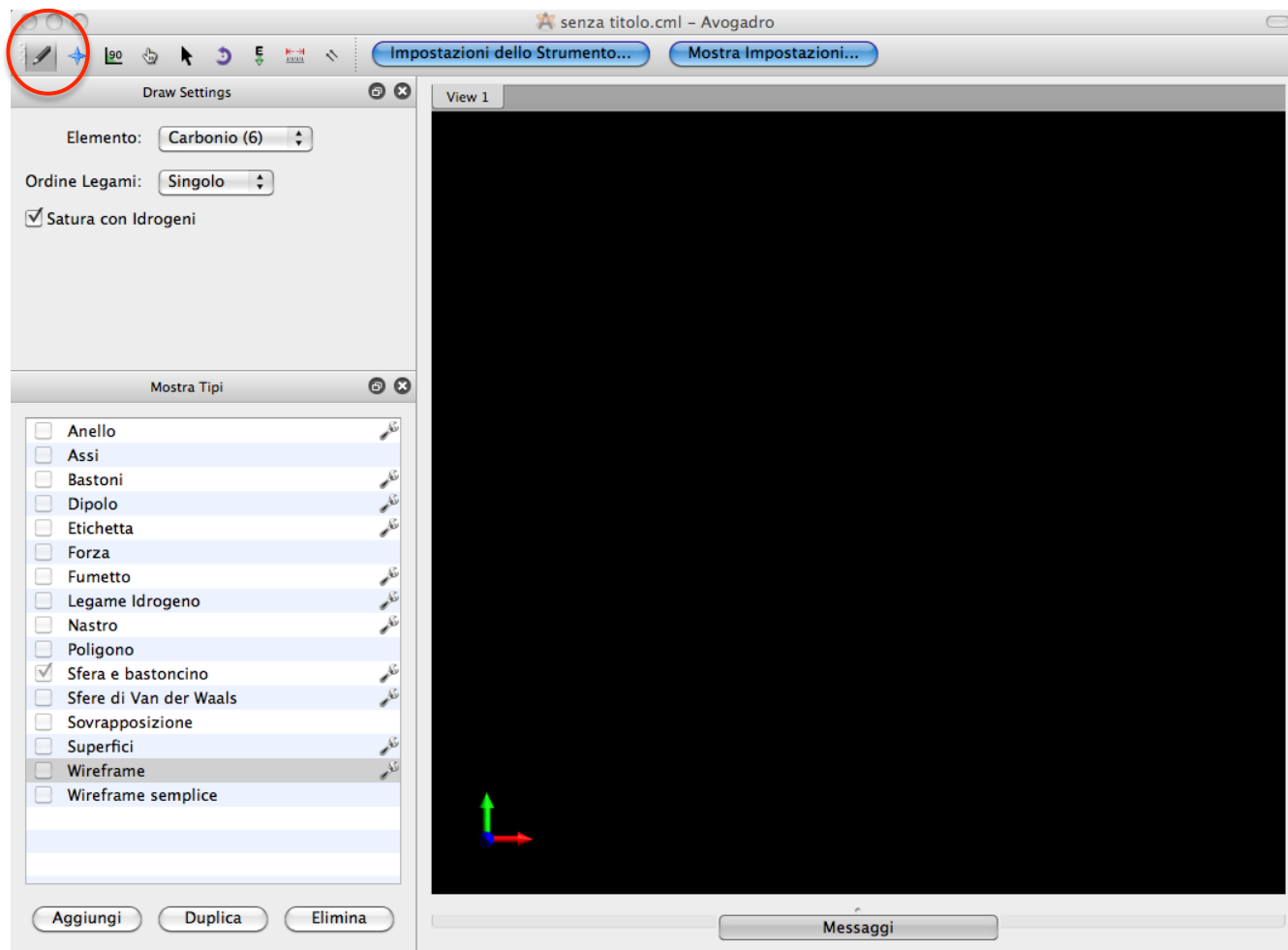


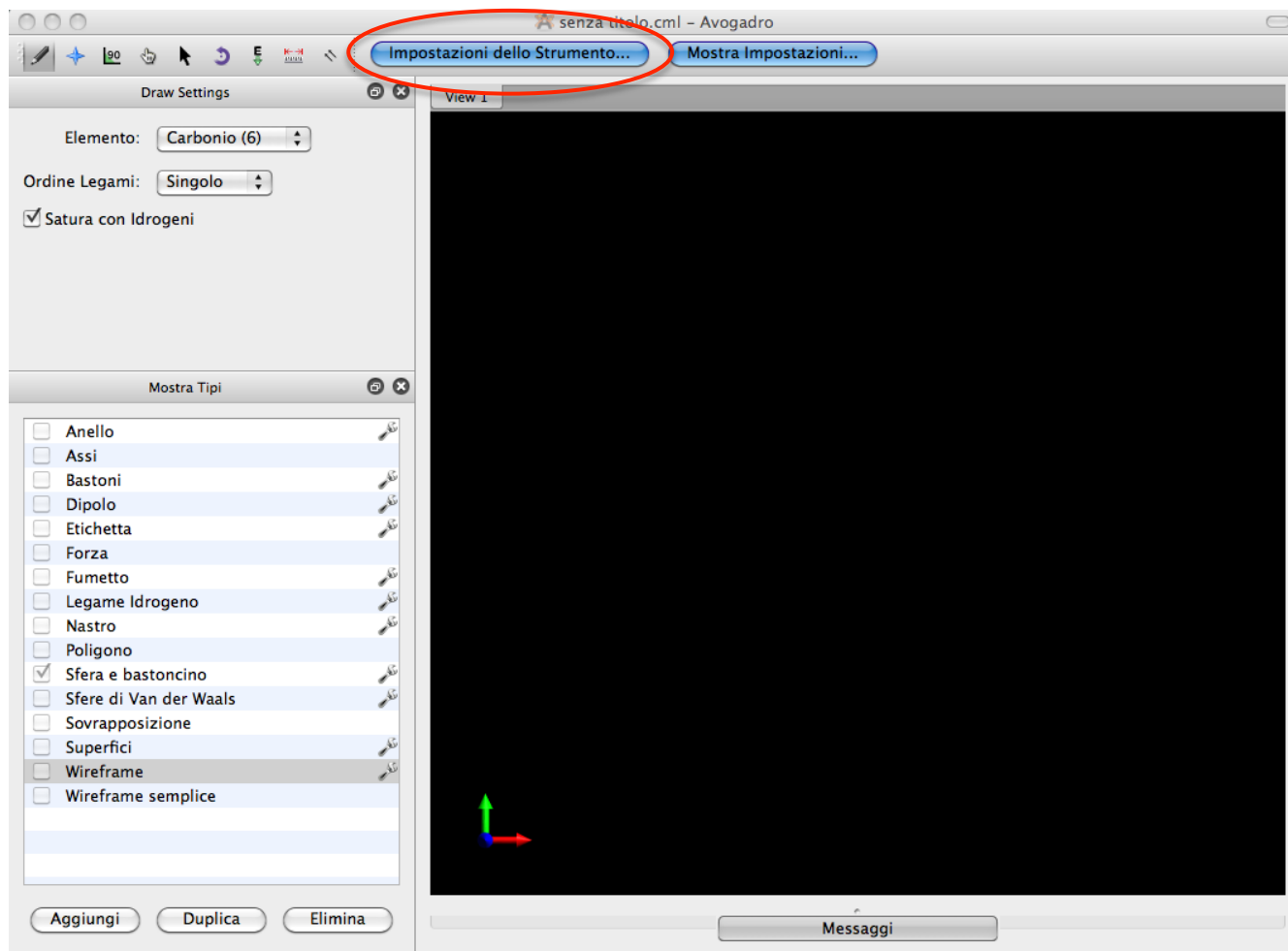
Suggerimenti d'uso per il programma Avogadro

Il programma Avogadro consente di disegnare molecole organiche e inorganiche.
Per iniziare a disegnare selezionare la matita, come indicato.



