

Índice de refração
Manuel Marques

Sítios geológicos do outro mundo
Luís Vítor Duarte

Geoparque Açores
Geoparque Mundial da Unesco

REVISTA DE
CIÊNCIA ELEMENTAR

Volume 4 | Ano 2016

Números 2 e 3 | Abril a Outubro



Avogadro

Nuno Cerqueira

Departamento de Química e Bioquímica da FCUP



Avogadro

Um programa de computador para editar e visualizar moléculas.

1. Introdução

O Avogadro é um programa de computador muito versátil que permite construir, editar e visualizar moléculas em três dimensões. O programa pode ser utilizado para a compreensão de conceitos ligados à química tais como a geometria molecular, identificação dos ângulos de ligação, hibridizações, cálculo de energia e massa molecular, etc.

Este programa é compatível com vários sistemas operativos tais como o Windows, MacOS e Linux, podendo por isso

ser instalado facilmente em qualquer computador. Para além disso, o programa é de licença livre, podendo ser distribuído livremente a qualquer pessoa.

O Avogadro pode ser utilizado para editar, manipular ou visualizar vários tipos de estruturas desde compostos orgânicos, nano-tubos de carbono, pequenas enzimas, etc. Na Figura 1 estão ilustradas algumas das potencialidades visuais do programa.

Neste pequeno texto é feita uma breve abordagem sobre os principais comandos do Avogadro.

2. Funções Básicas

A interface do programa Avogadro é constituída por três secções (Figura 2). Na secção A ocorre a visualização e

