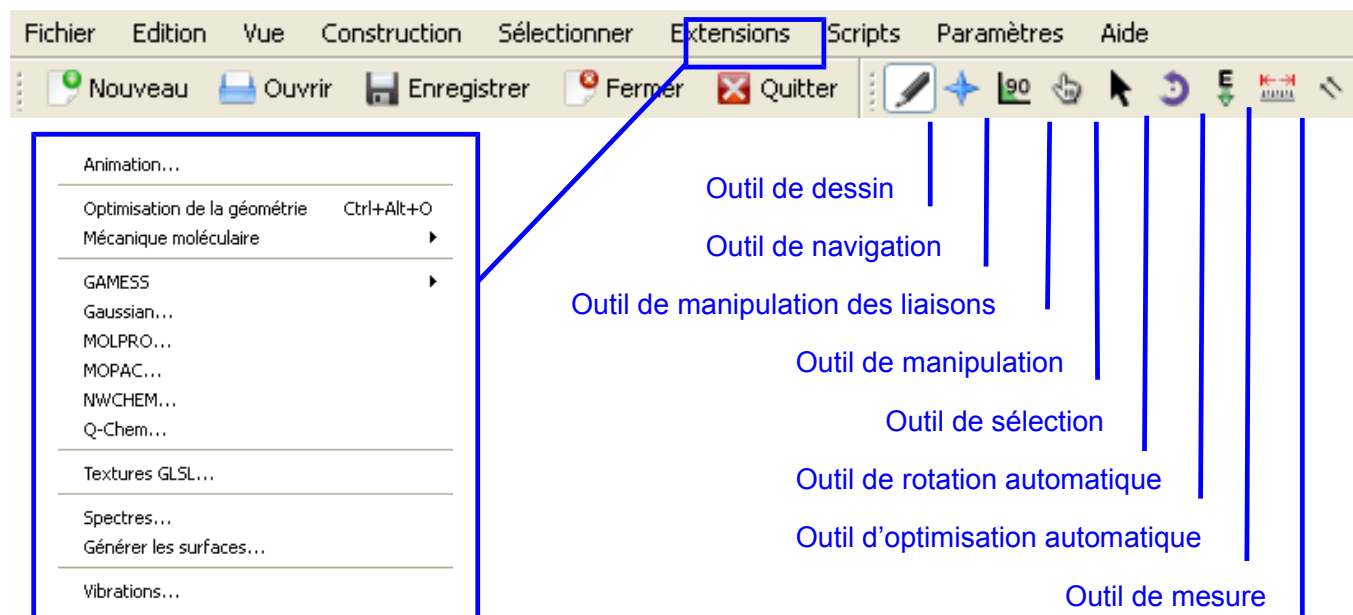


## MODE D'EMPLOI DU LOGICIEL AVOGADRO

C'est un logiciel de construction et visualisation de molécules en 3D.

- Une option permet de compléter automatiquement la molécule en construction avec des atomes d'hydrogène.
- Un outil permet d'optimiser automatiquement la géométrie de la molécule.
- Visualisation des molécules construites sous forme de bâtonnets, fil de fer, sphères (modèle éclaté ou non),...
- Le logiciel donne aussi les longueurs des liaisons, les angles entre les liaisons, la taille des atomes.
- Une bibliothèque contient déjà des exemples de molécules (acides aminés, alcools, acides, amines, amides,...).
- Abordable dès le collège, il peut avantageusement remplacer les modèles moléculaires (plus de limite du nombre d'atomes disponibles, plus de course après les atomes qui roulent sur les paillasses,...).
- Les nombreuses options et fonctionnalités en font un logiciel qui peut être utilisé au delà du lycée.
- Logiciel libre et gratuit téléchargeable sur :

[http://avogadro.openmolecules.net/wiki/Main\\_Page](http://avogadro.openmolecules.net/wiki/Main_Page)



# 1 Dessiner un modèle moléculaire

- Sélectionner l'outil dessin
- Cliquer puis étirer avec le bouton gauche de la souris.
- On obtient un alcane linéaire en répétant l'opération.
- En partant d'un atome de carbone de la chaîne carbonée, on peut avec le même principe obtenir un alcane ramifié.