Disegnare le molecole

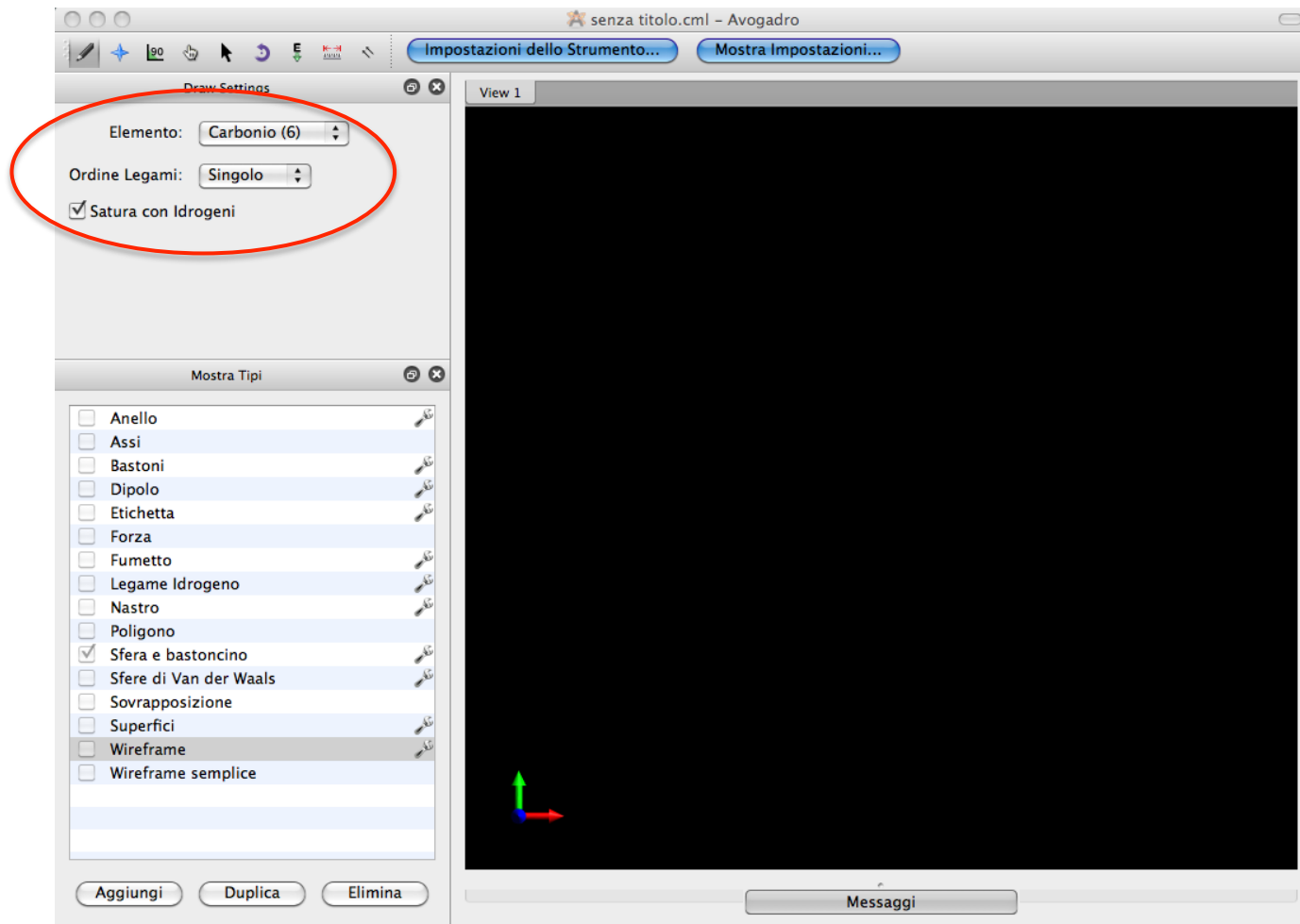
Per usare correttamente lo strumento matita, assicurarsi che siano evidenziate le impostazioni dello strumento. Se non