

Tutoriel Avogadro

Logiciel de dessin, et de visualisation moléculaire.

Adapté pour de petites simulations de comportements moléculaires.

Les captures d'écrans et les liens sont testés et validés au 26/01/2021

Si ces liens devaient ne plus fonctionner à l'avenir, merci de contacter jean-pascal.dufour@ac-creteil.fr

Présentation du logiciel

- Logiciel Libre et donc GRATUIT.
- Le logiciel tourne sur des ordinateurs Windows (PC) / Mac / Linux. (version 1.2 PC et 1.1 sur Mac).
- Permet de :
 - Visualiser un nombre impressionnant de formats de fichiers décrivant molécules et biomolécules.
 - Dessiner en 3D ses propres molécules (avec ajustement de la structure dessinée selon plusieurs méthodes)
 - Réalisation temps réel d'optimisation de complexes moléculaires avec visualisation des interactions type liaisons H et électrostatiques.
 - Visualisation une carte du potentiel électrostatique d'une molécule.
 - D'autres fonctions ne seront pas abordées :
 - Préparation d'un fichier pour calcul quantique (ORCA / GAUSSIAN ...)
 - Travail en cristallographie.
- Dispose d'un module pour concevoir rapidement et facilement des peptides ou des acides nucléiques en 3D.

Installer le logiciel :

- Télécharger le logiciel Avogadro sur votre ordinateur : <https://avogadro.cc/>

Avogadro is an advanced molecule editor and visualizer designed for cross-molecular modeling, bioinformatics, materials science, and related areas. It has a powerful plugin architecture.

Cliquer sur DONWLOAD la page de téléchargement SOURCEFORGE s'ouvre

Le logiciel est très léger : environ 10 Mo

Home / Browse / Science & Engineering / Molecular Science / Avogadro

Avogadro
An intuitive molecular editor and visualization tool
Brought to you by: cryosuk, ghutchis, timvdm

Your download will start shortly...

Get Updates Share This Problems Downloading?

Avogadro-1.2.0n-win32.exe | Scanned by: Bitdefender

Other Useful Business Software

Vous obtenez un fichier exécutable, il suffit de le lancer pour installer AVOGADRO

L'interface d'Avogadro :

Espace de travail : dessin et visualisation

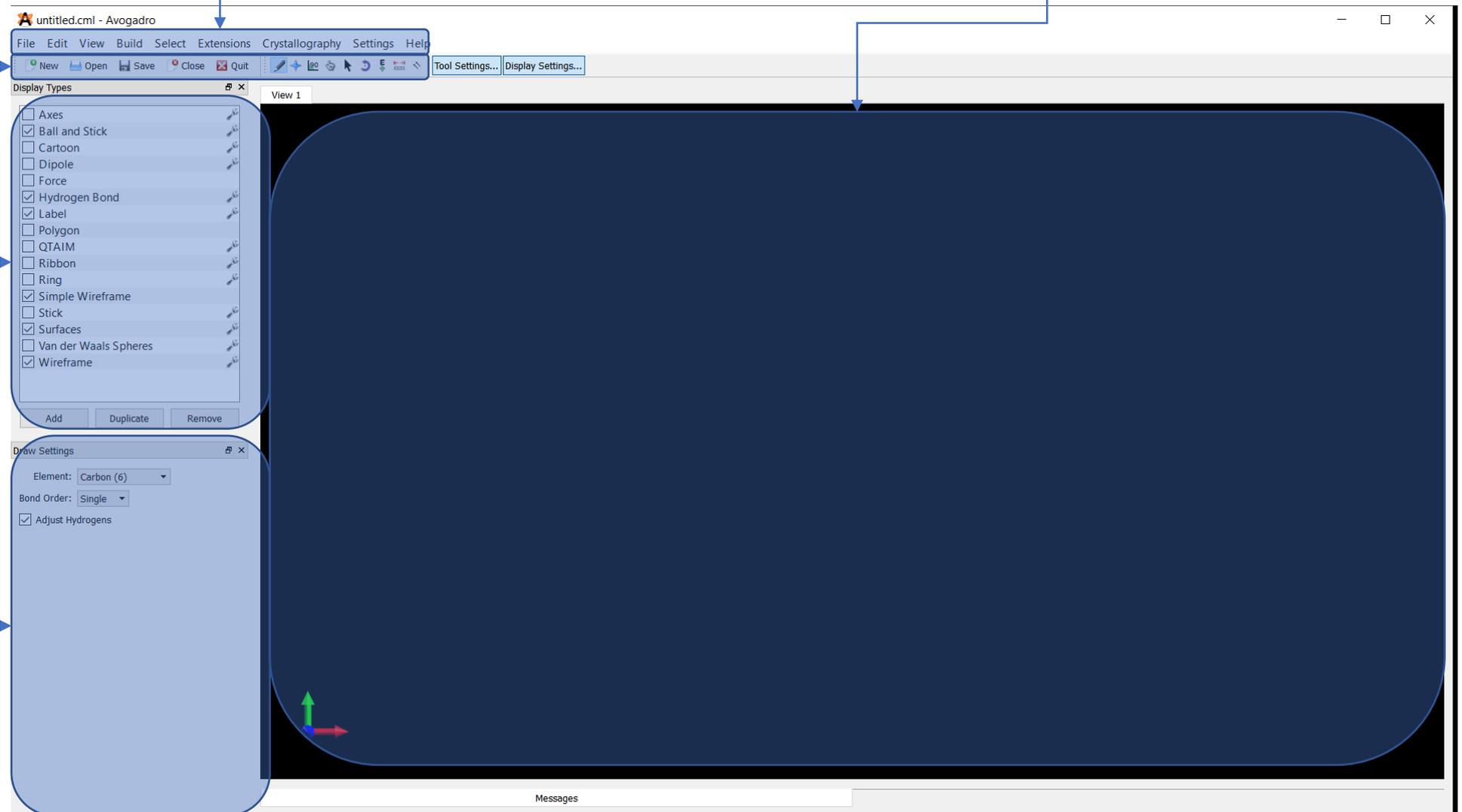
Zone de menus

Les outils

Gestion des affichages :
Quoi afficher et comment

Options de l'outil activé :
C'est le point le moins
ergonomique de ce
logiciel

Les options d'outil
changent lorsque
vous changez d'outil



L'interface d'Avogadro : Les outils



Outil d'animation :
Met les molécules en rotation
(effet visuel)

Outils de mesures

Outil de dessin :
Avec lui vous pouvez
dessiner une molécule en 3D
atomes par atomes.

Outil de navigation :
Pour vous déplacer dans
l'espace de travail (tourner,
avancer/ reculer)

Outil de manipulation autour des
liaisons :
Pour agencer dans l'espace les
atomes d'une molécule selon un
angle entre les liaison déterminé.

