

Avogadro

Istruzioni per l'uso

INDICE

DA DOVE INIZIARE	2
Aprire un file	3
Come muovere e ruotare la molecola	4
Come ottimizzare la molecola	5
COME DISEGNARE UNA MOLECOLA	7
Disegni	8
Eliminare	8
Costruire molecole complesse	8
Ottimizzare la geometria: i campi di forza	9
Organizzare le molecole desiderate	10
Undo/Redo	11
Salvare le molecole	12
COME VISUALIZZARE LE MOLECOLE	12
Come iniziare	12
Selezionare e visualizzare i residui	15
Riconoscere il nome dei residui	15
Altre visualizzazioni	17
INSERIRE UN PEPTIDE	18

AVOGADRO: DISEGNARE LE MOLECOLE IN 3D

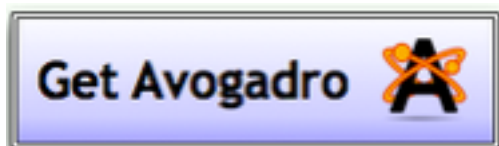
Avogadro è un programma *open source* per la modellazione molecolare. Questo software permette di disegnare le molecole, da quelle semplici come l'acqua a quelle più complesse come una doppia elica di DNA, e di visualizzarle in vari modi.

[**NOTA** Il programma **Avogadro** è stato creato da un team internazionale. Per ulteriori informazioni: "Avogadro: An Advanced Semantic Chemical Editor, Visualization, and Analysis Platform." *J. Cheminf.* 2012 4:17.]

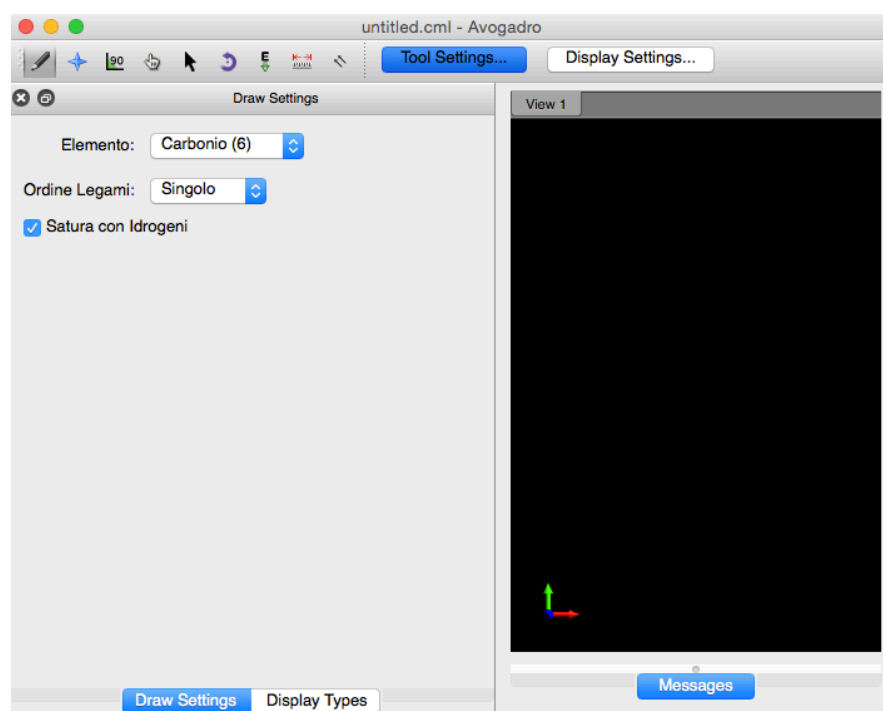
DA DOVE INIZIARE

Alla pagina <https://avogadro.cc/> selezionate dalla barra in alto **Download** e scaricate il programma a seconda del vostro programma operativo.

[**NOTA** La presente guida si riferisce all'uso del programma per MacOS, ma l'interfaccia del programma dovrebbe essere simile anche per altri sistemi operativi.]



Dopo aver installato il programma, alla prima apertura vedrete una schermata come questa:

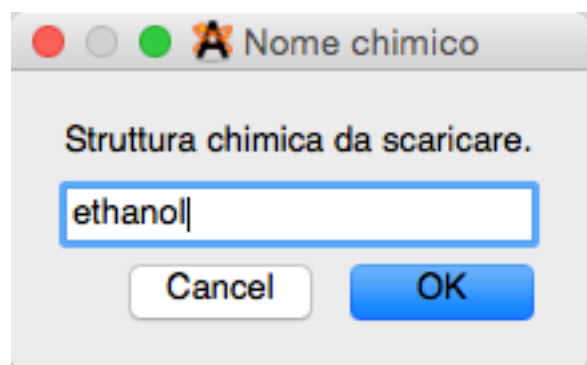
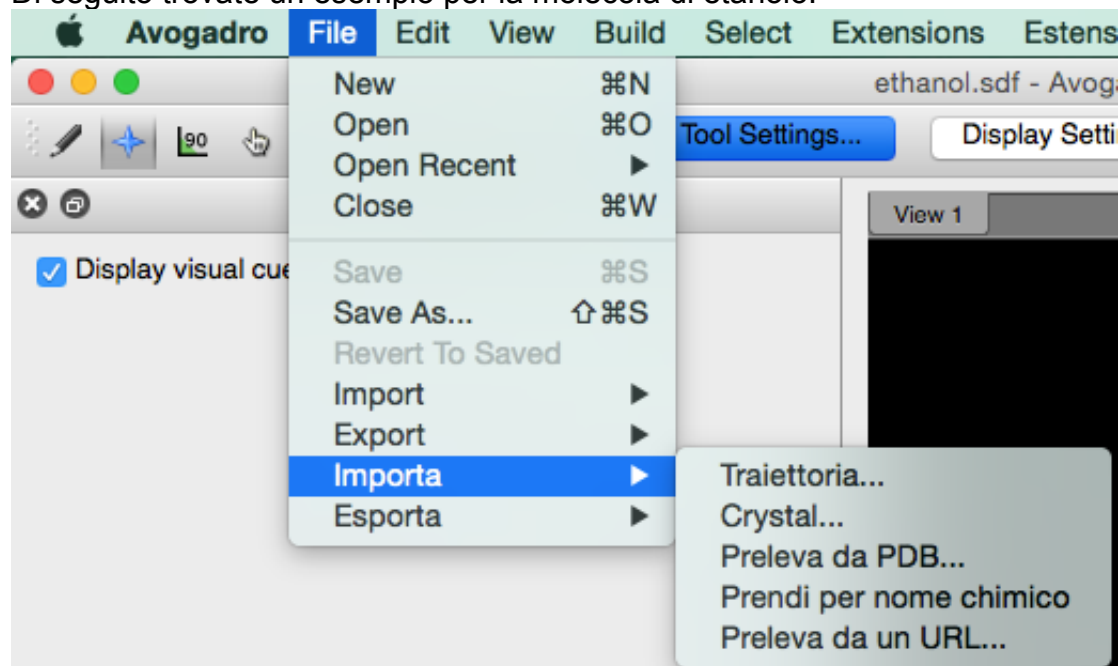


Aprire un file

Per aprire un file e navigare tra le molecole selezionate dal menu **File > Apri**. Potete selezionare una molecola dal vostro computer. Avogadro può leggere diverse estensioni, compresa CML, xyz, PDB ecc. e sono supportati diversi esempi di molecole.

Potete fare una ricerca tra diverse molecole già disponibili dal menu **File > Importa > Prendi per nome chimico**. Inserite nella finestra “Struttura chimica da scaricare” il nome inglese della molecola che desiderate.

Di seguito trovate un esempio per la molecola di etanolo.