lo sono, cliccare sul relativo bottone.



Selezionare i tipi di atomi e di legami

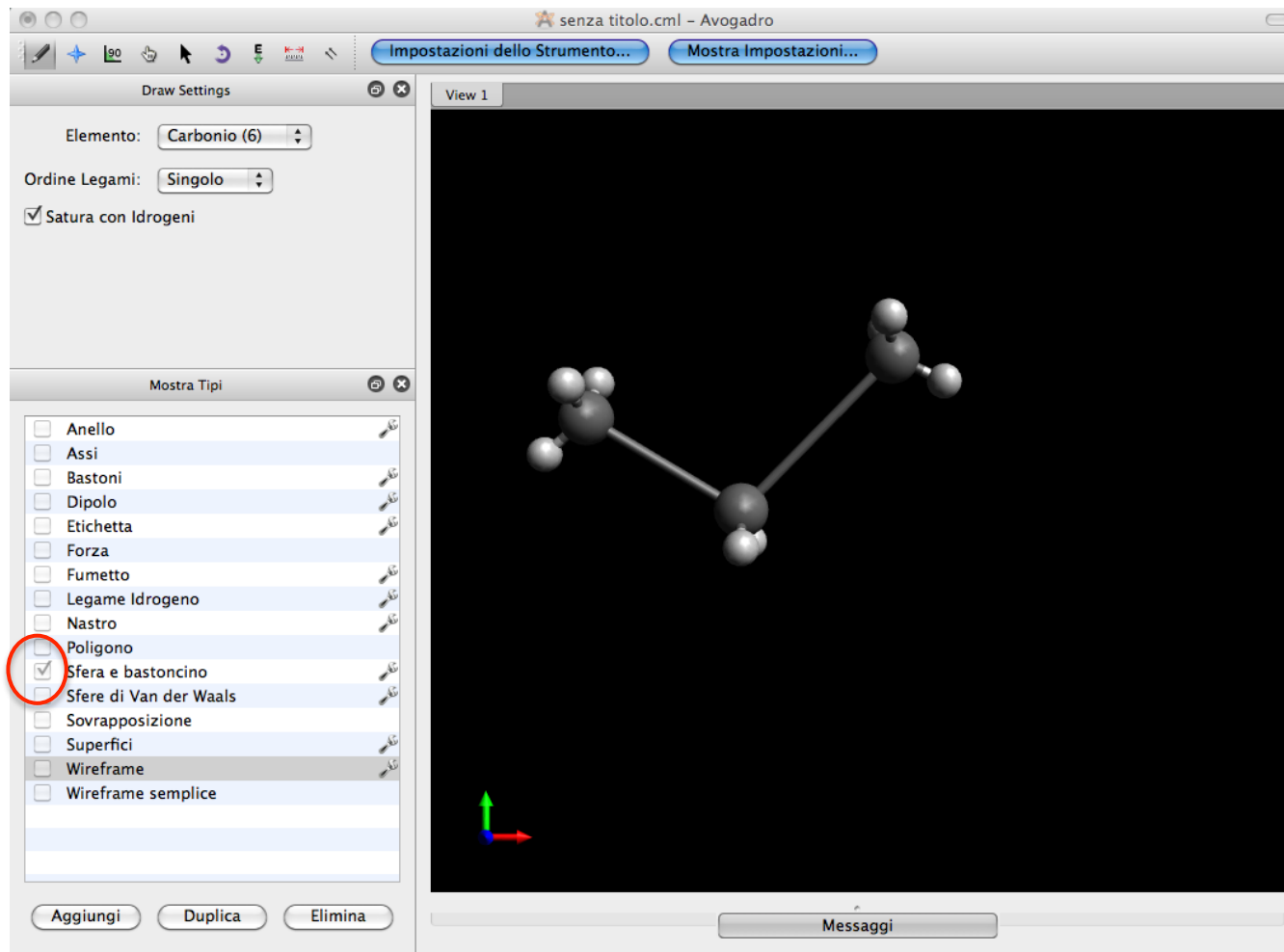
Selezionare l'elemento desiderato e l'ordine di legame.