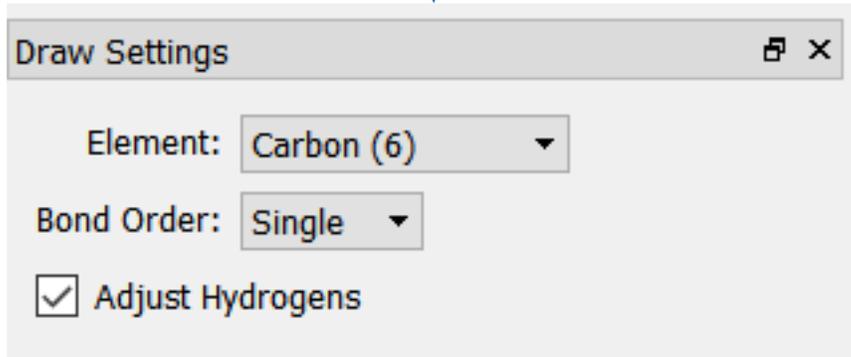
Outil de manipulation simple :
Pour déplacer un ou plusieurs
atomes

Outil d'optimisation :
Applique la théorie VSEPR à
vos molécules et des champs
de force pour minimiser
l'énergie du système.
Permet donc de montrer
certains phénomènes
d'attraction répulsion.

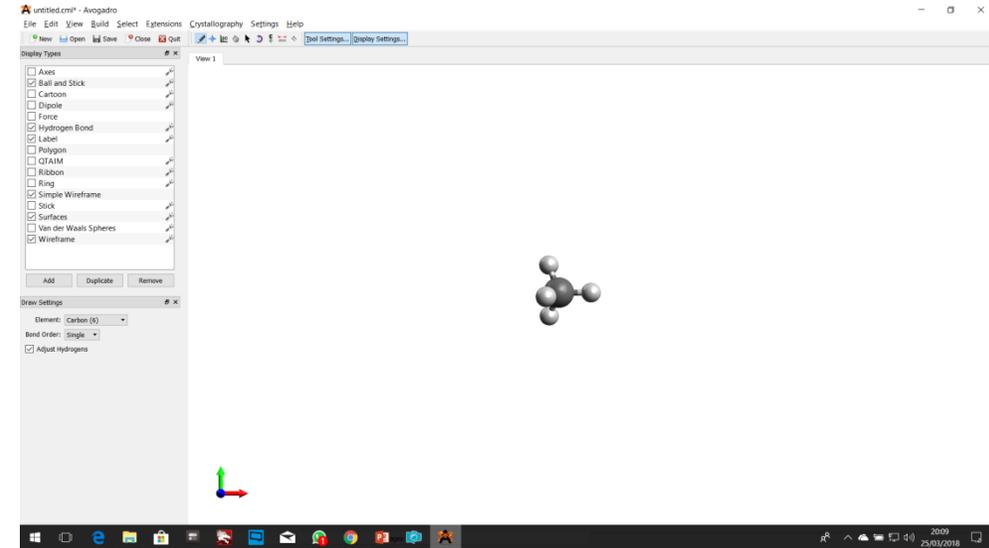
Dessignons une molécule ou deux :

Si l'outil dessin n'est pas activé, cliquer dessus.

En bas à gauche, les options de dessin s'affichent :



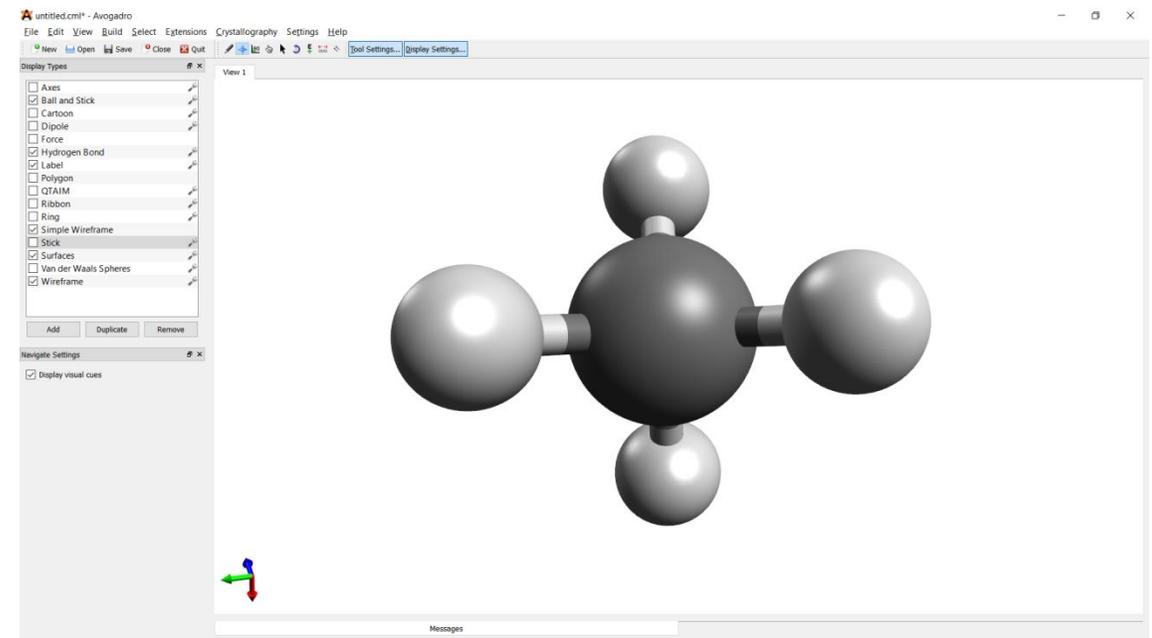
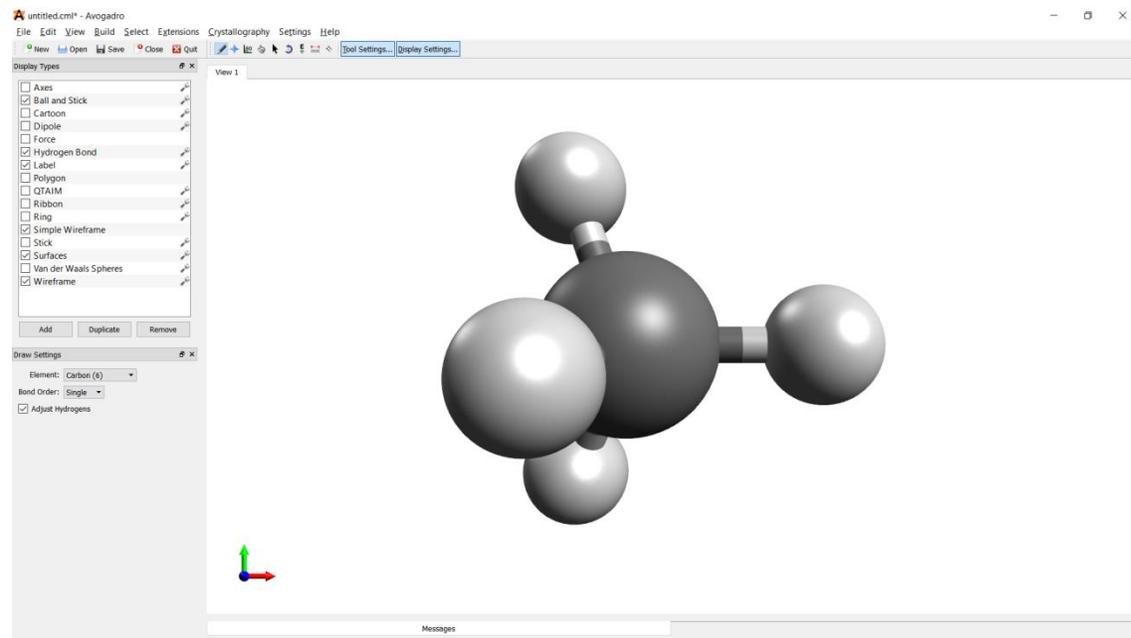
- Vous pouvez choisir l'atome que vous voulez ajouter.
- Si il va former une liaison simple ou autre.
- **Adjust Hydrogens** vas automatiquement ajouter des H si besoin à la structure.