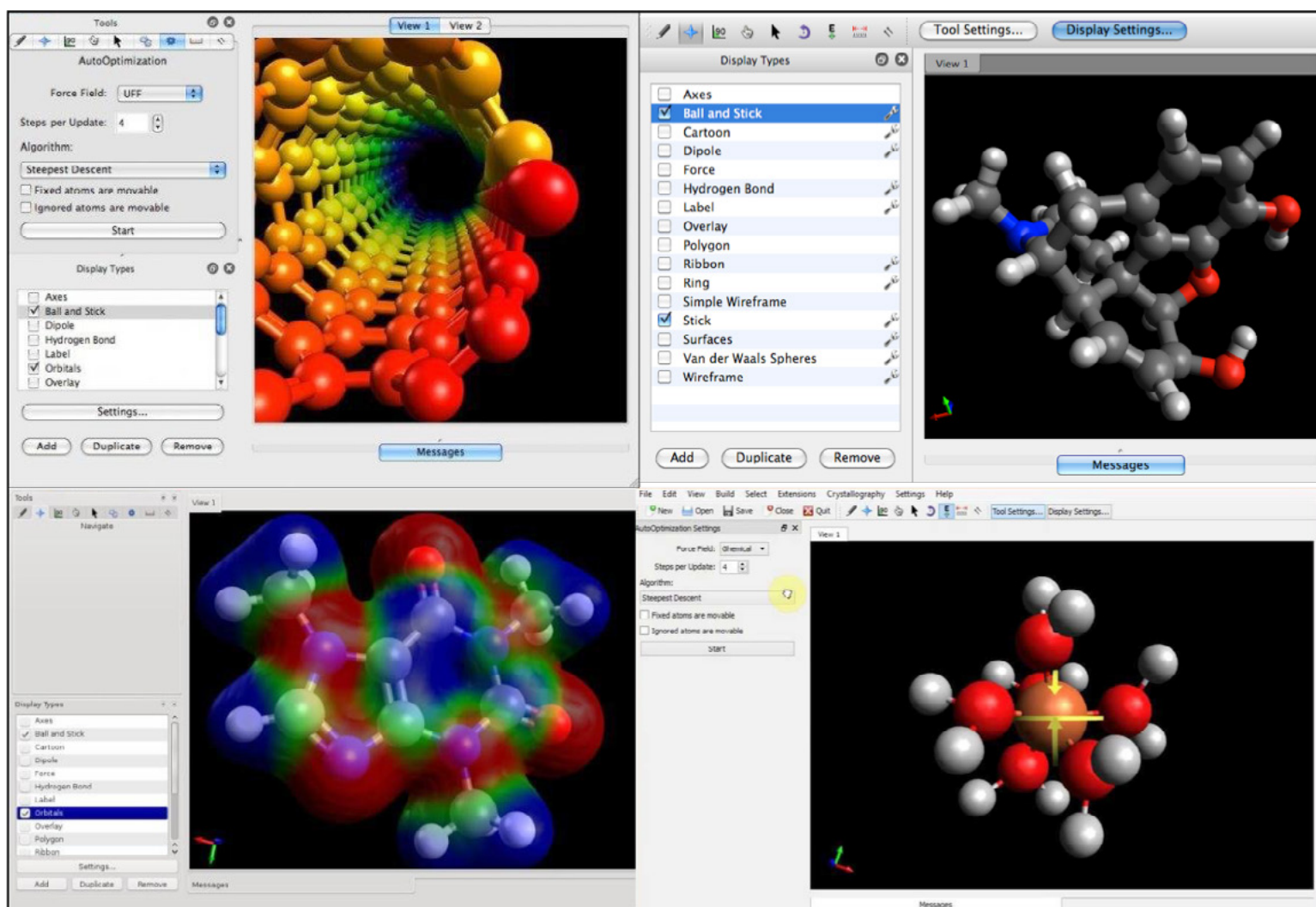


Figura 1 Alguns exemplos das potencialidades gráficas do programa Avogadro.

manipulação das moléculas. A secção B contém nove ferramentas diferentes que são utilizadas para manipular e editar as moléculas. Cada uma das ferramentas tem uma função específica no programa. Sempre que uma ferramenta da secção B é selecionada, na secção C aparecem várias opções sobre essa ferramenta.

Nas secções seguintes é feita uma breve descrição sobre algumas das ferramentas da secção B e o seu modo de utilização.

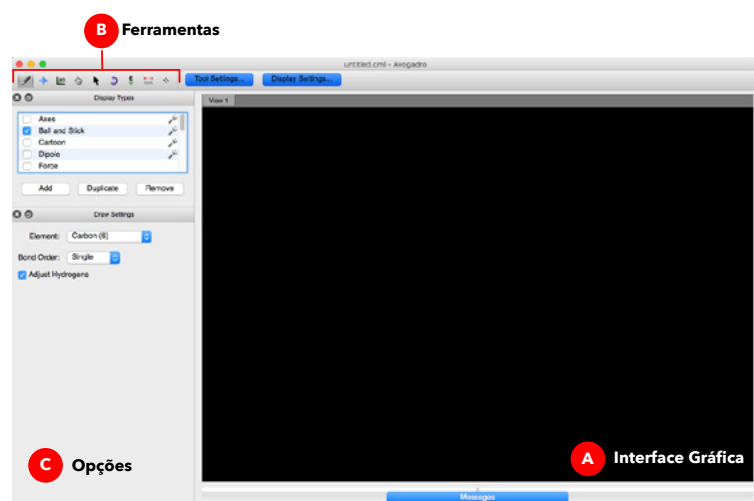


Figura 2 Vista geral do programa Avogadro.

Modo de Edição

Ao selecionar o ícone com o lápis, o Avogadro entra no seu modo de edição.

Para desenhar por exemplo um carbono, o utilizador deve carregar com o botão do lado esquerdo do rato em qualquer zona da secção A (Nota: o programa adiciona automaticamente os hidrogénio à molécula, por isso o resultado final será uma molécula de metano). Para adicionar outro átomo que esteja ligado ao átomo anterior basta carregar com o botão do lado esquerdo do rato sobre o átomo anterior e, mantendo o botão pressionado, arrastar o cursor para a posição onde se pretende colocar o novo átomo. No final obtém-se uma molécula de etano (Figura 3-A).

Para modificar a ordem da ligação entre dois átomos basta clicar com o botão do lado esquerdo do rato sob a ligação química. Dependendo do número de cliques, a ligação irá alternar entre uma ligação simples (etano), dupla (eteno) ou tripla (etino). Para adicionar outro tipo de átomo basta alterar o elemento na secção C. Na secção C também é possível alterar a representação dos átomos e das ligações químicas. Estão disponíveis vários estilos como esferas de Van der Waals, linhas (*lines*), esferas e traços (*ball and sticks*), etc.

Para remover átomos na secção A basta clicar com o botão do lado direito do rato sobre o átomo que se pretende eliminar. Caso os hidrogénios estejam a ser adicionados

automaticamente, ao remover um átomo, eles também serão eliminados.

Quando a construção da molécula estiver concluída, o passo seguinte envolve a optimização da sua geometria. Para isso basta ir ao menu Extensões e selecionar a opção Optimização de geometria. Durante este processo o Avogadro optimiza a geometria da molécula em função de uma energia que é calculada pelo programa. No final deste processo, a molécula adopta uma conformação próxima de um dos seus mínimos de energia.

Para gravar a molécula desenhada e visualizá-la mais tarde, basta ir ao menu FILE e gravar a estrutura com a opção SAVE. Existem várias formas de gravar um ficheiro contendo uma estrutura química, tais como o PDB, XYZ, MOL2, etc. É aconselhável a utilização da extensão MOL2 porque esta inclui a informação relativa à ordem das ligações químicas.



