

# Prise en main rapide du logiciel Avogadro – Editeur de structures chimiques

## Modification de la couleur d'arrière-plan

La couleur d'arrière-plan (initialement noire) peut être changée grâce au menu Vue > Couleur d'arrière-plan ...

## Pour dessiner un modèle moléculaire

Sélectionner l'outil dessin  en haut.

A l'aide de la souris, bouton gauche maintenu appuyé, on obtient, en étirant puis en relâchant, d'abord l'éthane, puis en reproduisant l'opération à partir d'un des deux carbones, un alcane linéaire de plus en plus grand.

Partant ensuite d'un atome de carbone de la chaîne carbonée, on peut avec le même principe obtenir un alcane ramifié.

Pour annuler une action : menu Edition > Undo ... ou plus simplement CTRL+Z.

## Optimisation manuelle de la représentation moléculaire

L'outil de manipulation  permet d'optimiser manuellement la représentation d'une molécule : en cliquant sur cet outil, on peut ensuite déplacer un atome sans rompre de liaison(s).

## Optimisation automatique de la représentation moléculaire

Avec le menu Extensions > Optimisation de la géométrie ... , on obtient un modèle respectant la géométrie de la molécule (longueurs relatives des liaisons, angles entre liaisons, ...).

## Pour représenter une molécule autre qu'un alcane

### 1) Exemple de l'éthylène

A partir de l'éthane (outil dessin  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.

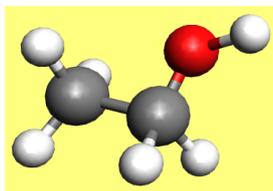
On retrouve l'éthane en cliquant une fois de plus.

### 2) Exemple de l'éthanol

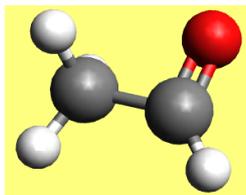
A partir de l'éthane, cliquer sur  , et dans la liste déroulante  , choisir l'oxygène.

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

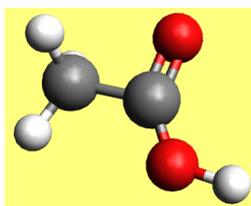
### 3) Passage de l'éthanol à l'éthanal puis à l'acide éthanoïque



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 :

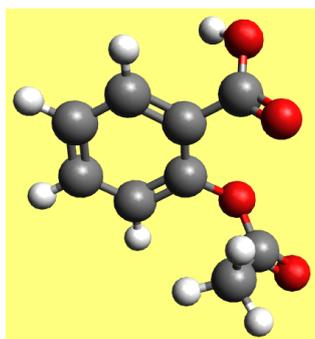


#### 4) Une molécule plus complexe : l'aspirine

Il suffit de commencer par le cyclohexane (construire l'heptane, et, avant de relâcher le bouton gauche de la souris, amener le 7<sup>ème</sup> 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.



#### Effacement

Pour effacer une structure, 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.

*Il est dommage que la touche Suppr ne fasse aucun effet ...*

#### Sauvegarde du modèle moléculaire créé

Dans le menu Fichier puis Enregistrer sous ... , on peut choisir parmi plusieurs types de fichiers, en particulier CML : le modèle peut alors être réédité dans Avogadro (Fichier > Ouvrir ...)

*Attention : le nom du fichier ne doit pas comporter de lettre accentuée.*

Pour enregistrer la molécule sous forme d'image, dans le menu Fichier, il faut choisir Exporter :

- l'option Graphiques ... permet d'obtenir une image au format BMP, PNG, ou JPEG ;
- l'option Graphiques vectoriels ... permet d'exporter au format PDF, SVG, ou EPS.

#### Déplacer la molécule

Cliquer sur l'outil de navigation , puis sur la molécule avec le bouton droit de la souris, et déplacer en maintenant appuyé.

#### Zoomer sur la molécule

Cliquer sur l'outil de navigation , puis sur la molécule avec la molette de la souris. Selon le sens de rotation de la molette, on augmente ou diminue la taille de la molécule.

#### Rotation de la molécule autour d'un atome donné

Cliquer sur l'outil de navigation , puis sur un atome donné de la molécule avec le bouton gauche de la souris, et déplacer celle-ci en maintenant le bouton gauche appuyé.

#### Rotation automatique

En cliquant sur l'outil de rotation automatique , puis en imprimant un mouvement de rotation à la molécule à l'aide du bouton gauche de la souris maintenu appuyé puis relâché, la molécule tourne sur elle-même jusqu'à ce qu'un clic sur la zone de travail soit effectué. L'axe de rotation dépend du mouvement initial de la souris.