Faites un clique GAUCHE au milieu de l'espace de travail.
Et voilà, vous avez déposé un C et l'outil ajoute seul les H

Dessignons une molécule ou deux :

Vous pouvez zoomer sur votre travail à l'aide de la molette de votre souris.



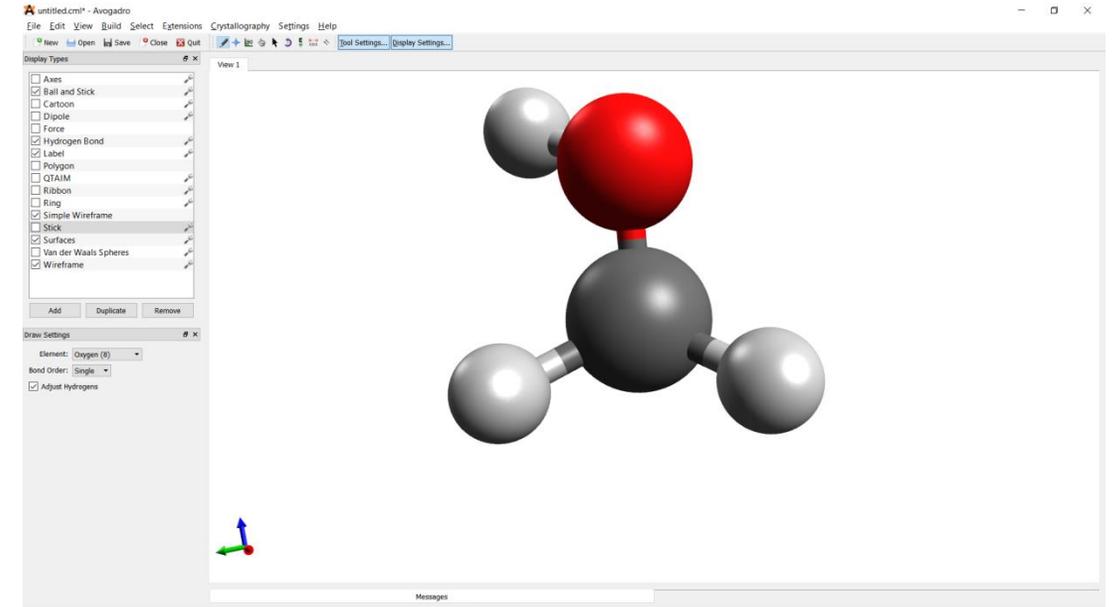
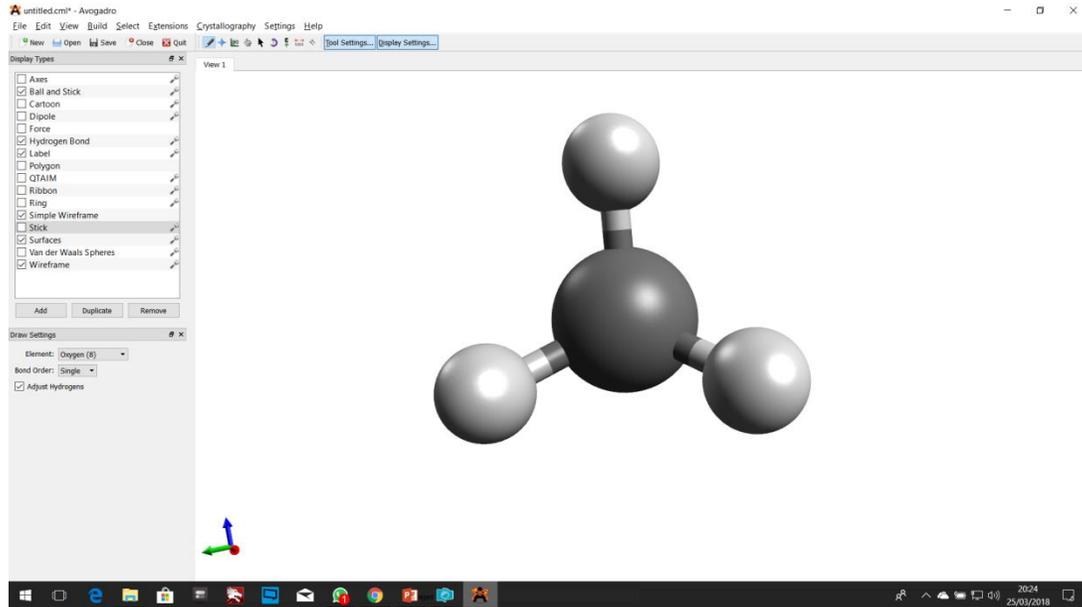
Pour faire tourner votre molécule et l'observer sous tous les angles, activer l'outil navigation
Clique GAUCHE enfoncé : rotation // Clique droit enfoncé : déplacement



Dessignons une molécule ou deux :

Rajoutons un OH à tout ceci :