Modo de Visualização

Ao selecionar o ícone com uma estrela azul, o Avogadro entra no modo de visualização. Esta ferramenta permite mover, rodar, aproximar ou afastar a molécula do campo de visão do utilizador. Para rodar a molécula basta pressionar o botão do lado esquerdo do rato em qualquer área da secção A e mover o rato ao mesmo tempo que o botão é pressionado. Para mover a molécula deve-se repetir o mesmo procedimento anterior mas agora pressionando o botão do lado direito do rato (Figura 3-B). Para ampliar ou afastar a molécula deve-se usar o botão de *scroll* do rato.



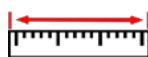
Modo de Manipulação

Ao selecionar o ícone com uma mão, o Avogadro entra no modo de manipulação.

Esta ferramenta é usada para alterar a posição de um determinado átomo na molécula. Isto poder ser útil, por exemplo, para alterar a conformação de um grupo de átomos.

Para alterar a posição de um átomo basta clicar com o botão do lado esquerdo do rato sobre o átomo que se pretende manipular na secção A. Depois mantém-se pressionado o mesmo botão do rato ao mesmo tempo que se arrasta o átomo para a nova posição. A nova posição do átomo será definida quando se largar o botão do lado esquerdo do rato (Figura 3-Cs).

Depois de se manipular os átomos pretendidos deve-se voltar a otimizar a geometria da molécula.



Modo de Análise

Ao selecionar o ícone com uma régua, o Avogadro entra no modo de análise, onde é possível determinar comprimentos de ligação, ângulos e diedros.

Para calcular a distância entre dois átomos basta selecionar os átomos na secção A com o botão do lado esquerdo do

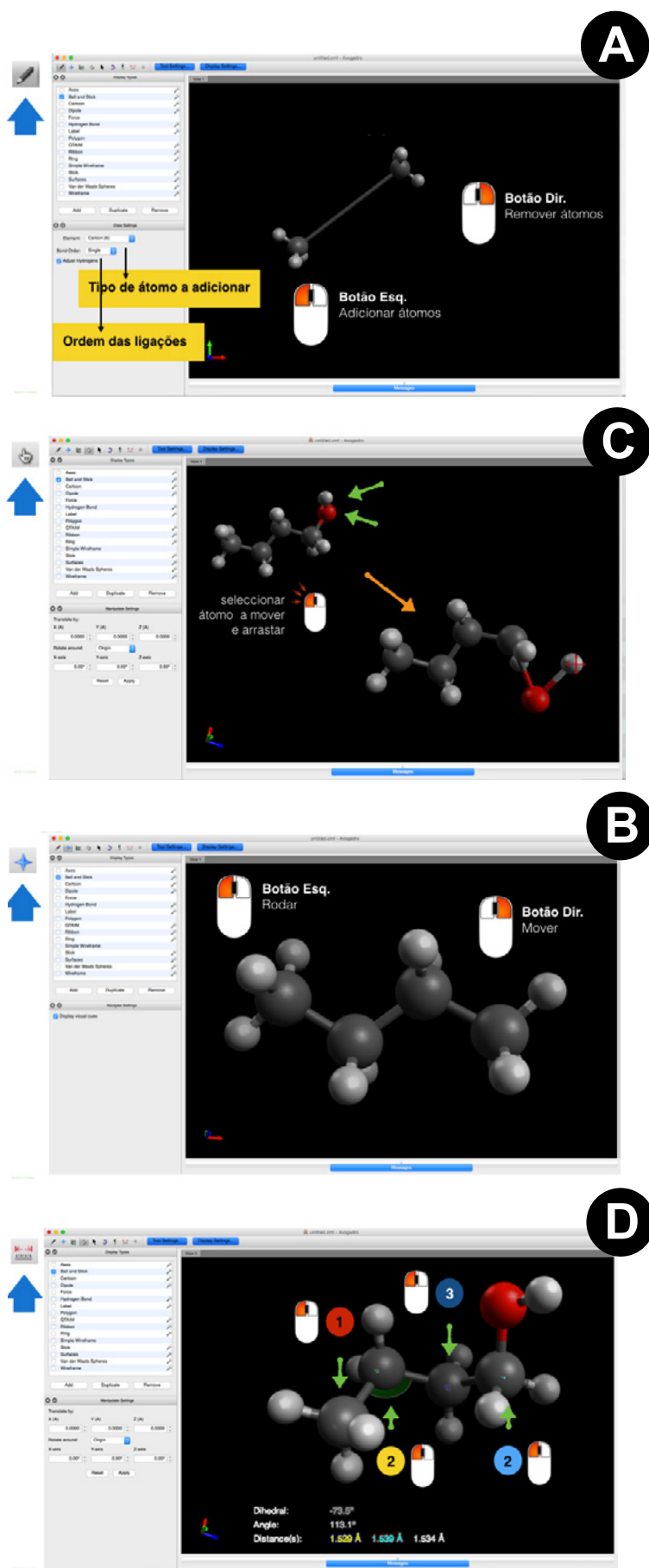


Figura 3 Manipulação de moléculas no Avogadro. A – Adicionar e remover átomos. B – Rodar e mover a molécula na interface gráfica. C - Modificação da posição dos átomos. D- Calcular comprimentos de ligação, ângulos e diedros.

rato. O comprimento da ligação calculado irá aparecer no canto inferior esquerdo da secção A.

