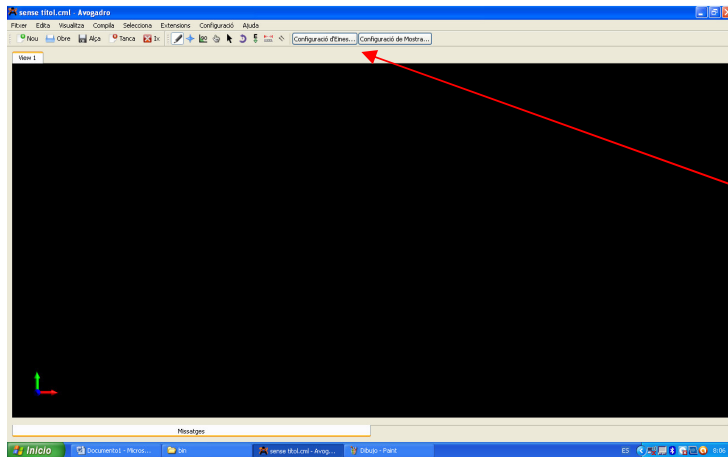


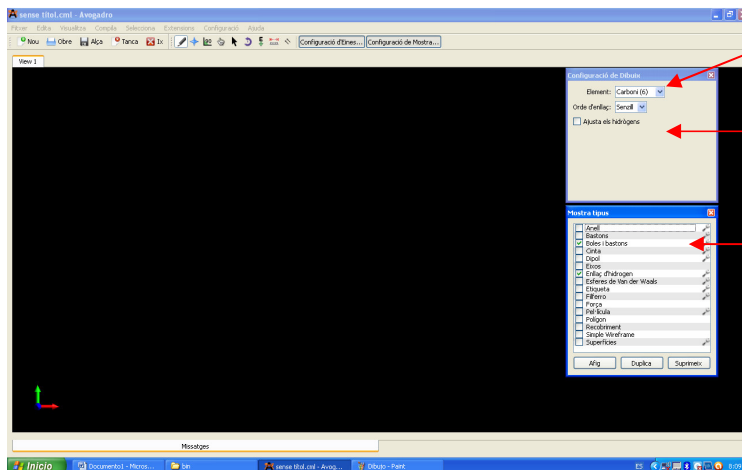
Programa Avogadro

El programa Avogadro permet representar estructures moleculars.

Exemple 1: representació de l'etanol: $\text{CH}_3\text{—CH}_2\text{OH}$



Activa aquests dos menús



Tria l'àtom a representar

Desactivat

Activat

Hem canviat el fons de la pantalla:
 → Visualitza
 → Estableix colors de fons...

Amb l'elecció d'Element: *Hidrogen(1)*, cada clic en pantalla representa un àtom

Configuració de Dibuix
 Element: Hidrogen (1)
 Orde d'enllaç: Senzill
 Ajusta els hidrògens

Mostra tipus
 Anell
 Bastons
 Bales i bastons
 Cèl·lula
 Dipol
 Eixos
 Enllaç d'hidrogen
 Esferes de Van der Waals
 Etiqueta
 Filferro
 Força
 Pel·lícula
 Polígon
 Recobriment
 Simple Wireframe
 Superfícies

Afig Duplica Suprimeix

Per eliminar una operació:
 Edita → Undo..

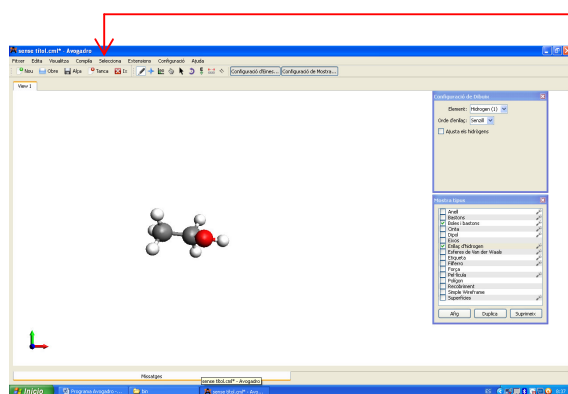
Per a representar enllaços, col·loca el punter sobre un àtom i arrossega'l fins l'àtom al qual vols unir-lo