Nel caso di molecole organiche, è conveniente selezionare l'opzione «satura con idrogeni».



Scegliere una rappresentazione

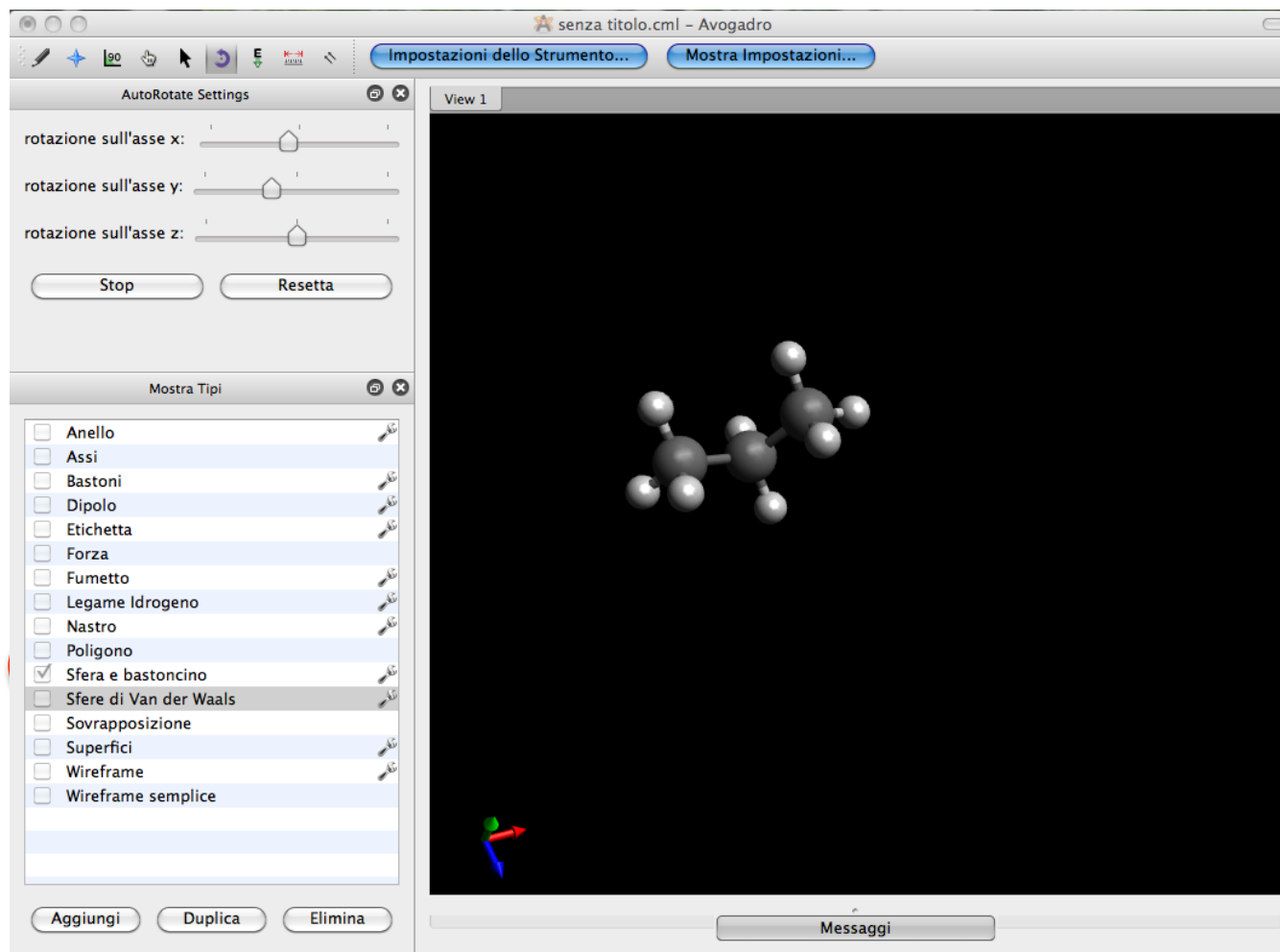
Selezionare la rappresentazione desiderata. In questo caso «sfera e bastoncino». Cliccando comparirà il primo gruppo della molecola; sempre tenendo premuto il mouse, trascinare per aggiungere altre unità. Rilasciare il mouse quando si è terminato.