## Choix des atomes

Dans la fenêtre « Paramètre de dessin », choisir dans le menu déroulant « Élément » l'atome désiré.

## Création de liaisons multiples

Dans la fenêtre « Paramètre de dessin », choisir dans le menu déroulant « Multiplicité » le type de liaison désiré.

## Effacement

Cliquer en haut sur l'outil de sélection

Dessiner un cadre autour de la structure, bouton gauche de la souris maintenu appuyé, puis dans le menu « Edition », cliquer sur Effacer.

Si le cadre n'est pas défini, la structure sera entièrement effacée.

## Optimisation automatique de la représentation

Cliquer sur le menu « Extensions / Optimisation de la géométrie ».

On obtient un modèle respectant la géométrie de la molécule (longueurs relatives des liaisons, angles entre liaisons, ...).

## Rotation des molécules autour d'un atome donnée

Cliquer sur l'outil de mesure

Cliquer sur un atome donné de la molécule avec le bouton gauche de la souris et déplacer celle-ci en maintenant le bouton gauche appuyé.

## Mesure de la valeur d'un angle et de la longueur des liaisons

Cliquer sur l'outil de navigation

Cliquer sur trois atomes (les numéros 1 2 et 3 apparaîtront).

L'angle est mesuré entre le 1er et le 3ème atome autour du 2ème atome.

Les distances sont mesurées entre le 1er et le 2ème atome et entre le 2ème et le 3ème atome.

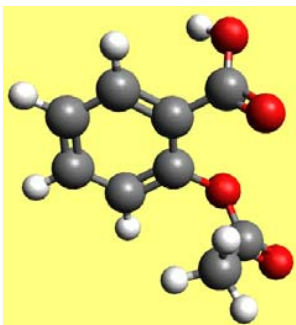
## Exemples

Pour représenter une molécule autre qu'un alcane

### 1. Exemple de l'éthylène

A partir de l'éthane (outil dessiné sélectionné puis cliquer et étirer sur la zone de travail), cliquer sur la liaison C-C : on obtient l'éthylène ; un clic supplémentaire donne l'acétylène.

On retrouve l'éthane en cliquant une fois de plus.



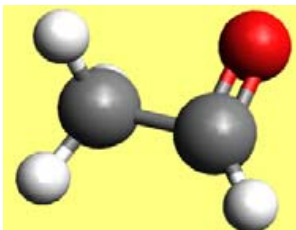
### 2. Exemple de l'éthanol

A partir de l'éthane, cliquer sur « Paramètre de dessin », et dans la liste déroulante « Élément » choisir l'oxygène.

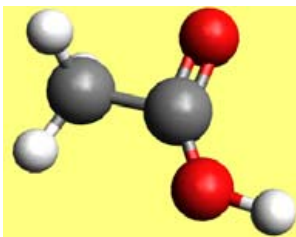
En cliquant sur un des 6 atomes d'hydrogène, celui-ci est substitué par un groupe hydroxyle -OH.

### 3. Passage de l'éthanol à l'éthanal puis à l'acide éthanoïque

L'oxygène étant toujours sélectionné dans la liste, en cliquant sur la liaison C-O, on obtient l'éthanal :

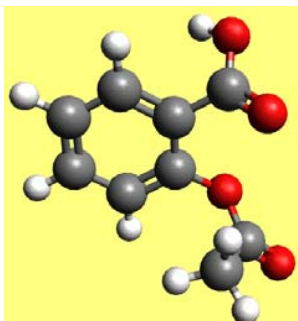


Puis en cliquant sur l'atome d'hydrogène du groupe fonctionnel, on obtient l'acide éthanoïque



#### 4. Une molécule plus complexe : l'aspirine

Il suffit de commencer par le cyclohexane (construire l'heptane, et, avant de relâcher le bouton gauche de la souris, amener le 7ème carbone sur le premier), puis de créer l'alternance liaison simple / double liaison en cliquant sur les liaisons concernées : on obtient le benzène.



A ce stade, on peut optimiser automatiquement la structure (voir plus haut). Puis on procède comme pour les molécules oxygénées précédentes