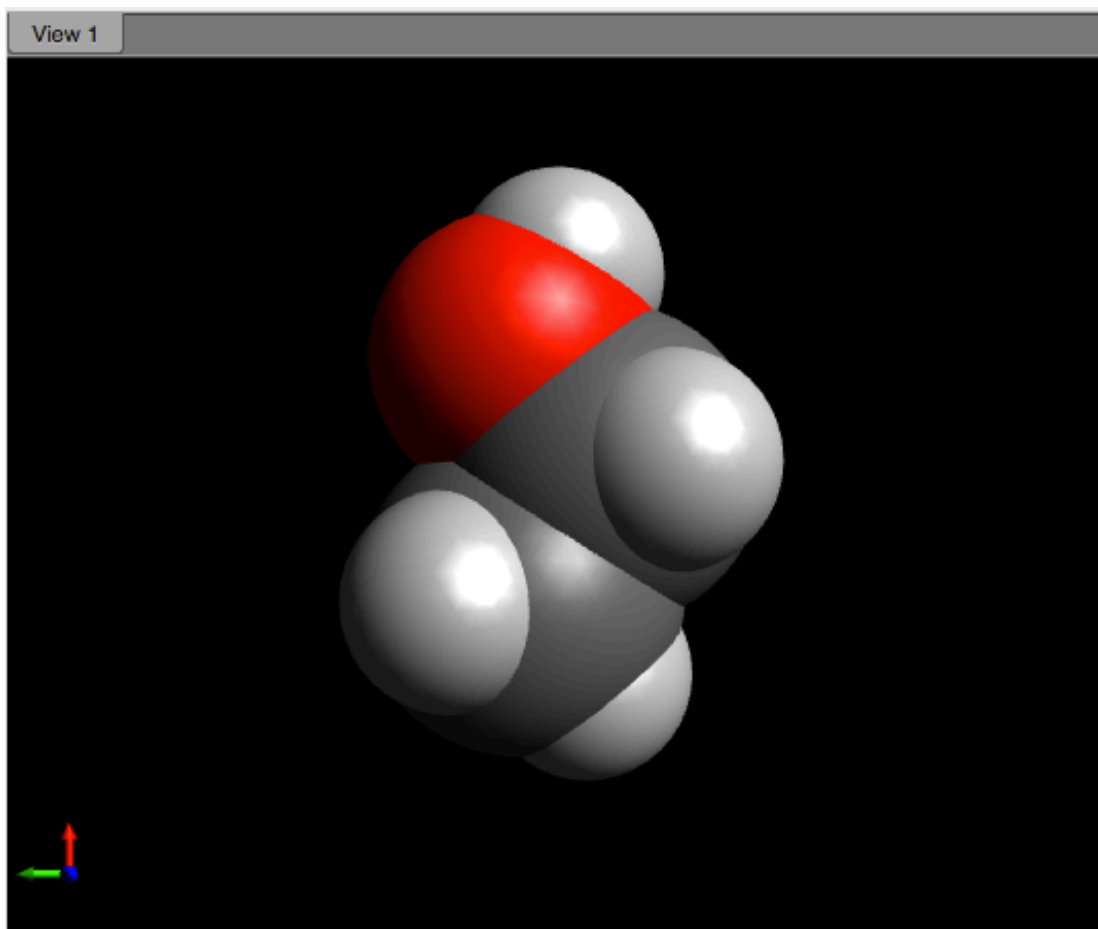


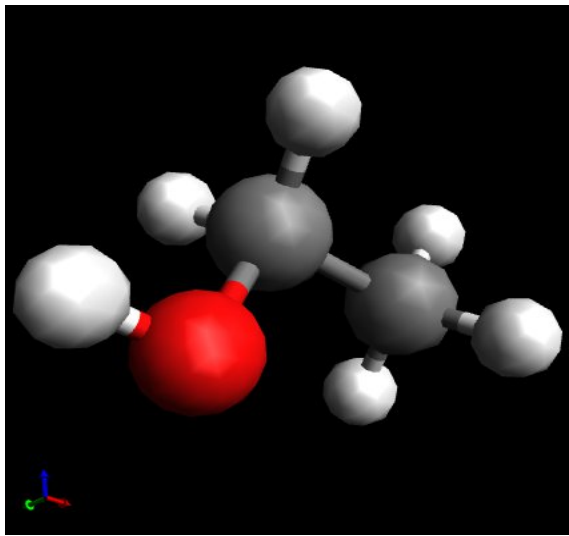
Figura 1 Modello molecolare dell'etanolo.

La **Figura 1** mostra il file ethanol.cml visualizzato con l'opzione *bastoni*. Fate attenzione: quando un nuovo file è aperto, Avogadro si sposta dalla finestra **Disegna** a quella **Naviga**.

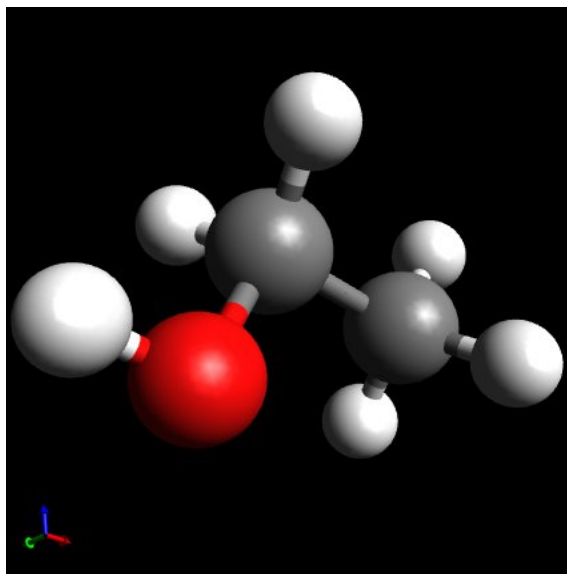
Come muovere e ruotare la molecola

Potete ingrandire e rimpicciolire la molecola utilizzando il mouse o il trackpad. Per ruotare la molecola, tenete premuto il tasto sinistro e muovete contemporaneamente il cursore. Potete anche traslare la molecola tenendo premuto il tasto destro del mouse e muovendo contemporaneamente il cursore.

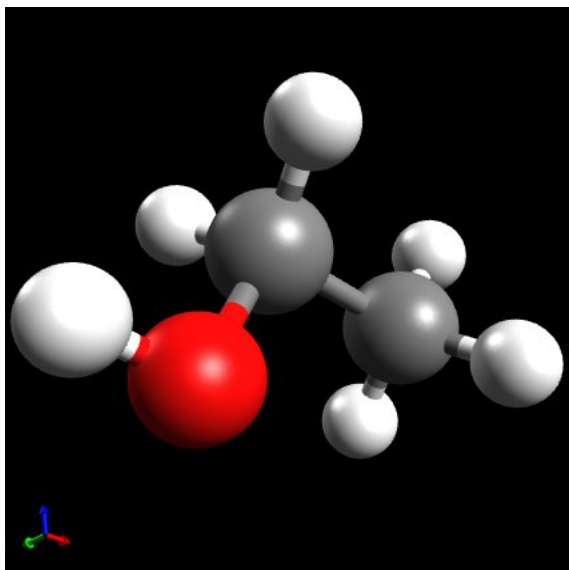
Come ottimizzare la molecola



A



B

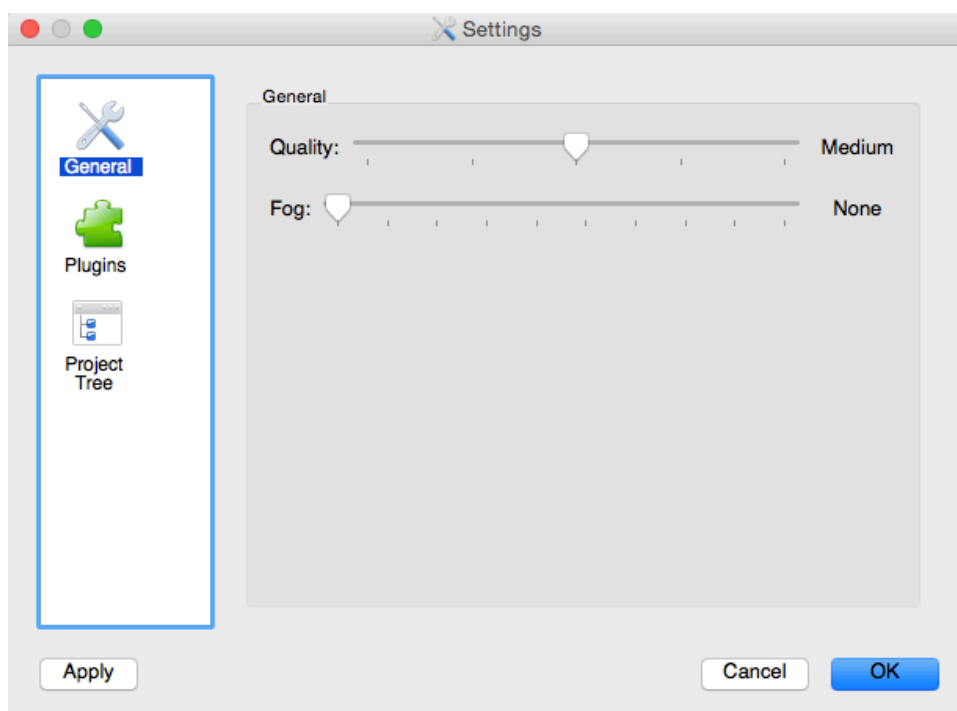


C

Figura 2 (A) Immagine della molecola in bassa qualità. (B) Immagine a qualità media. (C) Immagine della molecola ottimizzata usando i settaggi di qualità più alta.

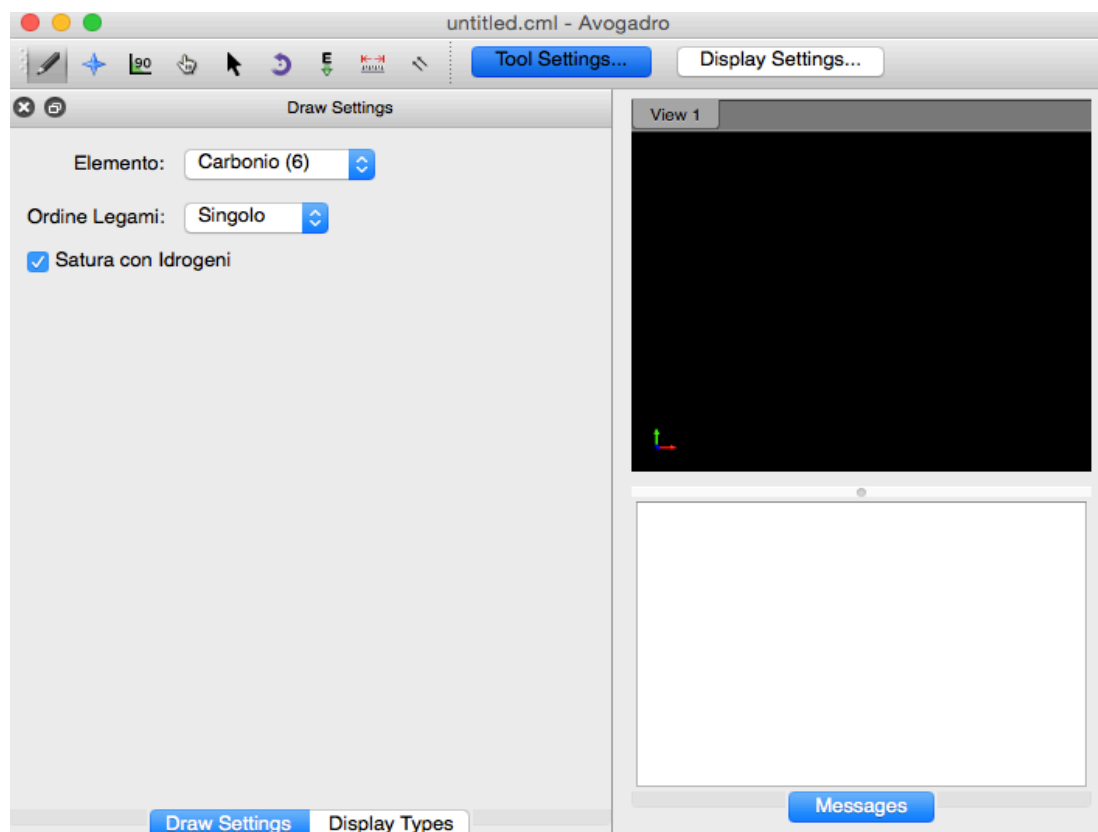
Le immagini della **Figura 2** sono prodotte esportando la molecole dal menu **File > Export > Export Graphics**.

