

# UTILISATION DU LOGICIEL AVOGADRO

## Les menus

Fichier Edition Vue Construction Sélectionner Extensions Scripts Paramètres Aide

Nouveau Ouvrir Enregistrer Fermer Quitter

Animation...  
Optimisation de la géométrie Ctrl+Alt+O  
Mécanique moléculaire  
GAMESS  
Gaussian...  
MOLPRO...  
MOPAC...  
NWCHEM...  
Q-Chem...  
Textures GLSL...  
Spectres...  
Générer les surfaces...  
Vibrations...

Outil de dessin  
Outil de navigation  
Outil de manipulation des liaisons  
Outil de manipulation  
Outil de sélection  
Outil de rotation automatique  
Outil d'optimisation automatique  
Outil de mesure

## 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.

## Effacement d'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.

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

## Choix des atomes de la molécule

Elément:

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

## Création d'une liaison multiple

Multiplicité:

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

## 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 1<sup>er</sup> et le 3<sup>ème</sup> atome autour du 2<sup>ème</sup> atome.

Les distances sont mesurées entre le 1<sup>er</sup> et le 2<sup>ème</sup> atome et entre le 2<sup>ème</sup> et le 3<sup>ème</sup> atome.