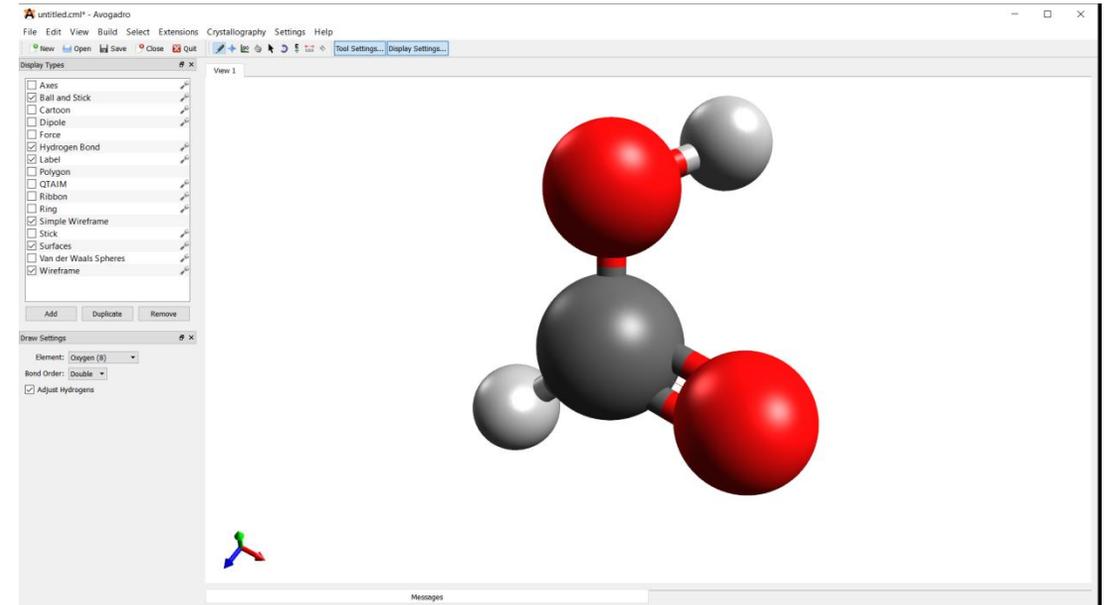
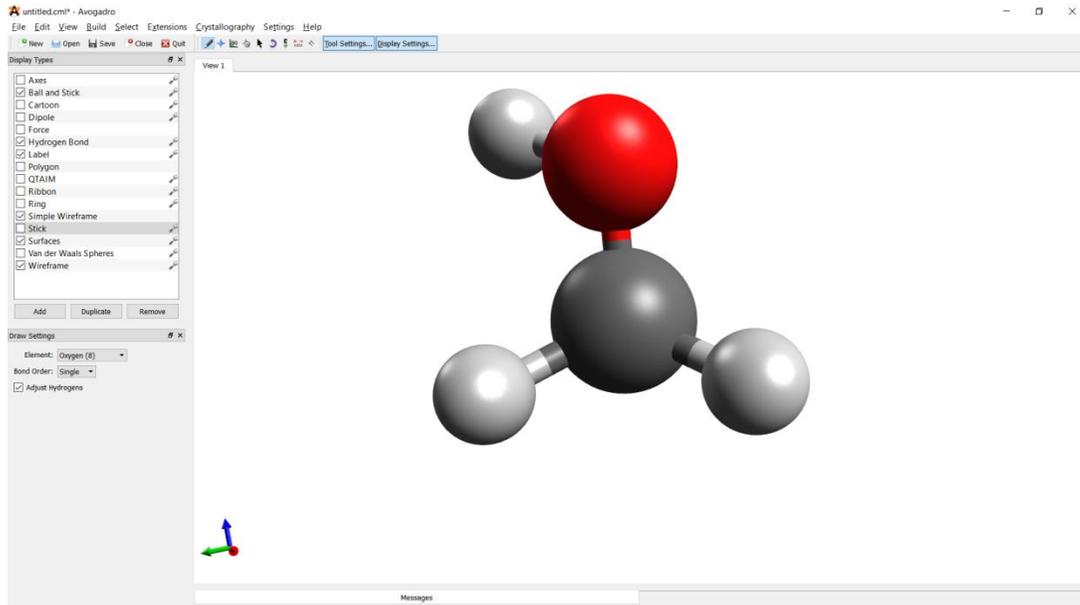
1. Positionner votre méthane pour bien voir un des ces H :
2. Puis repasser en mode Dessin (Touche F8 pour aller plus vite)
3. Dans les options de l'outil, choisir l'élément O en liaisons simple.
4. Une fois cela fait, simplement faire un clique gauche sur un des H du méthane, ce H sera remplacé par un OH.



Dessignons une molécule ou deux :

Rajoutons un double liaison O :

1. Dans les options de l'outil, choisir l'élément O en liaisons double.
2. Une fois cela fait, simplement faire un cliquer gauche sur un des H du méthanol NE PAS RELACHER LE CLIQUE.
3. Déplacer la souris, un autre O va apparaître, le guider vers le C, il va alors se « fondre dans le C » et une double liaison se formera



Dessignons une molécule ou deux :

Minimisons l'énergie et trouvons ainsi une conformation plus crédible :

1. Sélectionner l'outil d'optimisation :



Les options de cet outil sont :

- **Le champs de force** :

UFF : champs de force Universel (ne prendra pas en compte les éventuelles liaisons H).

MMFF94 et MMFF94s : Champs de force généralistes prenant en compte les liaisons H.

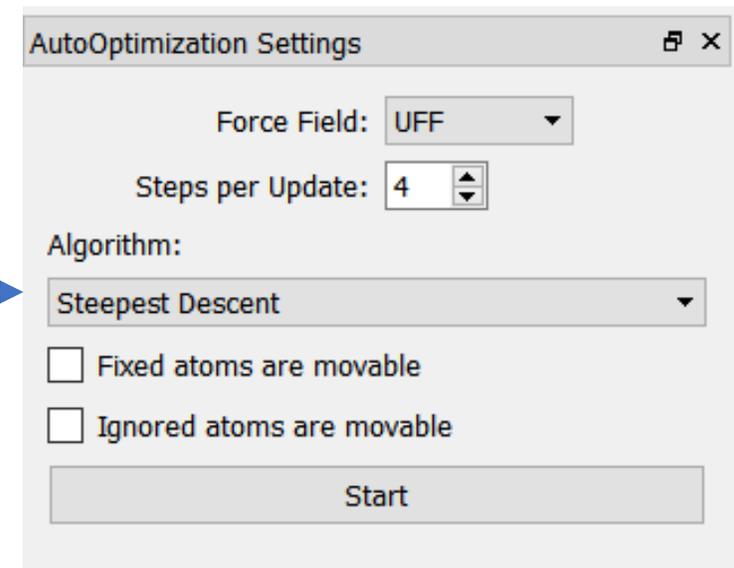
- **L'algorithme** :

Steepest Descent : méthode itérative cherchant un minimum d'énergie pas à pas.

Conjugate Gradients : autre méthode itérative, plus fine.

Molecular Dynamics : Prise en compte des oscillations et élongations des liaisons (varie selon la température donc l'énergie cinétique du système) TRES GOURMAND EN PUISSANCE DE CALCUL !

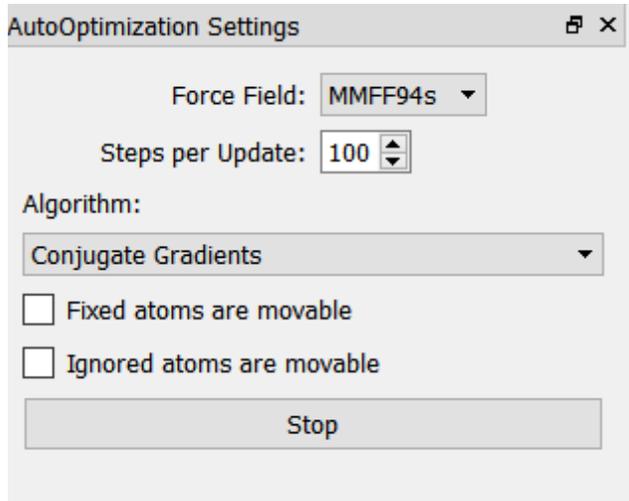
Steps per Update : nombre de pas de calcul qui s'écoulent entre 2 rafraichissement de l'affichage. Plus il sera élevé et plus le mouvement sera fluide (utile pour intervenir sur la simulation)