La qualità del rendering può essere regolata dal menu selezionando **Configura Avogadro**. Il cursore ha cinque livelli di qualità. Se la qualità aumenta anche la qualità generale di tutti rendering è incrementata.

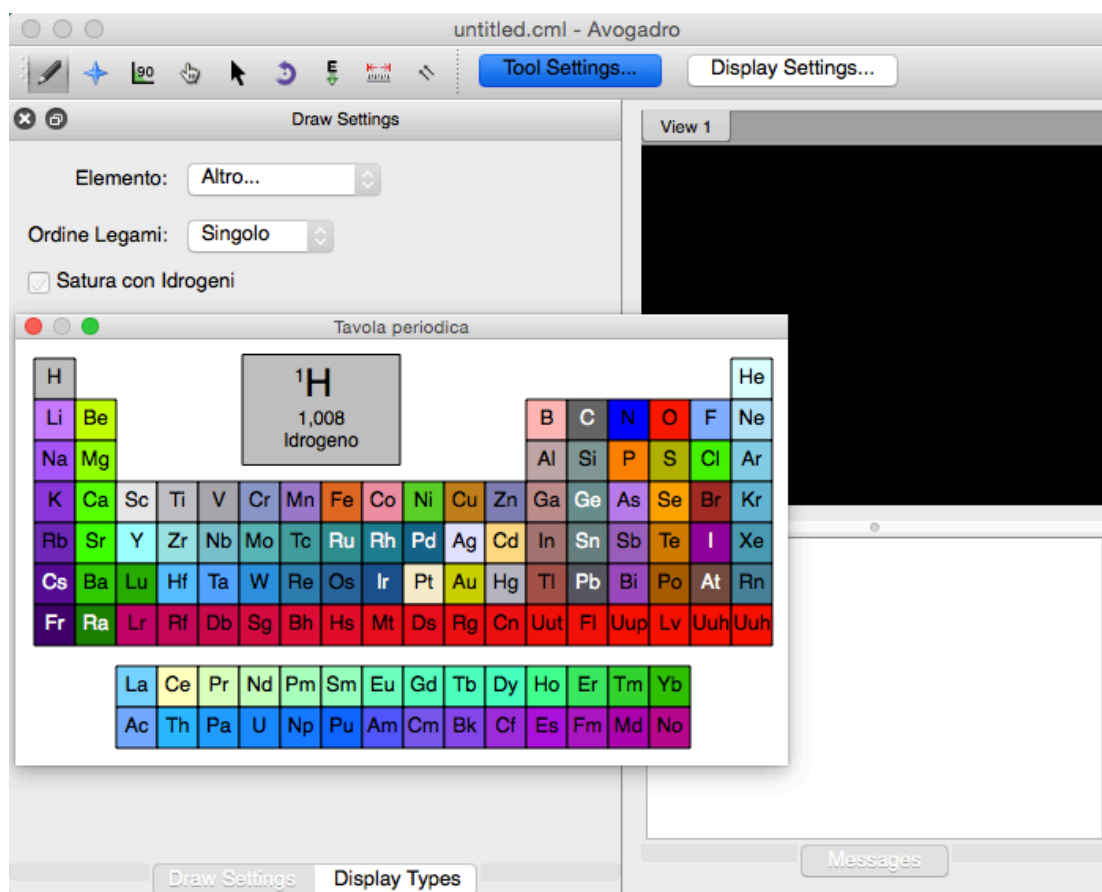


COME DISEGNARE UNA MOLECOLA

Per disegnare una nuova molecola potete utilizzare lo strumento **Disegno** (F8) che si trova nella parte in alto a sinistra con l'icona indicata con la matita.



Potete scegliere gli elementi che desiderate dal menu a tendina alla voce **Elemento** che riporta la scritta “Carbonio (6)”. Gli altri elementi non elencati sono alla voce “Altro” che rimanda alla tavola periodica. Quest’ultima si apre in una finestra a parte.



Se selezionate un singolo elemento, troverete riportati maggiori dettagli nel riquadro centrale in alto (H, nello screenshot). Cliccando sull'elemento lo si sceglie e si chiude la tavola periodica.

Disegni

Dopo aver selezionato un elemento, potete visualizzarlo cliccando con il tasto sinistro del mouse nel pannello nero che si trova a destra. A ogni click si aggiungono atomi dell'elemento selezionato. Se l'opzione "Satura con idrogeni" è attiva, verranno aggiunti in numero proporzionale idrogeni alla molecola selezionata. Eliminando il segno di spunta dal riquadro, gli atomi di idrogeno non verranno aggiunti.

Eliminare

Se avete fatto un errore, o volete cancellare un atomo specifico, potete cliccare su di esso con il tasto destro del mouse e cancellarlo. Attenzione: se la spunta "Satura con idrogeni" è attiva, non potete cancellare gli idrogeni aggiunti poiché gli idrogeni sono aggiunti automaticamente.

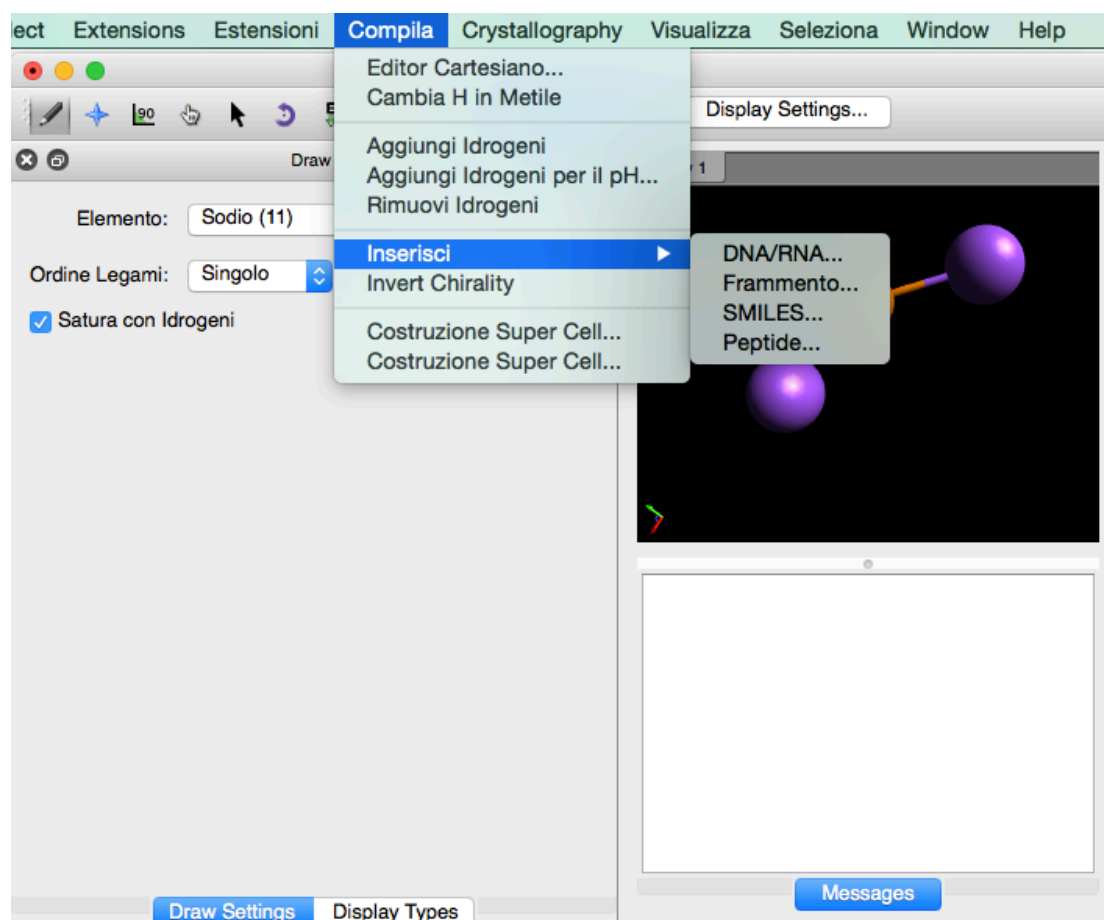
Costruire molecole complesse

Per costruire una molecola più complessa cliccate con il tasto destro su una molecola preesistente e tenendo premuto il tasto trascinatela in un punto distante; in questo modo si formerà un legame tra i due atomi. Potete

scegliere il tipo di legame (singolo, doppio, triplo) dal menu a tendina alla voce "Ordine legami".


Se volete cambiare un atomo esistente, basta selezionare l'elemento desiderato e cliccare sull'atomo esistente. Con la spunta "Satura con idrogeni" attiva potete costruire facilmente diverse molecole complesse.

Inoltre, nella sezione **Compila > Inserisci > Frammenti** è presente una lista di molecole già fatte che è possibile scegliere e inserirle nella vostra molecola.



Ottimizzare la geometria: i campi di forza

Avogadro ha tre campi di forza disponibili per ottimizzare la struttura della molecola disegnata.

L'icona 

apre il menu **AutoOptimization Settings** e consente di selezionare il campo di forza desiderato. Premendo "Start" la molecola viene ottimizzata in modo automatico.