Ottimizzare la geometria delle molecole

Una volta disegnata la struttura è possibile ottimizzarla.

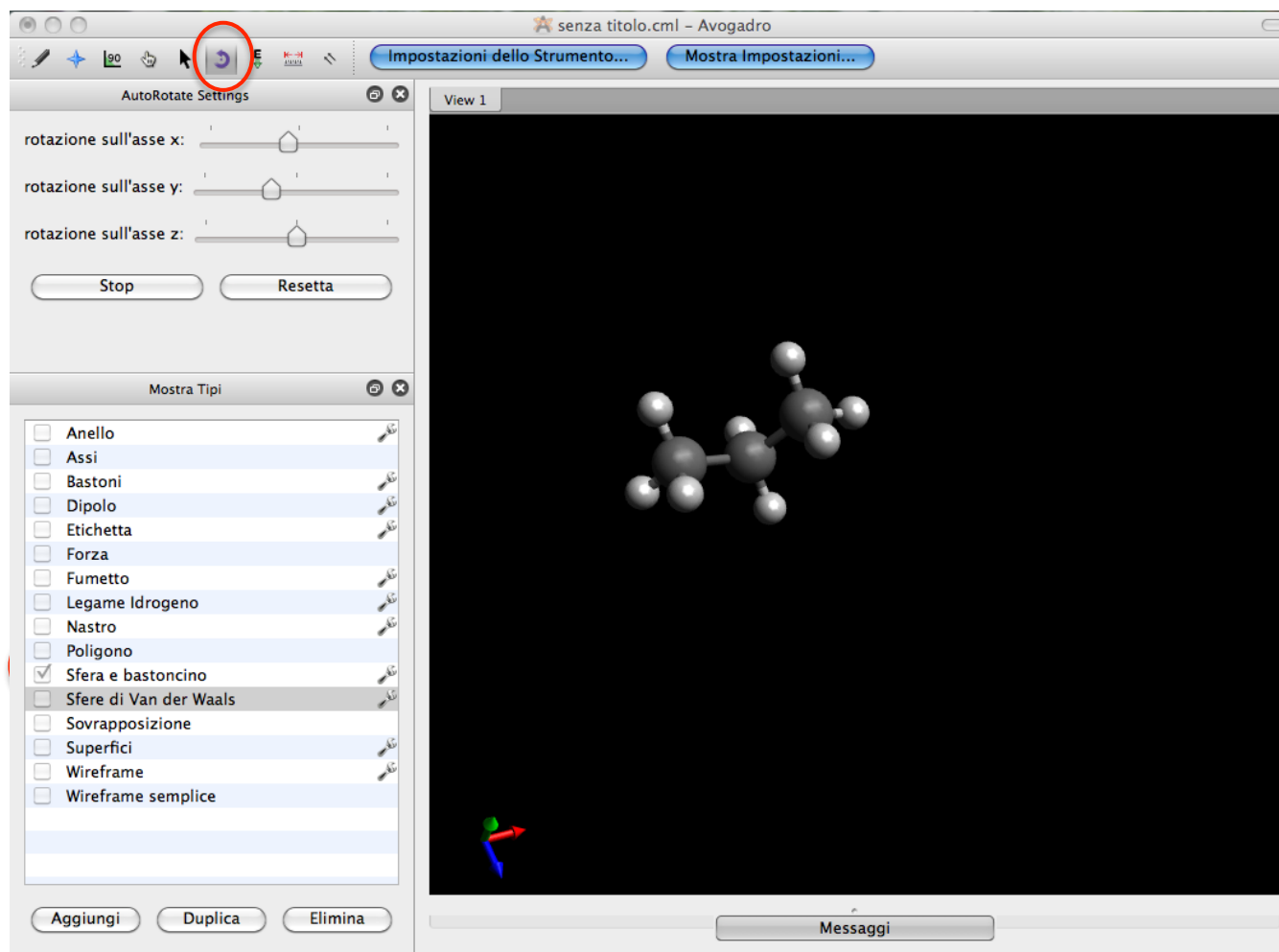
Per fare questa operazione è necessario selezionare, dal menu principale l'opzione «Estensioni» e, da qui, «Ottimizza la geometria».