Para determinar os ângulos e diedros, o mesmo procedimento deverá ser utilizado, mas agora selecionado três e quatro átomos respectivamente. A informação dos ângulos e diedros é apresentada no canto inferior esquerdo da secção A (Figura 3-D).

Modo de Apresentação

Ao seleccionar o ícone com uma seta em semi-círculo, o Avogadro entra no modo de apresentação. Esta opção permite rodar da molécula representada na secção A de forma automática. Para iniciar o modo de apresentação o utilizador deve seleccionar o grau de rotação em cada um dos seus eixos e pressionar o botão START da secção C. Para parar o modo de apresentação o utilizador deve pressionar o botão STOP.

3. Conclusão

O programa Avogadro permite aos seus utilizadores ter um contacto mais estreito com as moléculas. A sua utilização pode ser utilizada para ultrapassar dificuldades de abstracção e visualização que são normalmente acompanhadas durante a aprendizagem deste tipo de conteúdos no ensino da química.

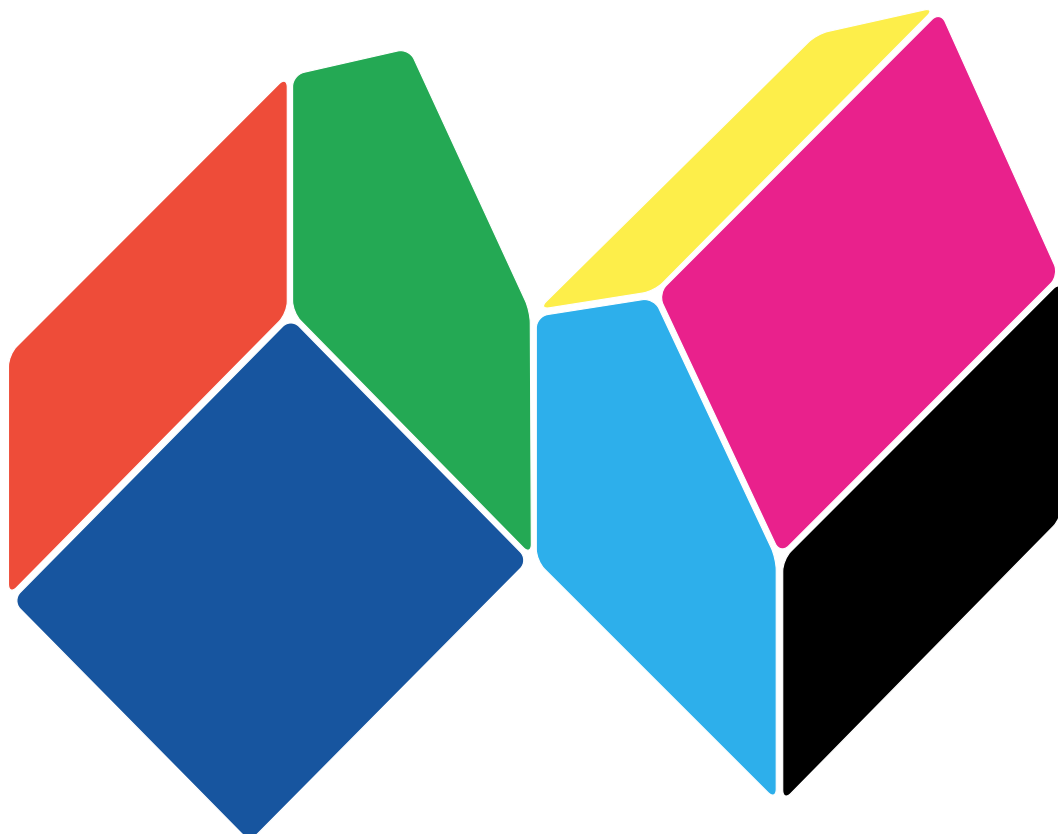
Uma vez dominadas as funções básicas do programa, este poderá ser utilizado para visualizar e editar vários tipos de moléculas. Algumas bases de dados estão disponíveis na internet como por exemplo: <http://www.chemspider.com>.

Este software pode ser descarregado a partir de:

http://avogadro.cc/wiki/Main_Page

Nuno Cerqueira

Departamento de Química e Bioquímica
Faculdade de Ciências da Universidade do Porto



Casa das Ciências

RECURSOS DIGITAIS PARA PROFESSORES