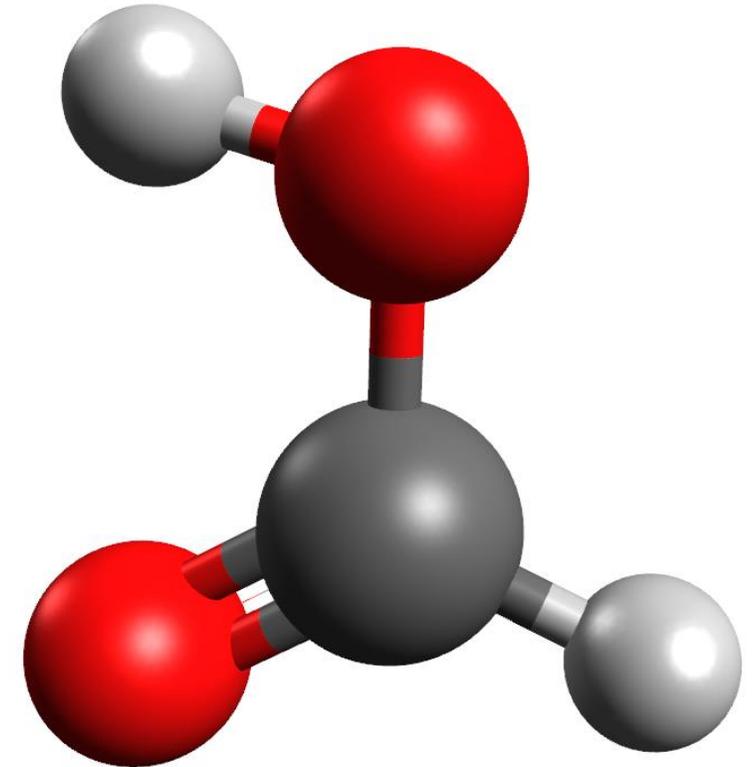
Dessignons une molécule ou deux :

Minimisons l'énergie et trouvons ainsi une conformation plus crédible :

L'outil affiche la valeur d'énergie trouvée et $dE=0$ pour vous indiquer qu'il a terminé ses itérations.

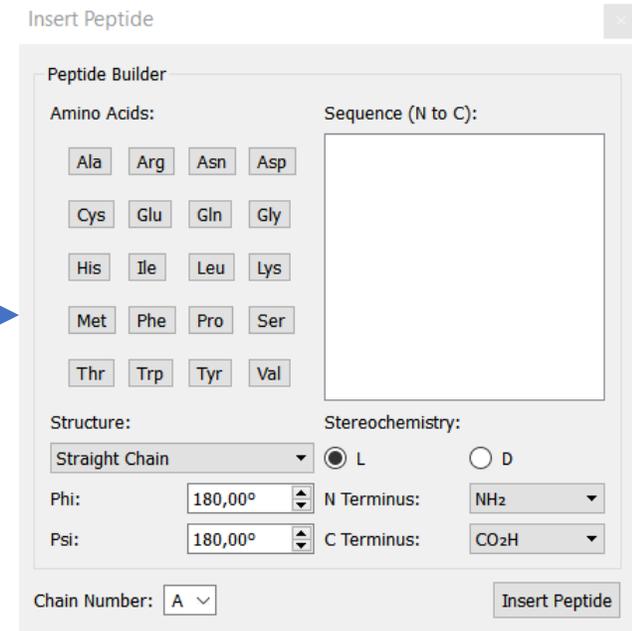
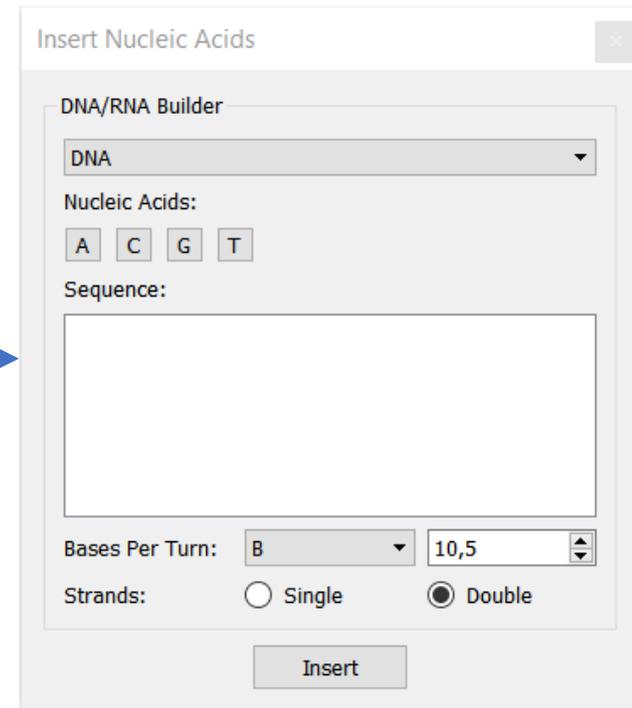
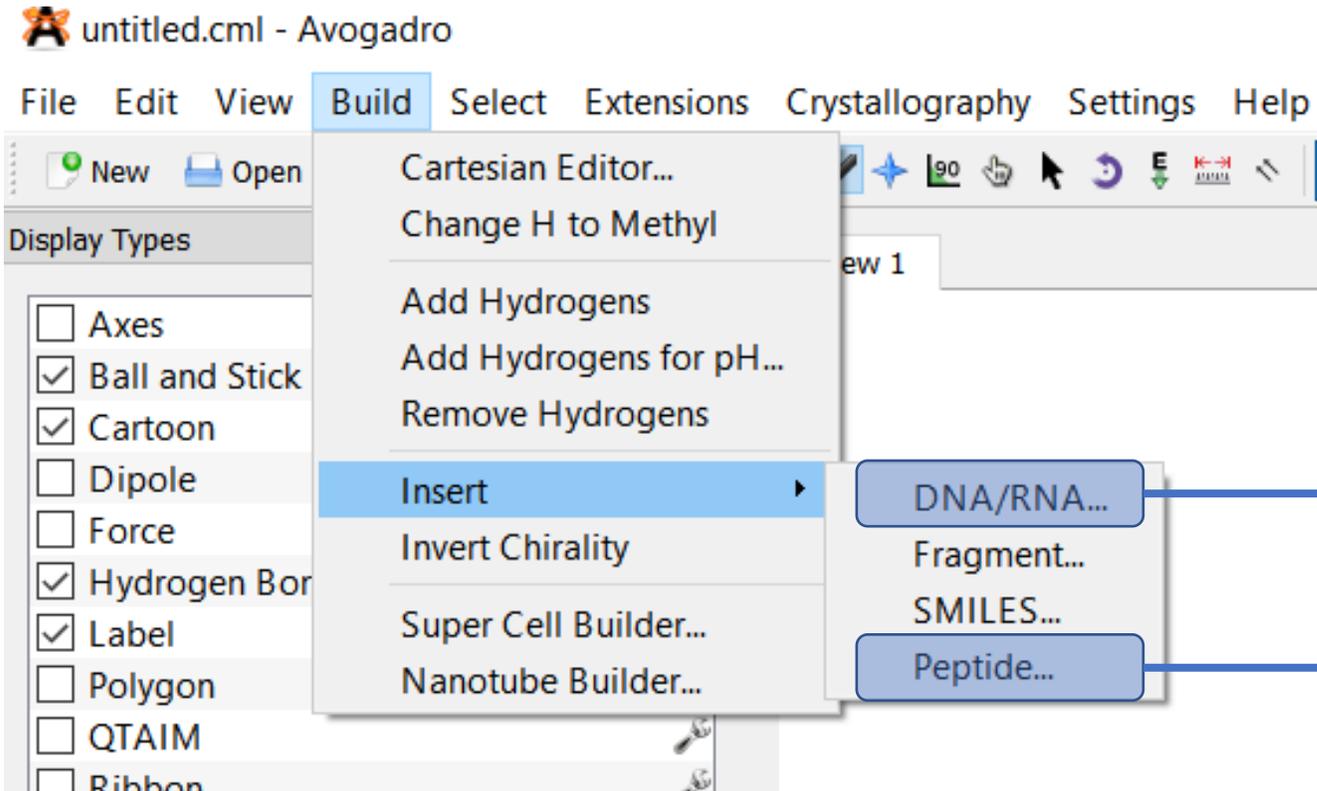