Configuració de Dibuix
 Element: Hidrogen (1)
 Orde d'enllaç: Senzill
 Ajusta els hidrògens

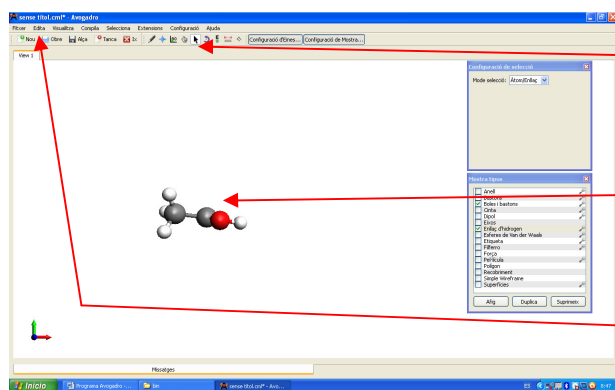
Mostra tipus
 Anell
 Bastons
 Bales i bastons
 Cèl·lula
 Dipol
 Eixos
 Enllaç d'hidrogen
 Esferes de Van der Waals
 Etiqueta
 Filferro
 Força
 Pel·lícula
 Polígon
 Recobriment
 Simple Wireframe
 Superfícies

Afig Duplica Suprimeix

Extensions → Optimitza Geometria



Exemple 2: Suposem que, a partir de l'estructura anterior, volem representar l'àcid etanòic (àcid acètic), $\text{CH}_3\text{—COOH}$.

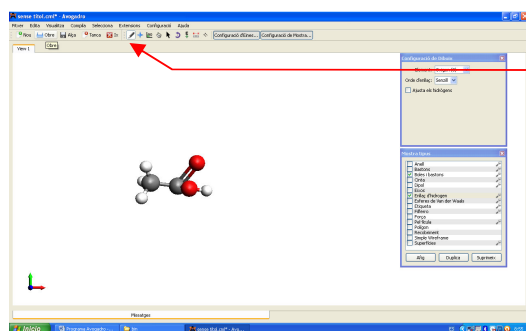


1. Activar la fletxa de selecció

2. Clic sobre cada element a suprimir

3. *Edita* → *Esborra* (eliminarà allò seleccionat)

A continuació, repetint els passos de representar un àtom d'oxigen i unir-lo al de carboni tenim la representació següent:

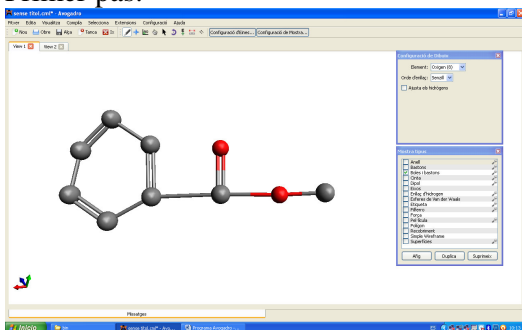


IMPORTANT: Has de tornar a activar aquest botó. El doble enllaç apareix fent un doble clic sobre un enllaç representat.

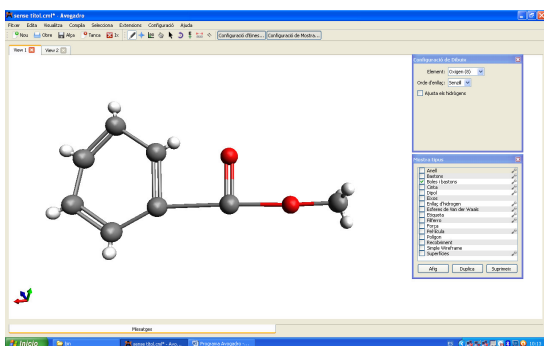
OBSERVACIÓ: Podrem construir una representació, sense tenir en compte els àtoms d'hidrogen, aquests els podem afegir al final polsant *Compila* → *Afig hidrògens*.