Per un buon risultato dovete selezionare il corretto campo di forza. Utilizzate di default MMFF94 che può essere impiegata per la maggior parte delle molecole organiche. Se avete metalli di transizione, si consiglia di scegliere UFF. Potete modificare i campi di forza da:

Estensioni > Meccanica molecolare > Definisci il campo di forza

In generale, semplicemente cliccando su:

Extensions > Ottimizza la geometria ottenete già una molecola ragionevolmente ottimizzata.

Organizzare le molecole desiderate

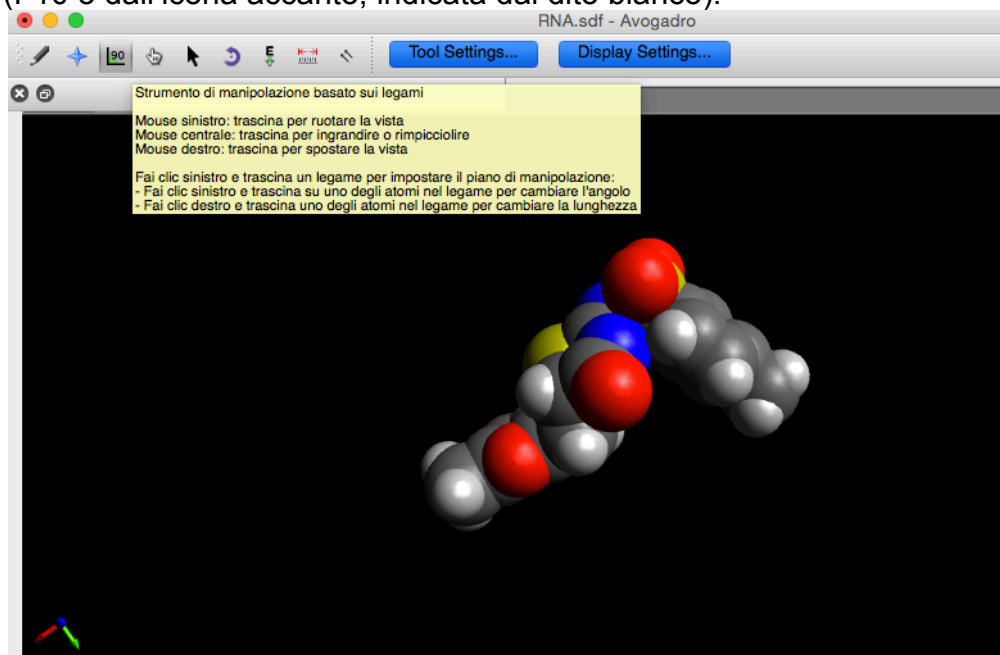
Non sempre i primi tentativi sono soddisfacenti o forse l'ottimizzazione della geometria non ha restituito la molecola desiderata. Avogadro ha due strumenti che aiutano a organizzare al meglio le molecole che avete disegnato. Lo strumento di manipolazione basato sui legami

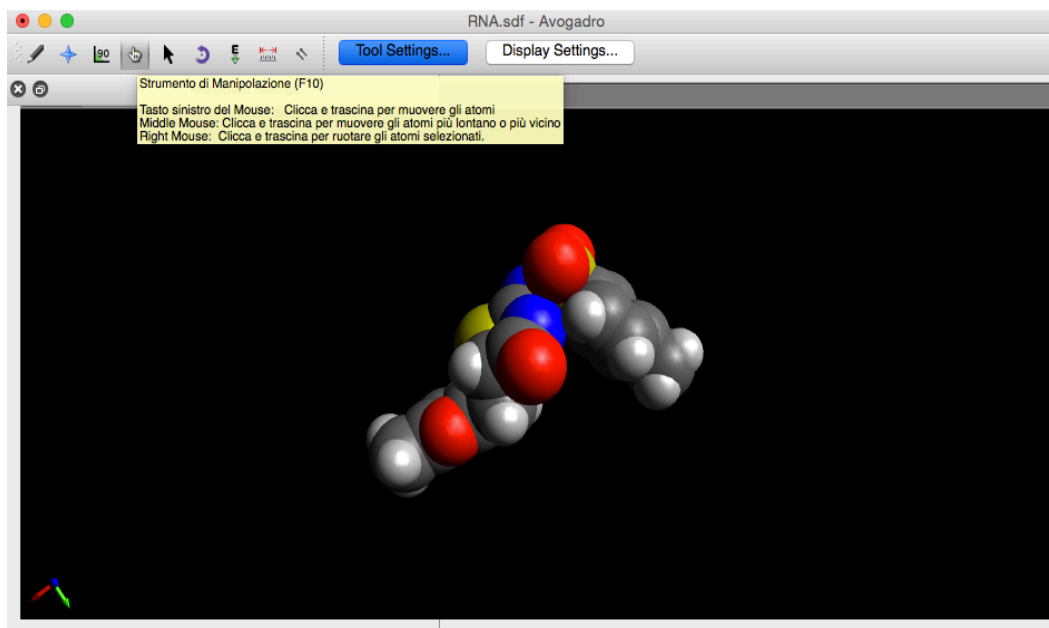


(che si apre dall'icona indicata con l'angolo di 90°
e lo strumento di manipolazione



(F10 o dall'icona accanto, indicata dal dito bianco).





Diversi strumenti funzionano sia cliccando sull'atomo sia sulla selezione fatta sugli atomi. La funzione "Selezione" consente di selezionarli e lavorare su di essi. Per esempio un gruppo di cinque atomi possono essere scelti dallo strumento

Selezione 

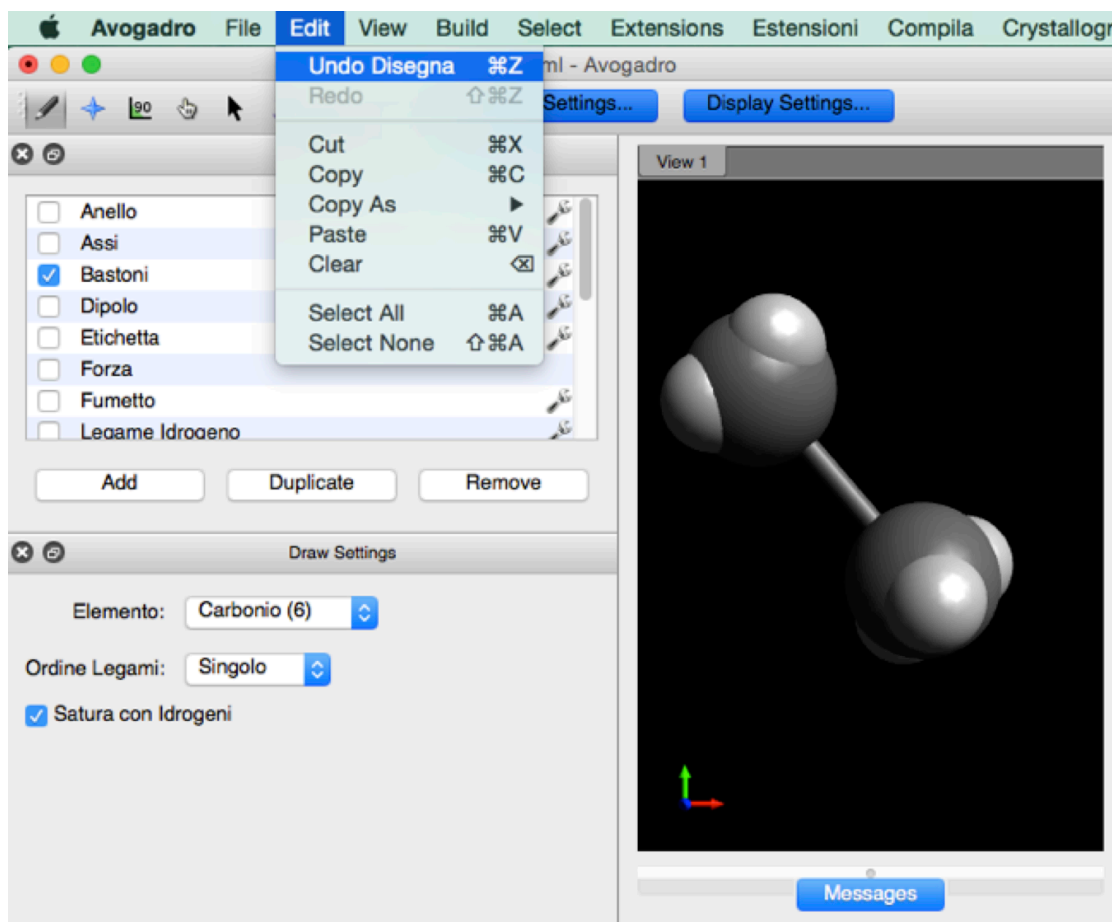
(F11 o indicato con la freccia nera) e poi modificarlo con lo strumento di manipolazione (F10)



e con il tasto sinistro selezionate la molecola e muovete il mouse fino a ottenere la configurazione desiderata.

Undo/Redo

Avogadro possiede la funzione *undo/redo*. Tutte le operazioni possono essere cancellate e ripetute usando nel menu **Edit** la funzione indicata dedicata. Se avete fatto un errore, selezionate **Edit > Undo** (o Ctrl+Z).



Salvare le molecole

Quando avete ottenuto la molecola desiderata potete salvarla da **File > Salva dal menu**. Potete scegliere tra una vasta gamma di estensioni. Se non scegliete l'estensione, Avogadro salverà la molecola in automatico con l'estensione CML.