AutoOpt: E=-107.0619/mol (dE=0)
NumConstraints: 0



Ne pas oublier de cliquer STOP quand l'optimisation est terminée

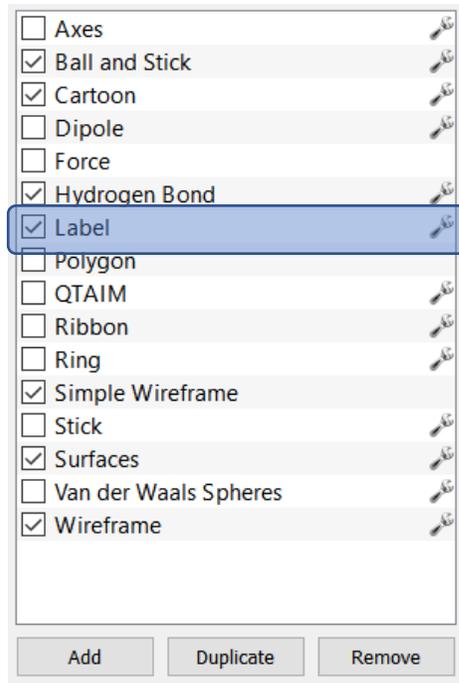
Créer une biomolécule :



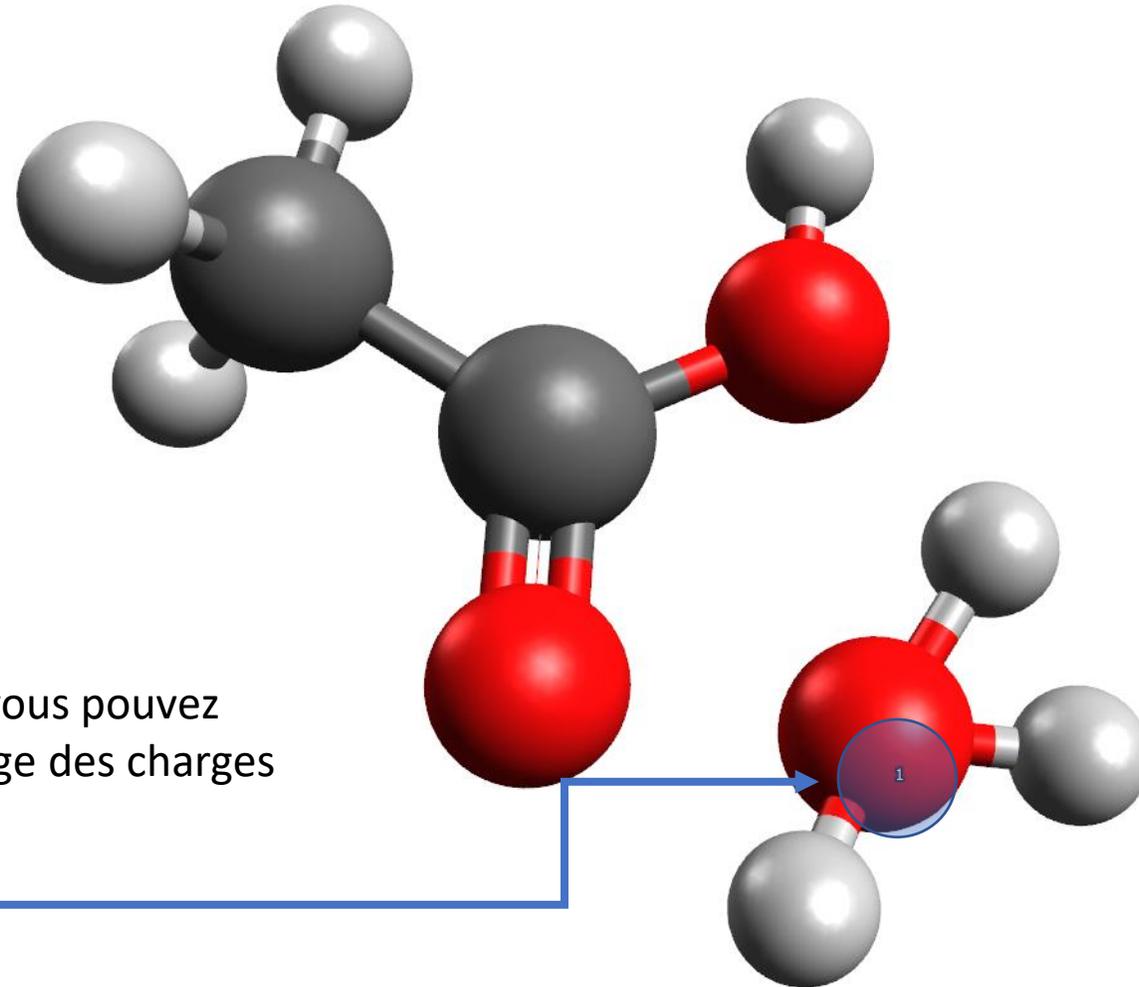
Ne pas essayer d'optimiser des biomolécules : trop de calculs !

Un petit peu de dynamique dans tout cela :