Ruotare le molecole

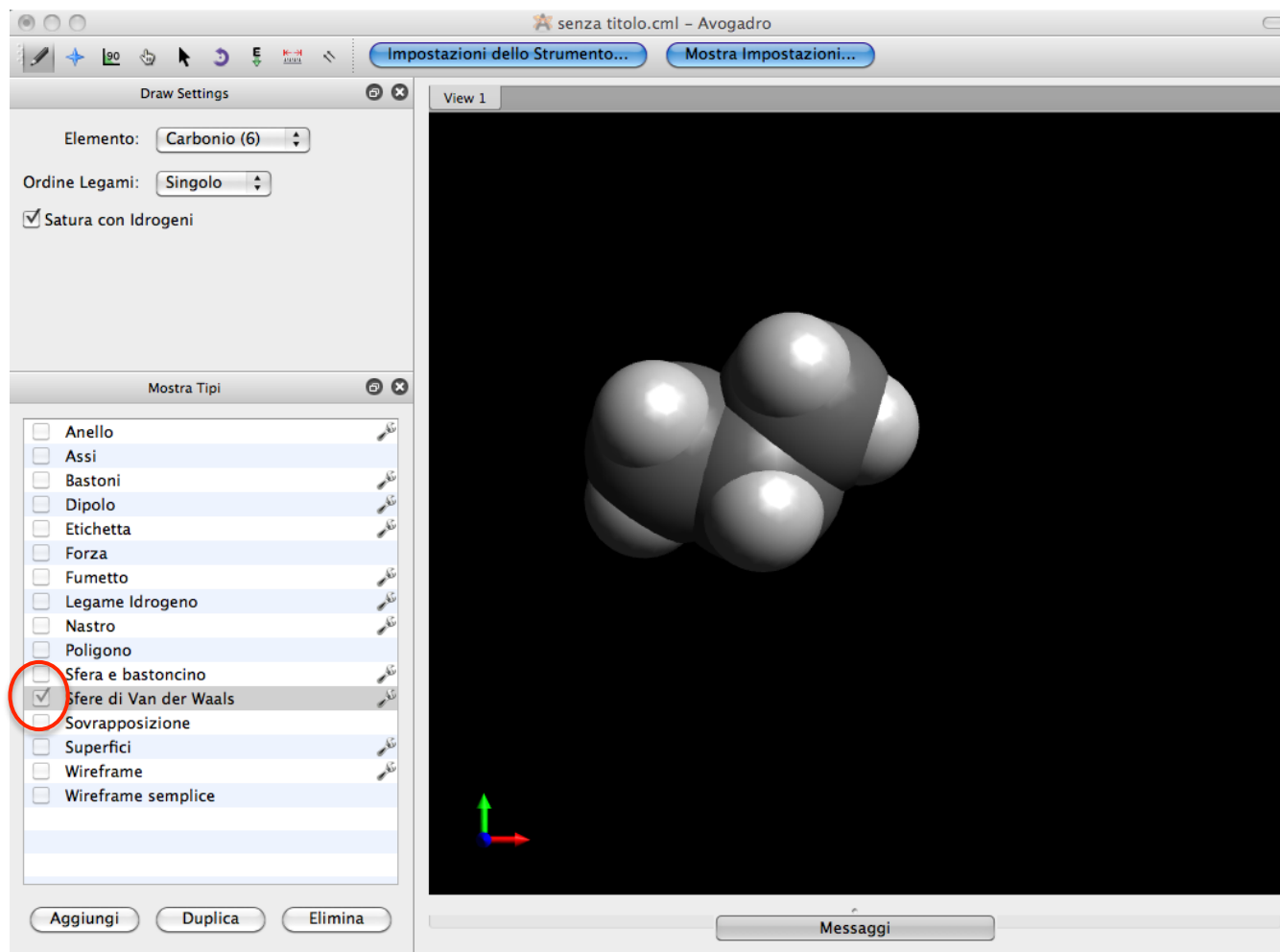
Una volta disegnata ottimizzata la struttura, è possibile ruotare la molecola per osservarla da tutti i punti di vista.

Per fare questa operazione è necessario selezionare la freccetta evidenziata in figura.