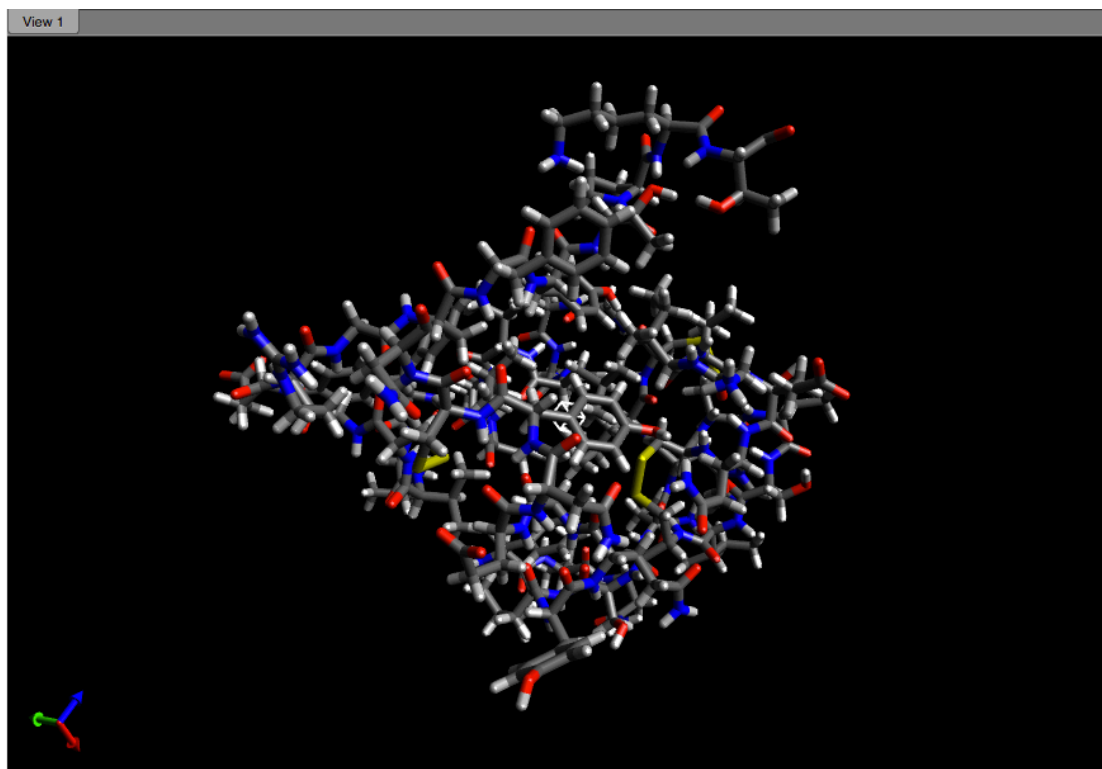
COME VISUALIZZARE LE MOLECOLE

Con Avogadro si possono visualizzare le molecole in diverse modalità scegliendo tra il *modello a bastoni*, *a sfere e bastoncini*, le *sfere di Van der Waals* e *wireframe*. Le molecole più complesse hanno anche l'opzione "Fumetto e Nastro".

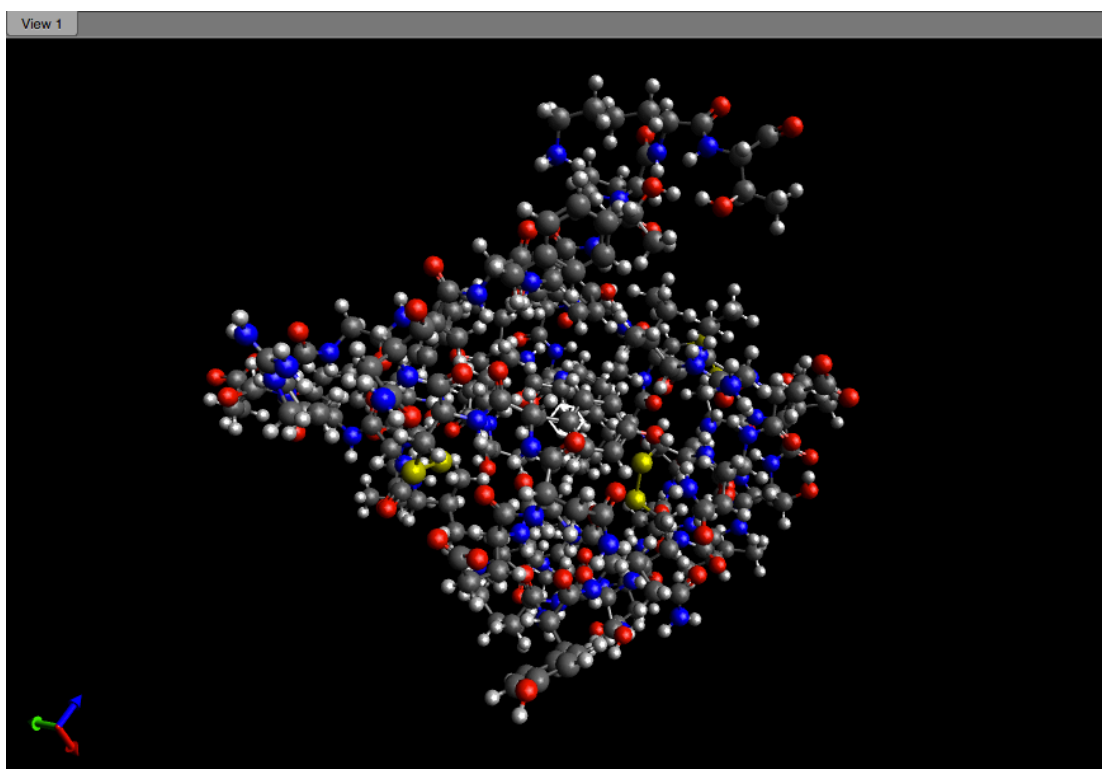
Come iniziare

Per visualizzare una molecola di insulina umana per prima cosa scaricate la molecola (1hiu.pdb da wbiomed.curtin.edu.au/biochem/tutorials/pdb/1hiu.pdb)

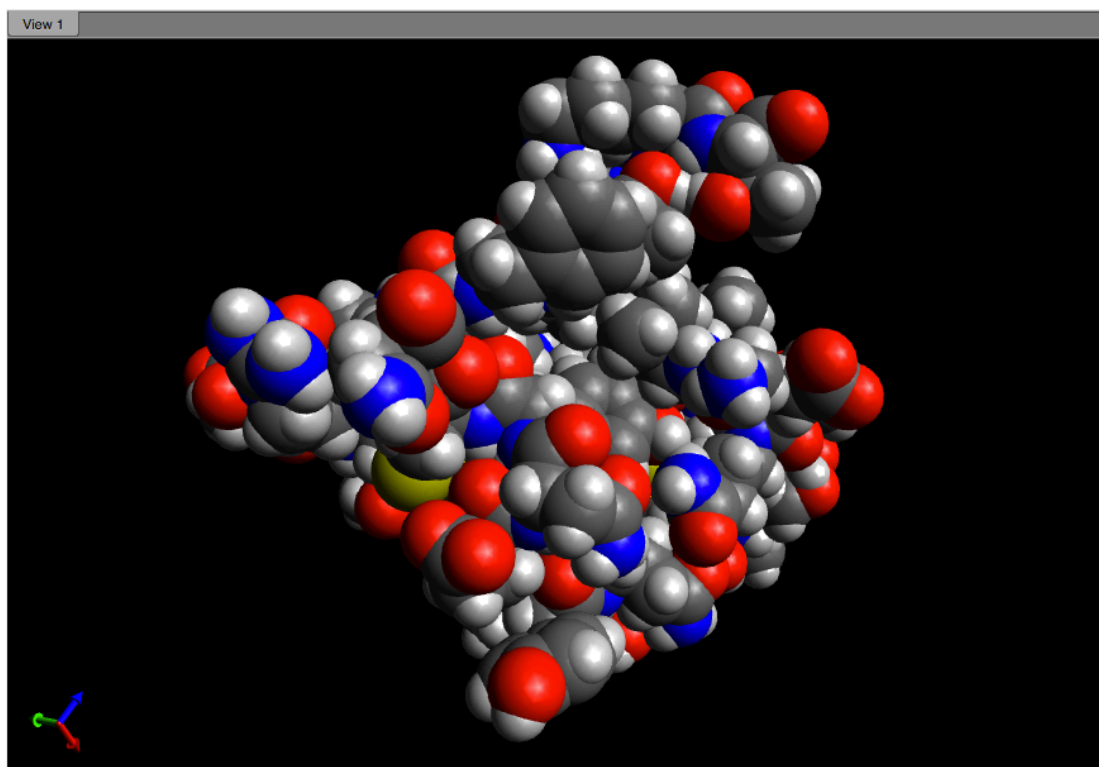
La molecola apparirà nel pannello visualizzata a seconda della spunta che avete attivato nella sezione "Display types", per esempio "Bastoni", "Sfere e bastoncino" o "Sfere di Van der Waals" (**Figura 3**).



A



B

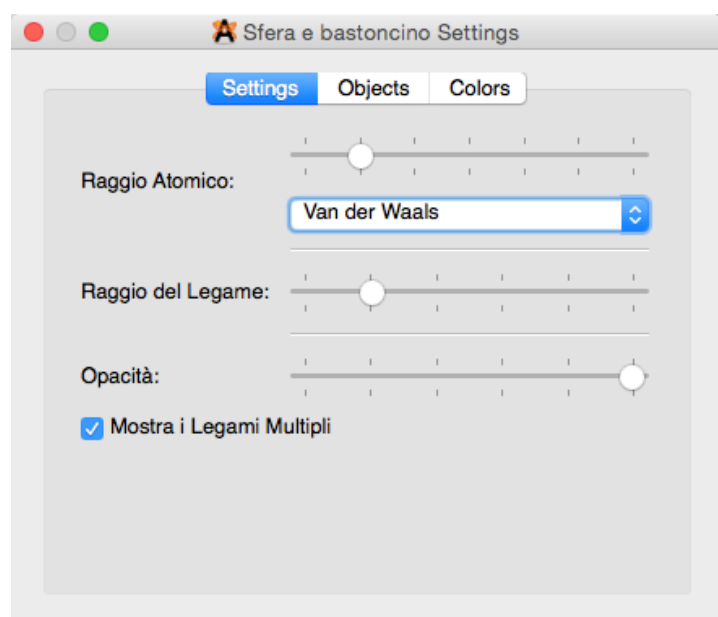


C

Figura 3 Attivando la spunta “Bastoni” otterrete **(A)**, se attivate la spunta “Sfere e bastoncino” otterrete **(B)**, attivando la spunta “Sfere di Van der Waals” otterrete **(C)**.