- 1) Créer l'acide éthanoïque
- 2) Créer une molécule H_3O^+

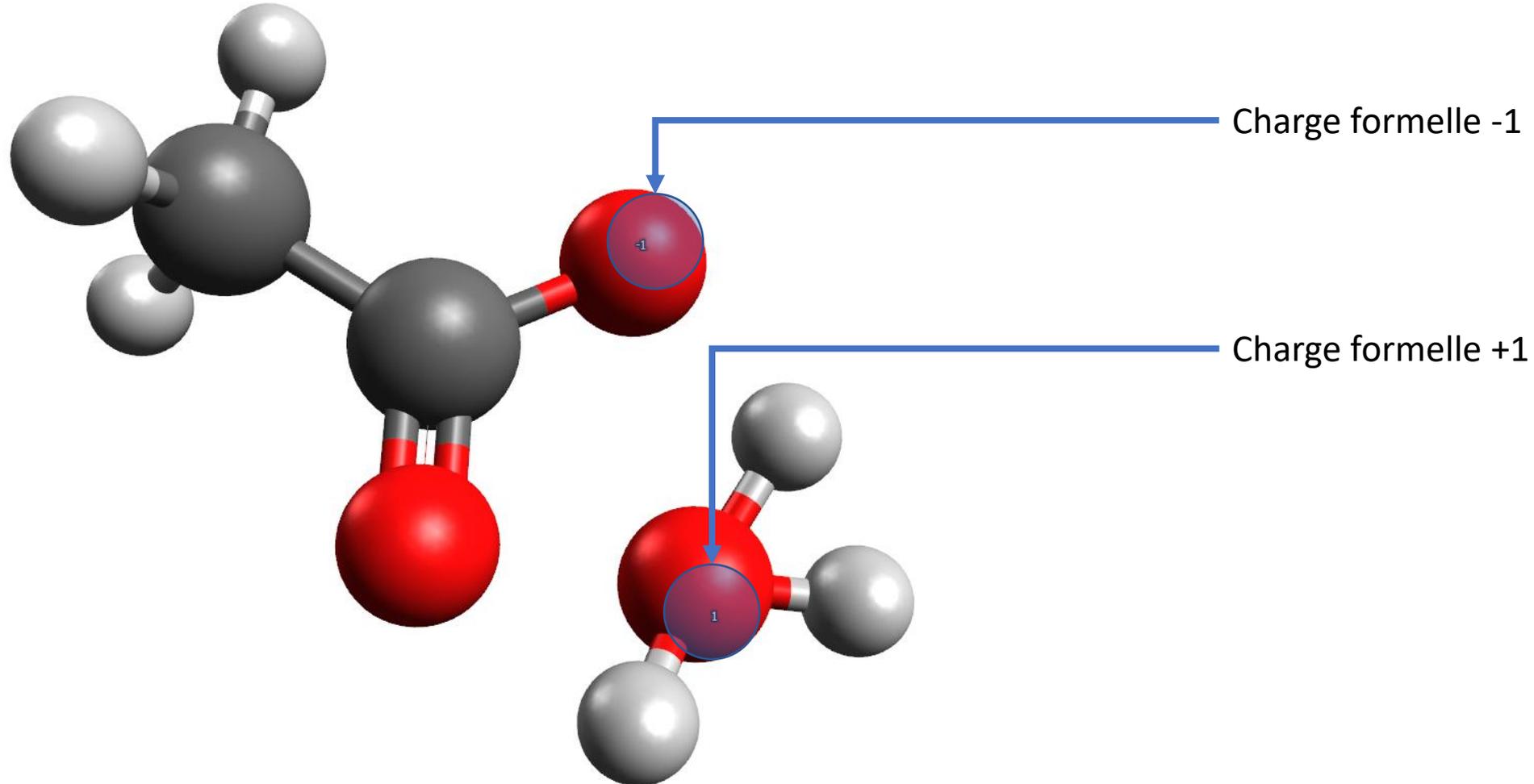


En cochant Label, vous pouvez demander l'affichage des charges formelles



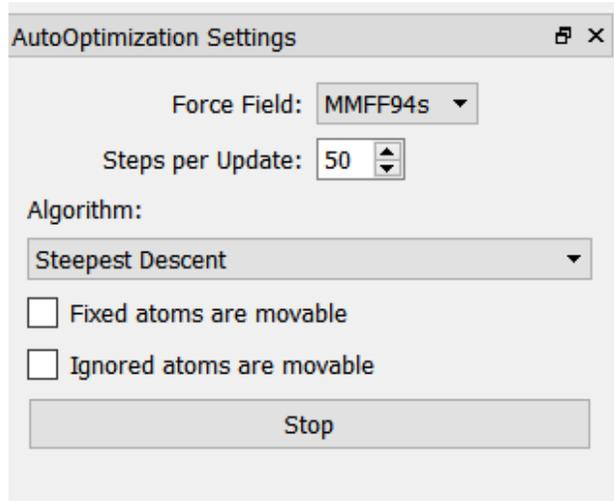
Un petit peu de dynamique dans tout cela :

- 1) Transformer l'acide éthanoïque en éthanoate
Simplement sélectionner et effacer H

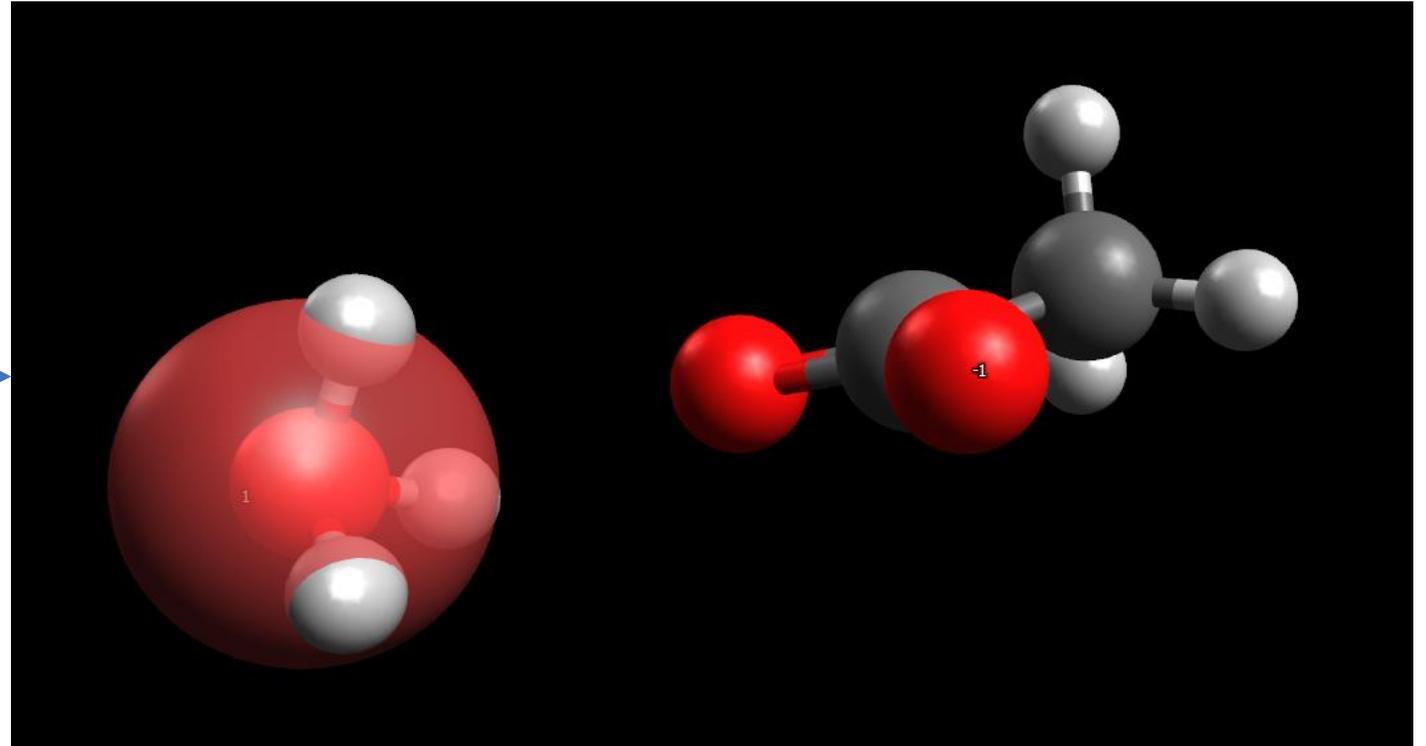


Un petit peu de dynamique dans tout cela :