Cambiare rappresentazione

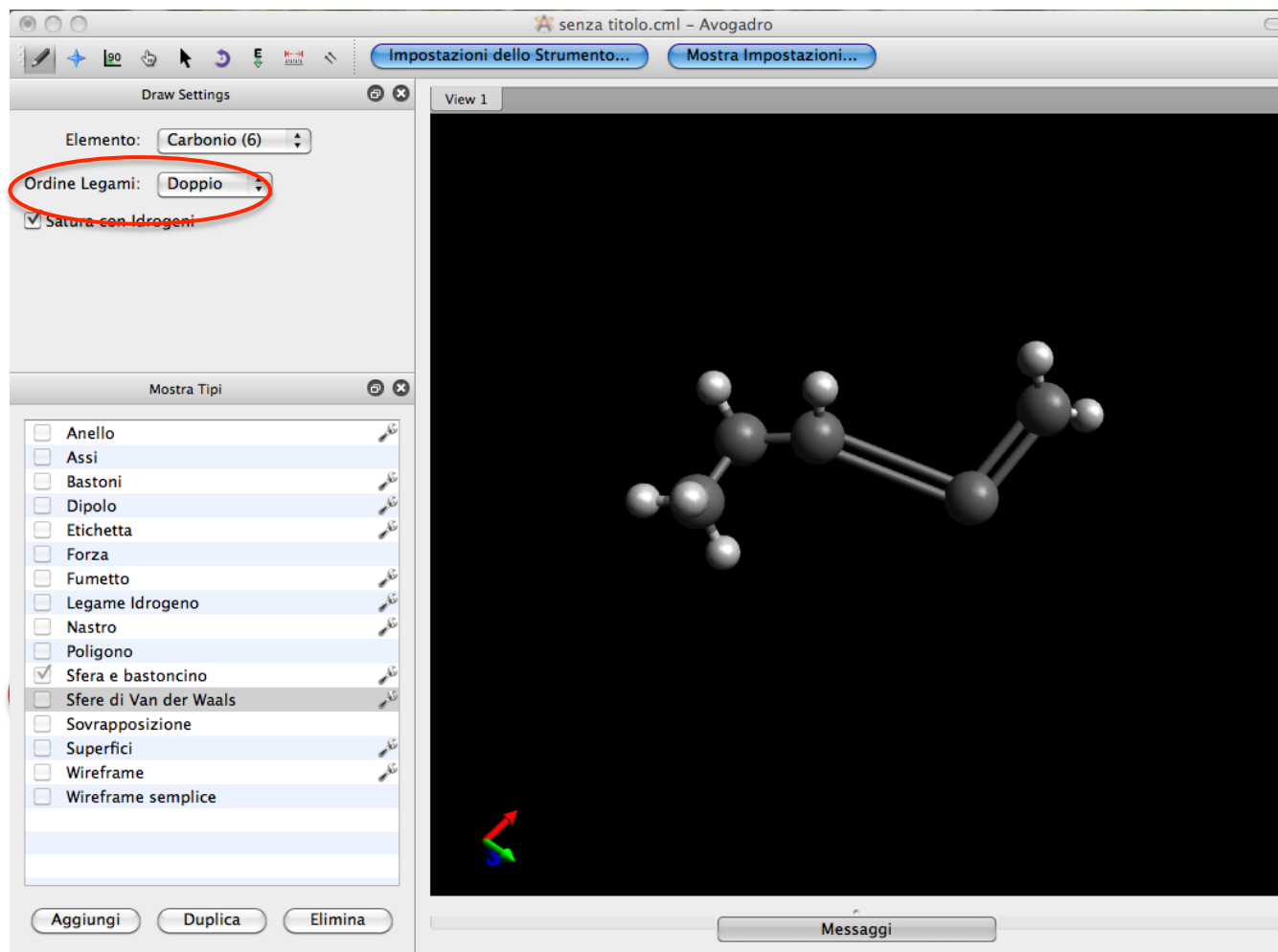
Una volta ottimizzata la struttura a sfere e bastoncini, è possibile anche cambiare rappresentazione. In questo caso, si è passati alla rappresentazioni con sfere di Van der Waals.