Selezionando la **Chiave inglese** accanto a ogni tipologia di visualizzazione, potete regolare:

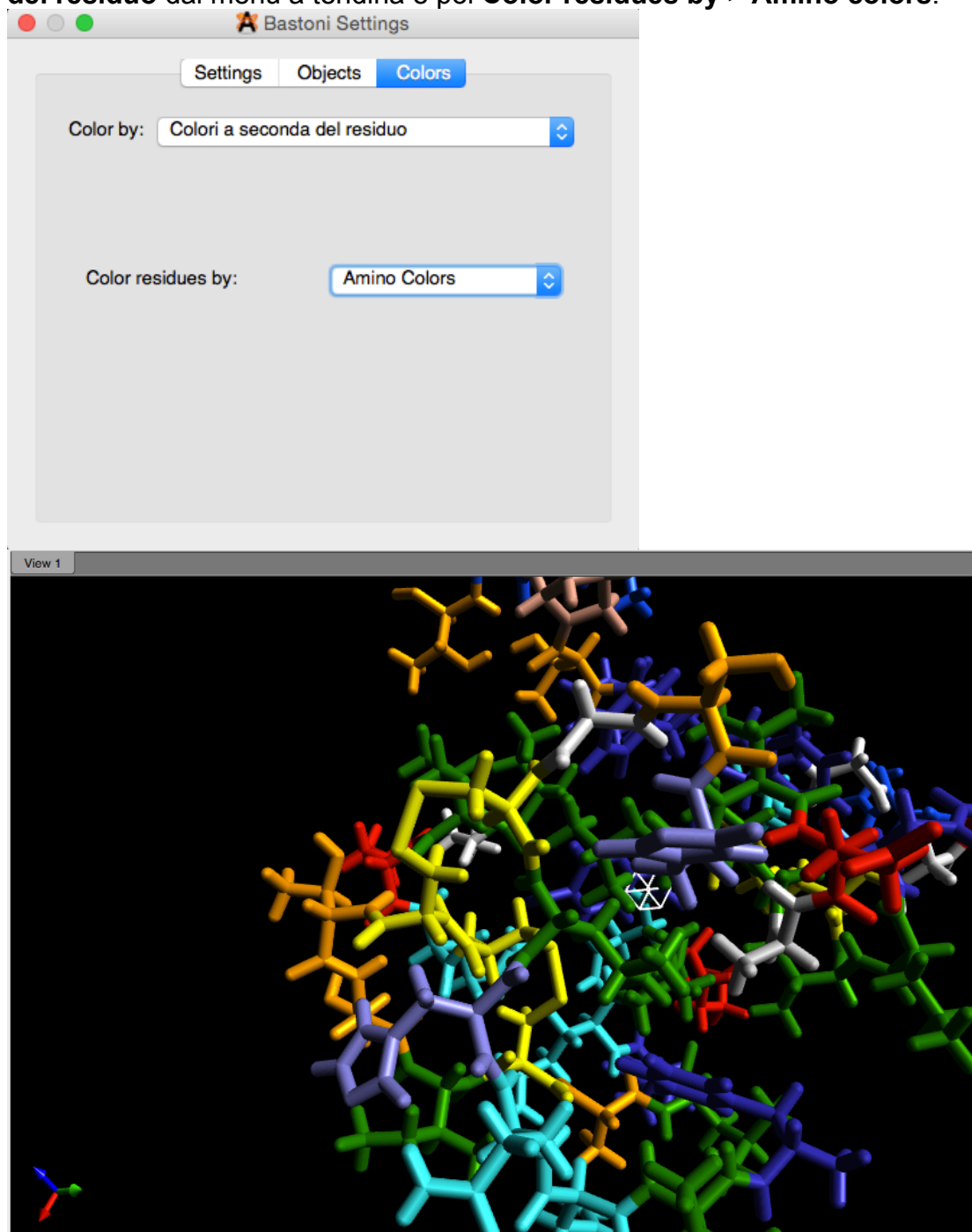
- il raggio atomico;
- il raggio del legame;
- l’opacità (molto utile per visualizzare parti di molecole che si trovano su piani differenti);
- la visualizzazione (o meno) di legami multipli.



Selezionare e visualizzare i residui

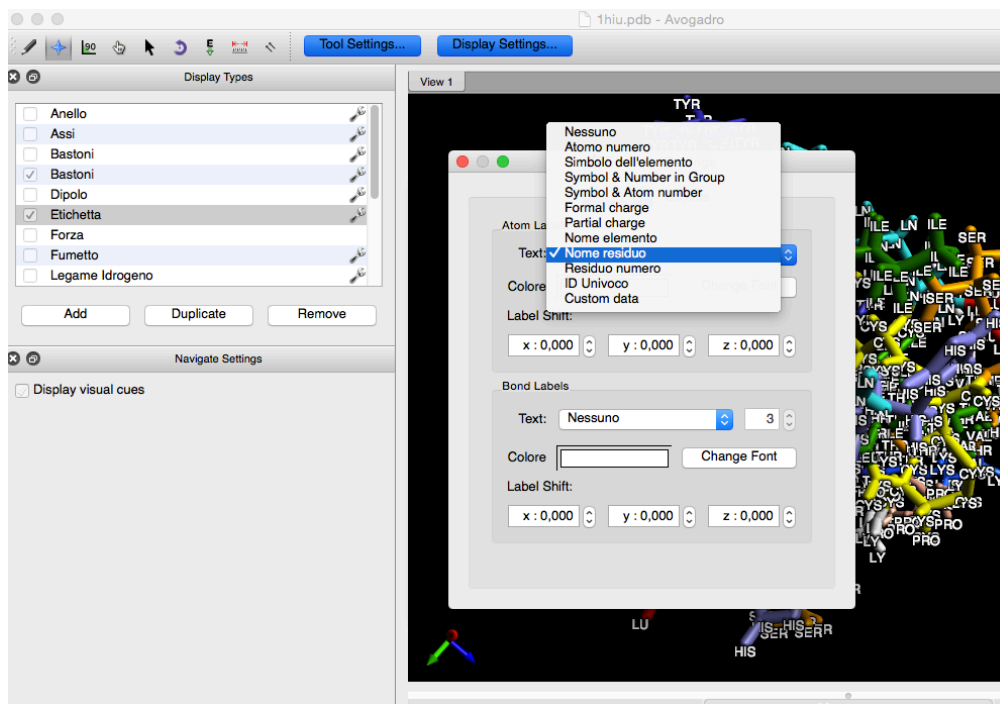
Per visualizzare i residui nelle proteine o negli amminoacidi selezionate la spunta “Bastoni” e deselectionate “Sfere e bastoncini”.

Apri il menu **Settings** e selezionate nel pannello **Colori > Colori a seconda del residuo** dal menu a tendina e poi **Color residues by > Amino colors**.

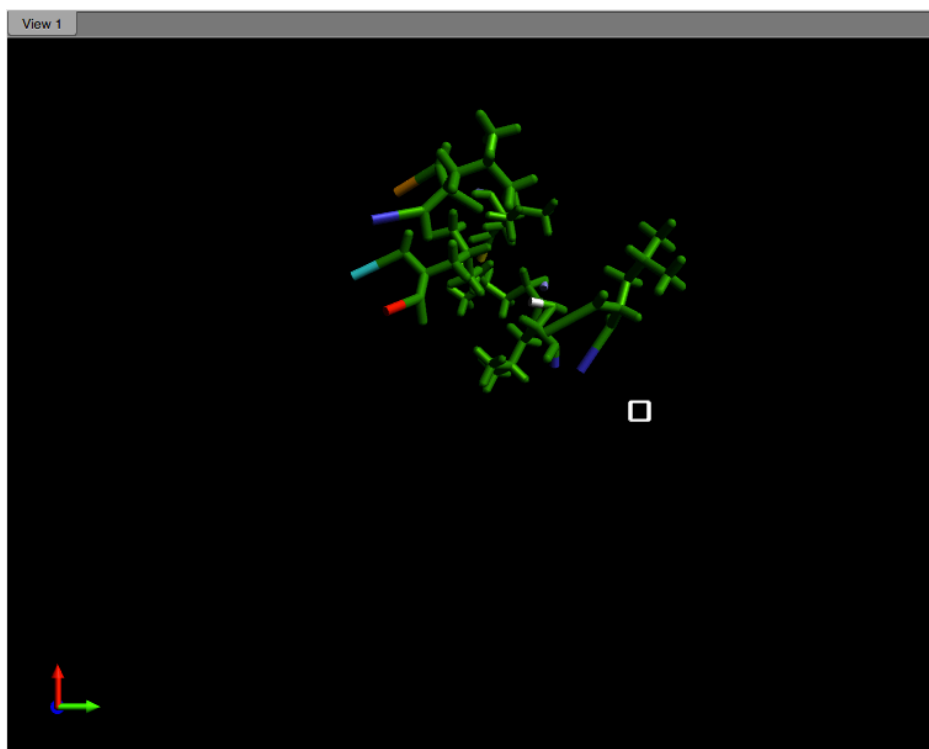


Riconoscere il nome dei residui

Per riconoscere il nome dei residui, potete visualizzare le etichette selezionando la spunta **Etichette** dal menu display e, dalla chiave inglese, “Nome del residuo”.