1) Lancer l'optimisation avec les paramètres suivants :

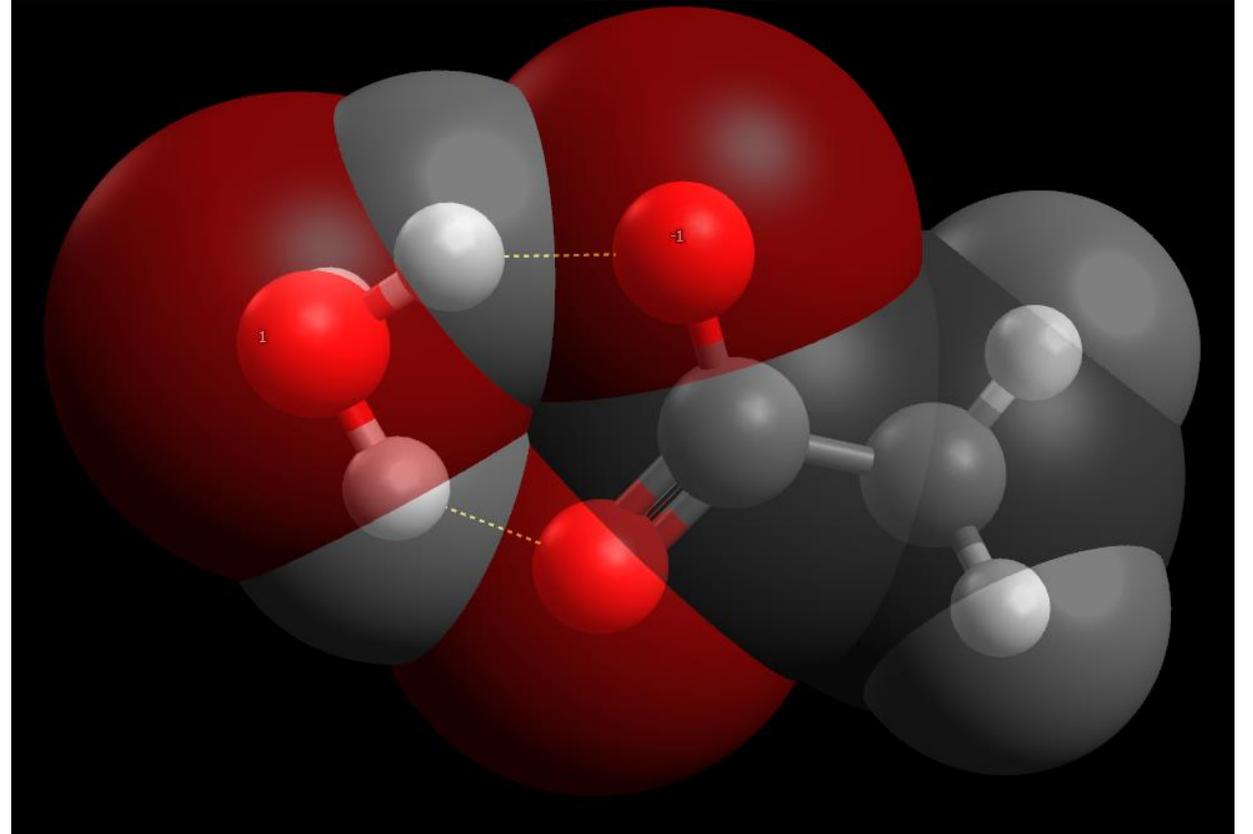
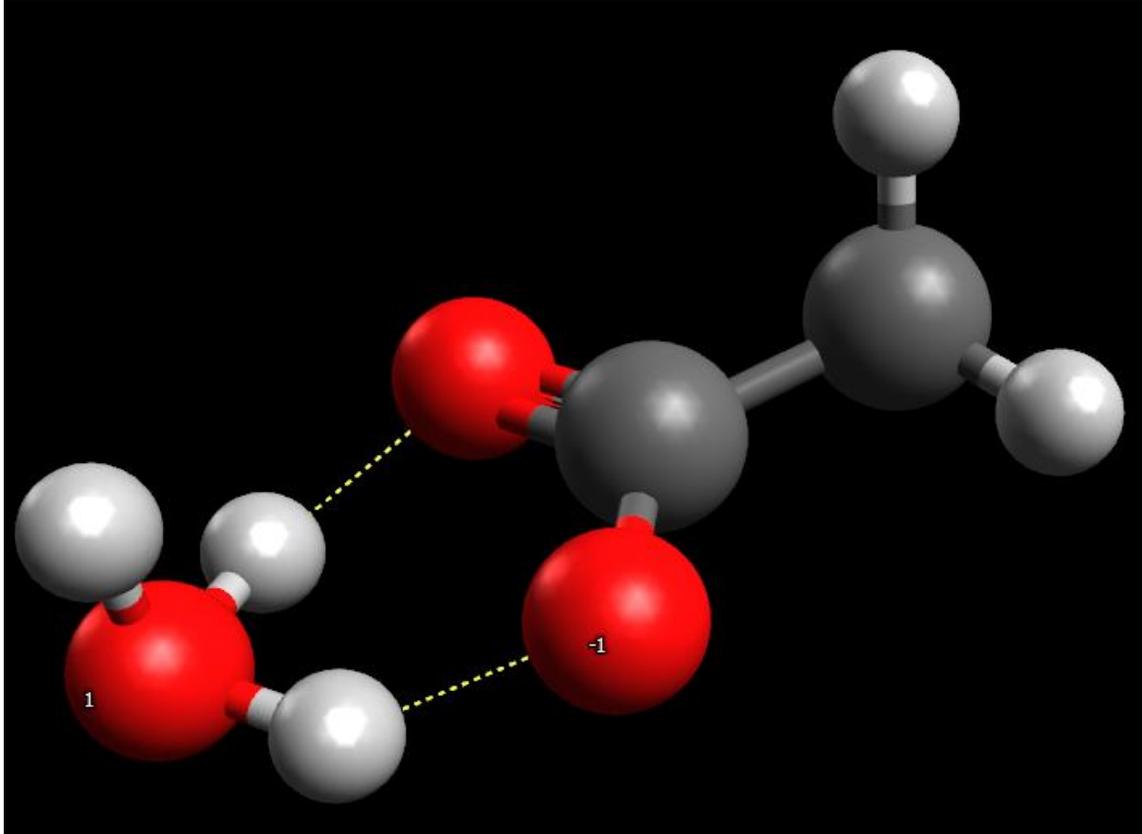


Pendant l'optimisation, vous pouvez librement sélectionner un atome et bouger la structure. Ici j'ai déplacé H3O+, automatiquement l'ordinateur recalcul l'attraction et cela entraîne la base dans le déplacement.



Un petit peu de dynamique dans tout cela :

Le système arrive rapidement à un état stable (minimum dans le pas à pas) : les liaisons H sont établies.



En affichant les sphères de Van de Waals il est plus facile de comprendre pourquoi les atomes semblent rester à distance. Donne de bons résultats pour une simulation avec des simples H₂O pour montrer l'orientation de ces dernières. Les structures hydrophobes se comportent aussi efficacement.