**Ventana de comparación de estructuras**

Esta herramienta calcula la desviación cuadrática media (RMSD en inglés) entre dos estructuras moleculares. Para utilizar esta herramienta, se deben tener abiertas dos ventanas de la aplicación Chemcraft (quieres decir, lanzar Chemcraft dos veces), y abrir una estructura en cada una de ellas. Las estructuras pueden ser abiertas con cualquier vía (por ejemplo: a través del elemento de menú “File/Open”, o al escribir las coordenadas en el modo “Coord”), pero deben ser visibles en el modo “Image” de la ventana correspondiente. Si el fichero abierto contiene múltiples geometrías, mostradas en la lista de la izquierda (por ejemplo en los trabajos de optimización), un elemento en específico debe ser seleccionado en la lista para utilizar la geometría asociada a este elemento en específico en la comparación. Una vez hecho esto, debe escogerse el elemento de menú "Tools/RMS compare structures" en cualquiera de las dos ventanas de Chemcraft.

Las estructuras a comparar deben tener igual número de átomos y secuencias atómicas. Si las estructuras poseen diferentes secuencias atómicas, en una de ellas los átomos deben ser reordenados manualmente antes de utilizar esta herramienta (Se puede utilizar el elemento de menú "Edit/Update sequence by atomic labels" para este propósito).

Las distancias minimizadas entre los átomos individuales en las dos estructuras son mostradas en una tabla. Bajo la lista de átomos, son mostrados los valores de RMSD para los diferentes tipos de átomos (desviación cuadrática media para tipo de átomos individuales). En la fila “All atoms”, es mostrada la RMSD para todos los átomos de la molécula. En la fila "With weights", es mostrado el valor calculado de RMSD utilizando pesos específicos para cada átomo individual (esto es la raíz cuadrada de los promedios utilizando los valores de pesos del cuadrado de la distancia de todos los átomos). Este valor también es mostrado bajo la tabla. Exactamente este valor es minimizado en la transformación de coordenadas (ver mas abajo). Por defecto (cuando se escoge la opción “All atoms”, o cuando todos los elementos de la lista de la izquierda son marcados), cada átomo tiene un peso de 1.0 . En este caso los valores en la tabla de las filas “All atoms” y “With Weights” son iguales. Si se escogen las opciones "Specify types" o "Specify atoms", los átomos no seleccionados poseen un peso igual a 0.

El botón "Use custom weights" permite especificar explícitamente los pesos individuales para cada átomo. No es necesario que los valores de los pesos estén normalizados.

El botón "Recalculate", calcula nuevamente el valor de las RMSD y los muestra en la tabla.

**Algoritmo:**

Antes de mostrar los valores de la desviación cuadrática media, el programa rota y traslada una de las estructuras para minimizar el valor de RMSD calculado con pesos requeridos para cada átomos. En la implementación actual la rotación es hecha de forma iterativa, con un paso mínimo de 1E-18 rad. El error en el valor de RSMD causado por la rotación discreta es de 1E-14 A para moléculas de 50-100 átomos (mientras mas grande sea la molécula, mas grande será el error).