Per visualizzare un solo residuo e identificare la sua posizione nella catena polipeptidica selezionate uno specifico amminoacido, per esempio la leucina (LEU). Dal menu selezione scegliete “Seleziona il residuo”, scrivete LEU e poi OK. Nel pannello **Oggetto** scegliete “Mostra solo i residui selezionati”. Come risultato ottenete le sei leucine residue.

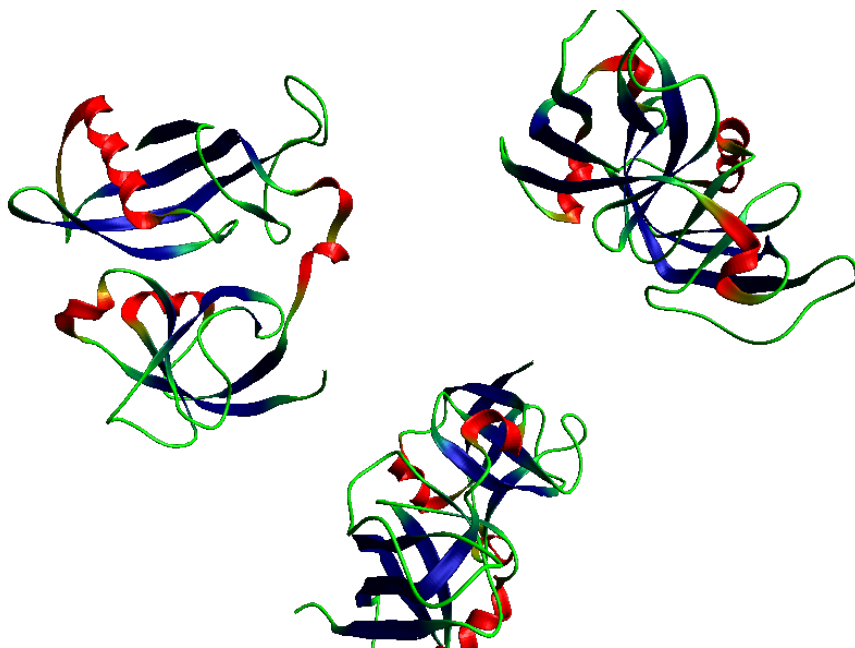


Altre visualizzazioni

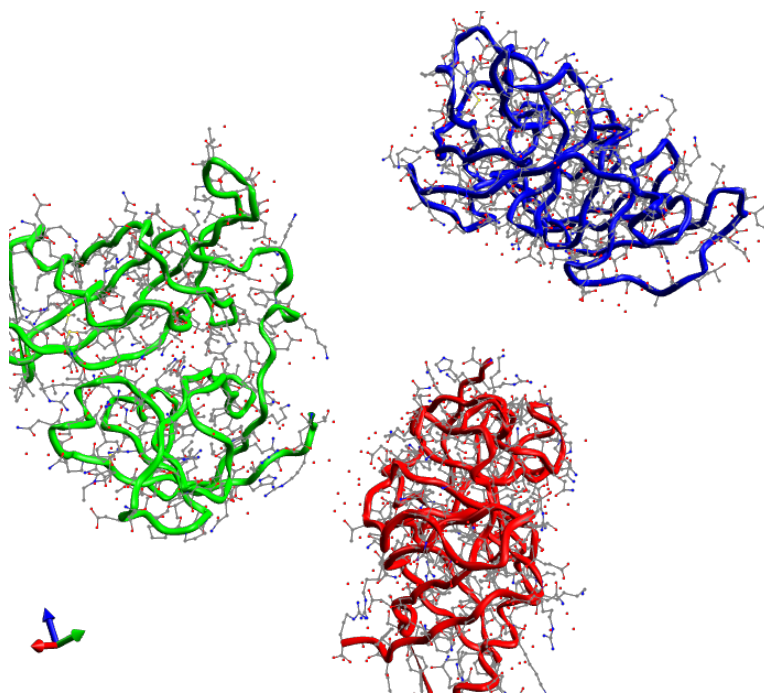
Potete anche visualizzare le molecole con la spunta “Fumetto o Nastro” per le molecole più complesse.

[**NOTA** In queste visualizzazioni lo sfondo è stato modificato dal menu **View > Set background color** per una maggior chiarezza espositiva.]

Visualizzazione a fumetto:

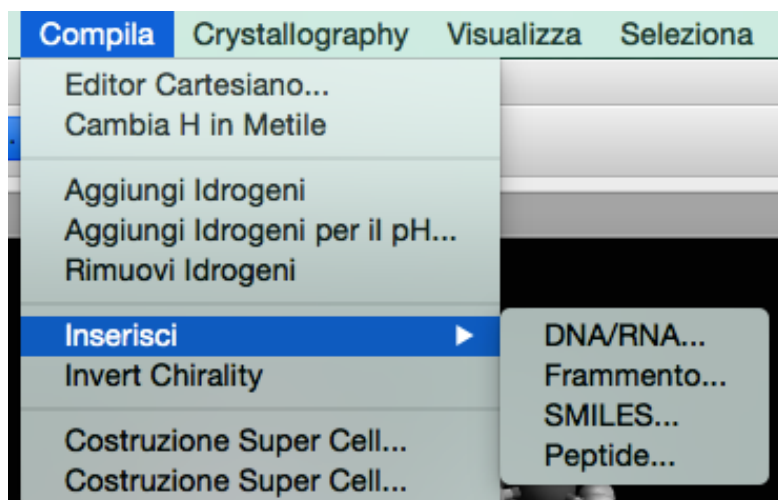


La visualizzazione a nastro evidenzia lo scheletro delle proteine. Le catene separate hanno un unico colore.