Exemple 3: (compostos amb anell benzènic) benzoat de metil: $C_6H_5COOCH_3$.

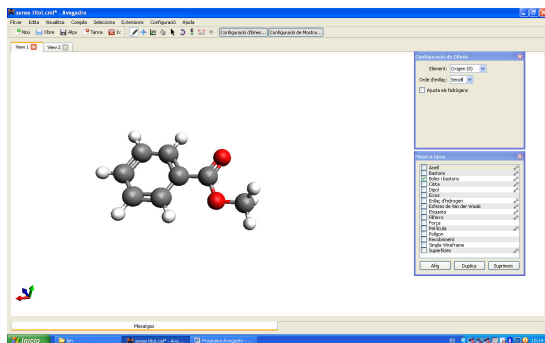
Primer pas:



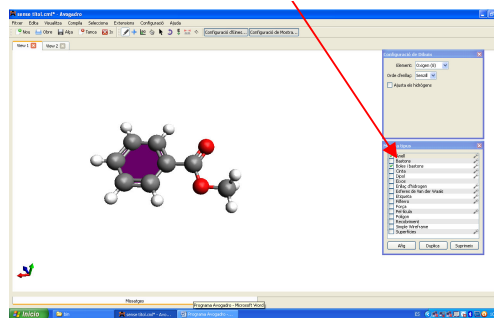
Segon pas: (*Compila*→*Afig hidrògens*)



Tercer pas: (*Extensions*→*Optimitza geometria*)



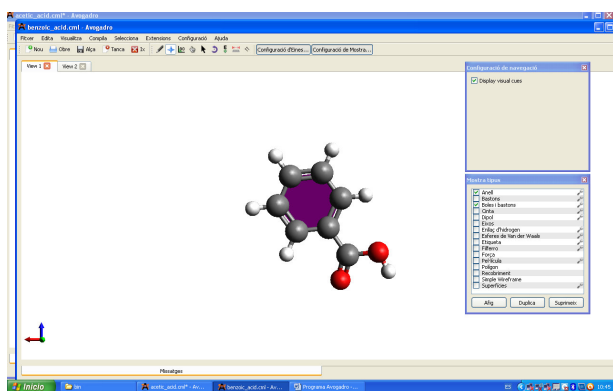
Observa el que ha ocorregut en seleccionar *Anell*



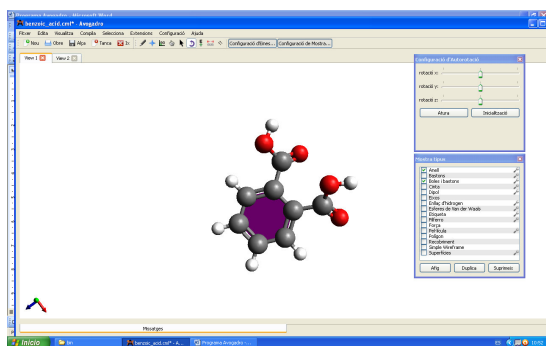
OBSERVACIÓ: El programa té una carpeta amb estructures moleculars, obri-la a través de *Obre*.

Exemples 4: (importar estructures de la carpeta) Suposem que vols escriure l'estructura molecular de l'àcid ftàlic (que té un anell benzènic unit a dos grups carboxílics).

Primer pas: importar l'àcid benzòic (*Obre*→*Fragments*→*Aromàtics...*)



Segon pas: esborrem un hidrogen i representem un grup carboxílic (-COOH)



OBSERVACIÓ: Si vols arxivar aquesta estructura, no oblide canviar el nom del document, per defecte té el nom corresponent a l'estructura importada.