Inserire legami doppi e tripli

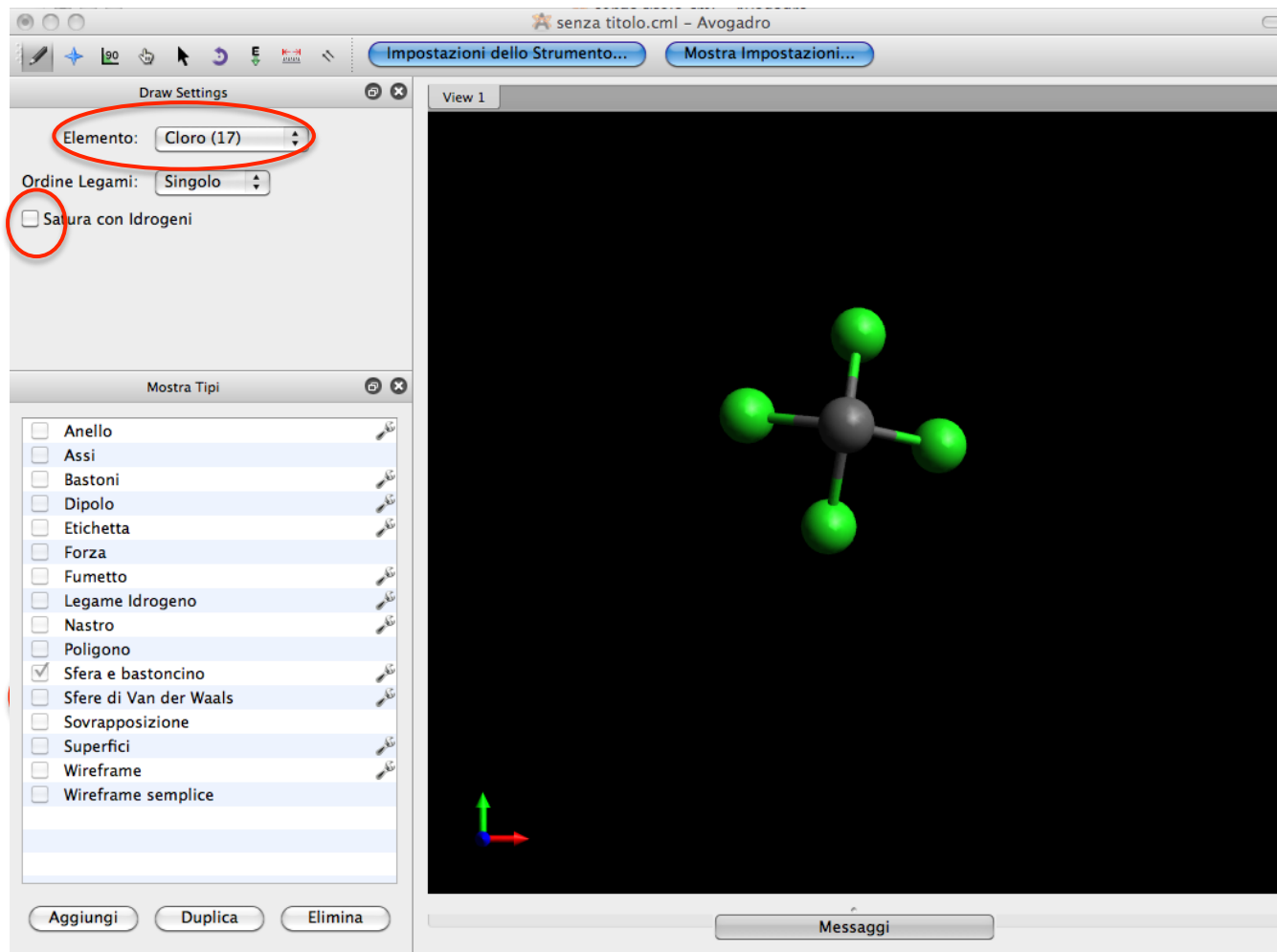
Ogni gruppo viene aggiunto con il tipo di legame che si è selezionato.

Per esempio, alla molecola precedente sono aggiunti due gruppi di atomi legati ai precedenti con doppio legame. Per fare ciò è necessario selezionare l'apposita voce dal menu «Ordine legami».



Costruire molecole con elementi differenti

Quando si vuole costruire molecole inorganiche (oppure organiche con sostituenti) è consigliabile non tenere attiva la voce «Satura con idrogeni», in questo modo infatti verrà disegnato un atomo non saturato con gli idrogeni e sarà possibile aggiungere il tipo di atomo voluto (qui, per esempio, il colore).



Sostituire un atomo

Anche dopo avere disegnato la molecola è possibile cambiare il tipo di atomo: basta selezionare il tipo di atomo che si vuole inserire e poi cliccare sull'atomo da sostituire. Qui per esempio è stato sostituito un cloro con un fluoro.

The screenshot shows the Avogadro software interface. The window title is "senza titolo.cml - Avogadro". The "Draw Settings" panel is open, and the "Elemento" dropdown menu is set to "Fluoro (9)". Below it, "Ordine Legami" is set to "Singolo" and "Satura con Idrogeni" is unchecked. The "Mostra Tipi" panel is also open, showing a list of display options with "Sfera e bastoncino" checked. The 3D view shows a molecule with a central grey atom, four green atoms, and one blue atom circled in red. A coordinate system is visible in the bottom left of the 3D view.

Avvertenze

L'obiettivo di queste istruzioni è quello di introdurre le funzioni di base del programma *Avogadro*.

Le potenzialità del programma sono molto più ampie; per queste si consiglia di ricorrere al menu «Aiuto» in cui sono presenti un tutorial e le domande frequenti (FAQ).

Avogadro è un programma free e non è realizzato da Zanichelli Editore che, esclusivamente, ne suggerisce l'uso a fini didattici.

Per malfunzionamenti o segnalazioni contattare gli sviluppatori (dal menu «Aiuto» scegliere «Segnala un bug»).