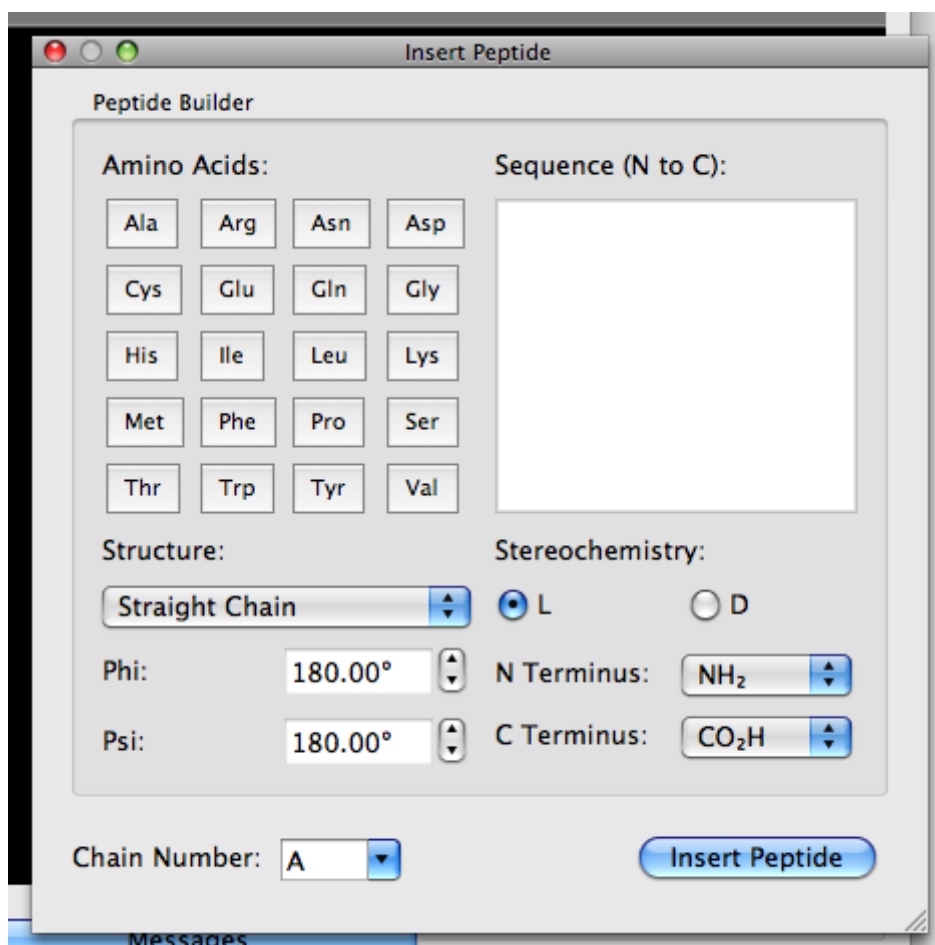


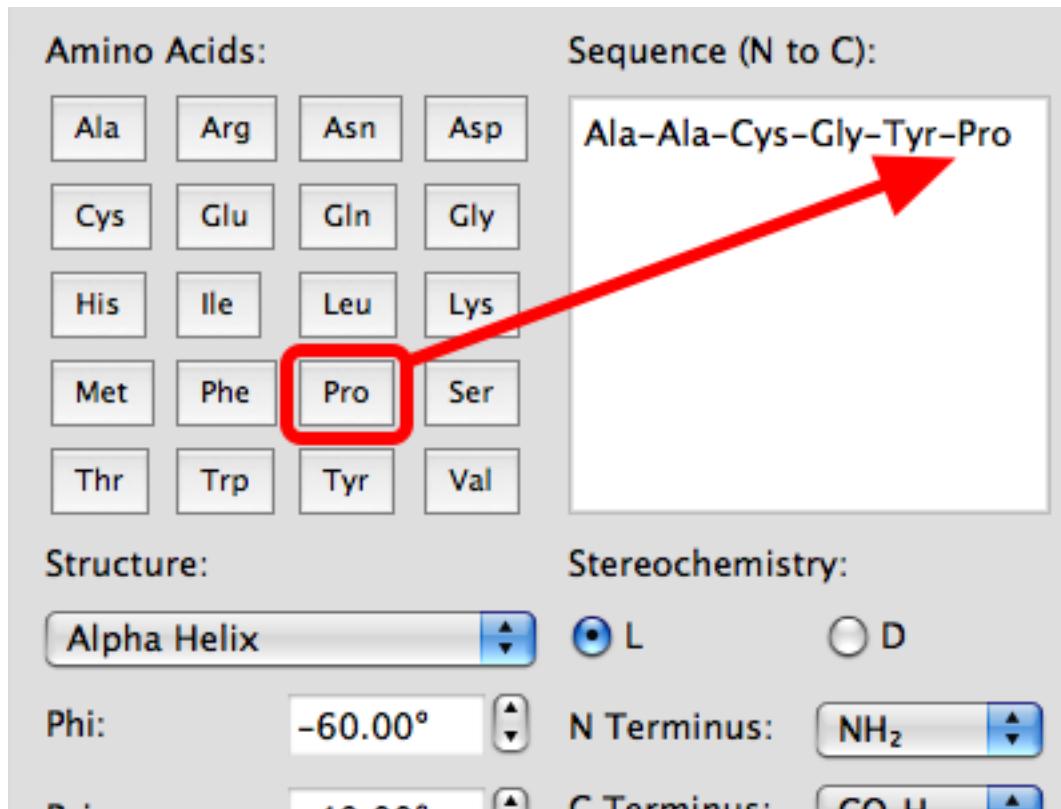
INSERIRE UN PEPTIDE

Per inserire un peptide selezionate dal menu **Compila > inserisci > Peptide**.

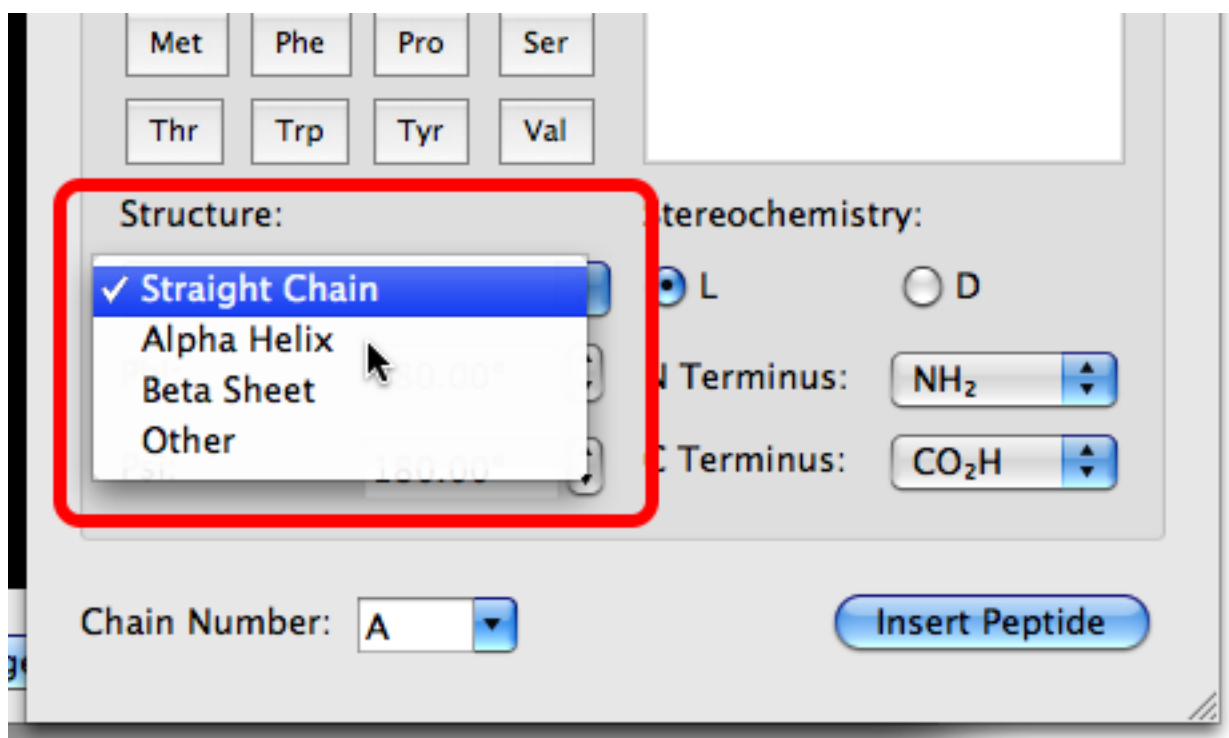


Questo percorso apre la finestra che consente di costruire un peptide. Potete selezionare gli amminoacidi e inserirli nel nuovo peptide.

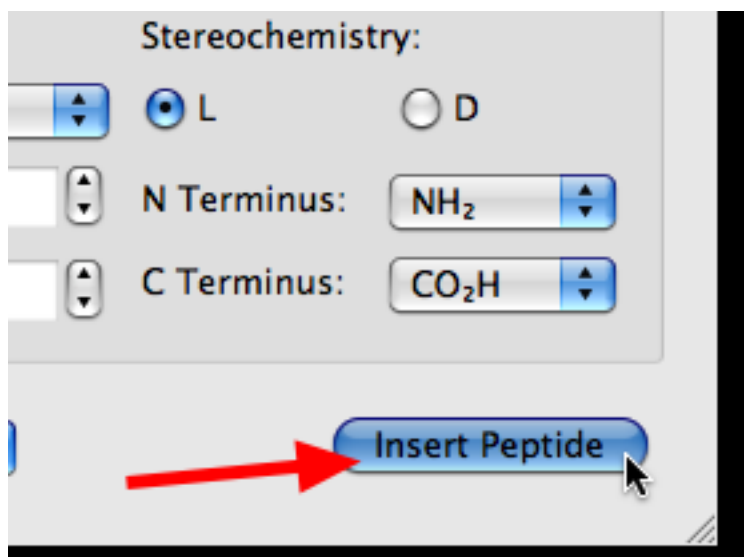




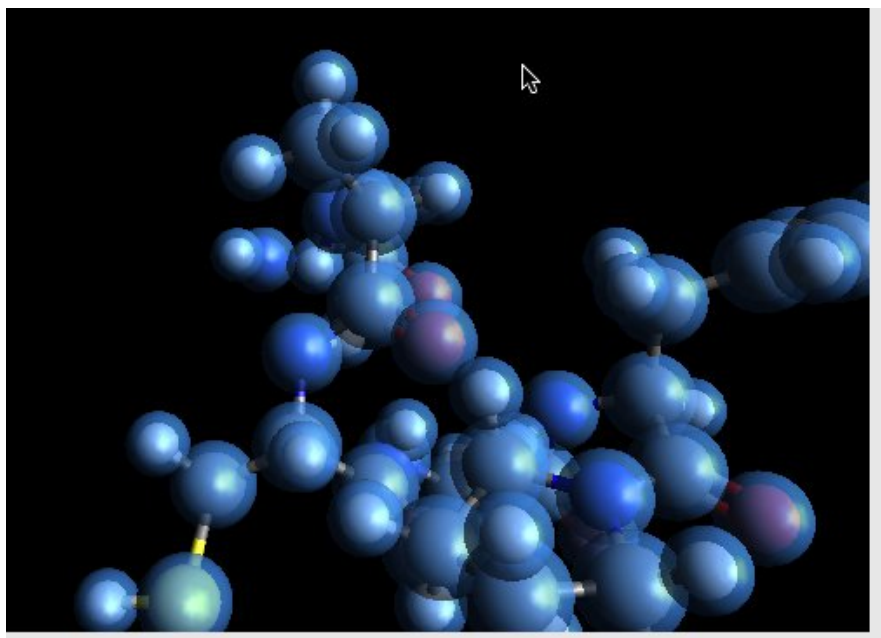
Quando selezionate uno specifico amminoacido, verrà aggiunto alla catena che vedete visualizzata alla vostra destra. Il peptide è costruito come sequenza lineare a partire dall' N-terminale. Potete anche scrivere il nome dei residui direttamente o copiarli da un database online.

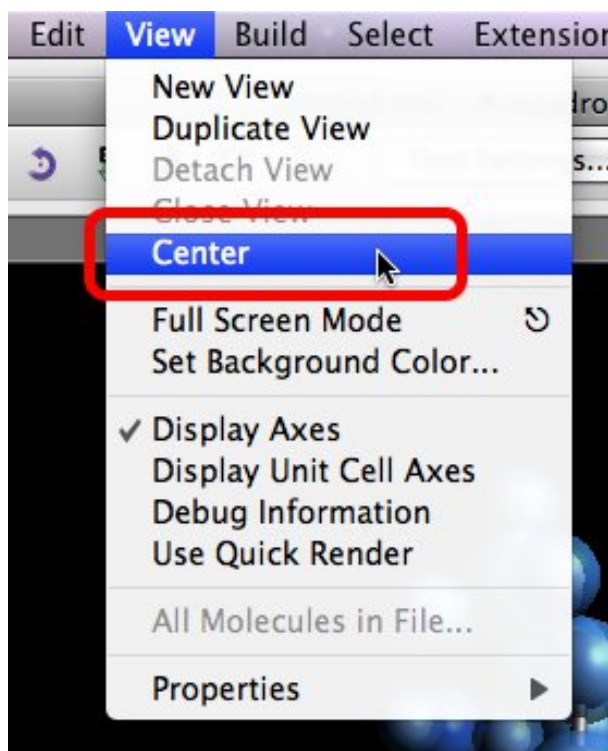


Potete inoltre selezionare la struttura secondaria.



Se selezionate “Insert peptide” nella finestra principale, apparirà il nuovo oligopeptide e sarà selezionato automaticamente per consentirvi di modificarlo e ruotarlo nella posizione che preferite.





Potete migliorare la visualizzazione centrandola, poichè i peptidi potrebbe essere di grandi dimensioni.