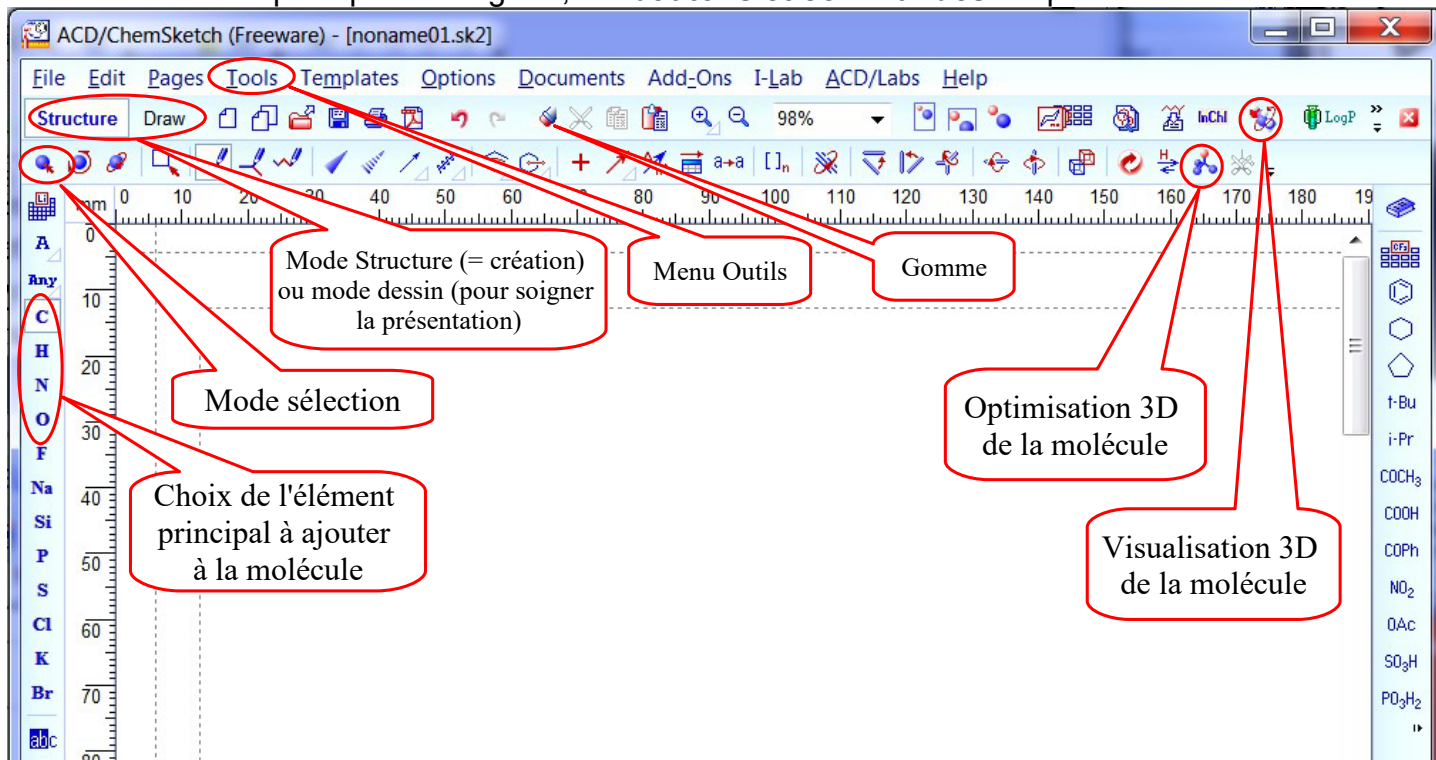


## AE. 8D - Construction et visualisation de molécules à l'aide d'un logiciel de simulation


### I) Prise en main du logiciel ChemsSketch :

Voici la fenêtre principale du logiciel, les **boutons et commandes** les plus utiles ont été entourés.

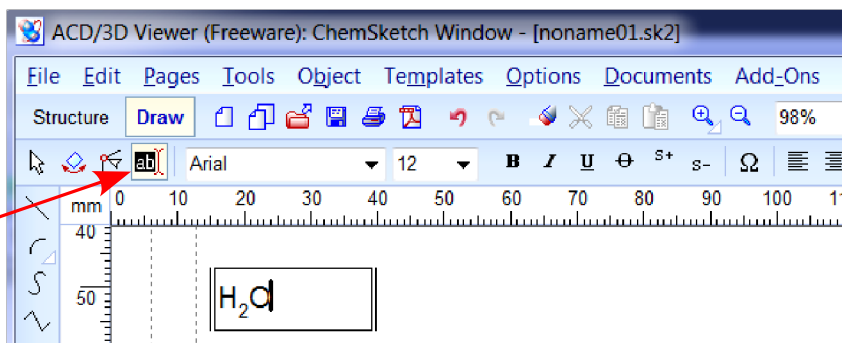


#### Le Mode Draw

Il permet de dessiner avec la souris et de taper du texte.

- Pour insérer une zone de texte cliquer sur ce bouton :  situé en bas à gauche.

- Cliquer pour modifier le texte.



L'utilisation des raccourcis clavier **Ctrl C** : copier et **Ctrl V** : coller permet de gagner du temps, car ce logiciel **n'utilise pas le clic droit** de la souris.


### II) Construction de quelques molécules :

Il faut réaliser sur une page une fiche du type suivant pour chaque molécule :

**La molécule d'eau**

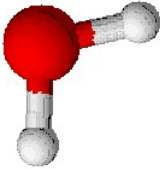
$H_2O$

formule brute

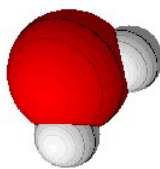


formule développée

modèle éclaté



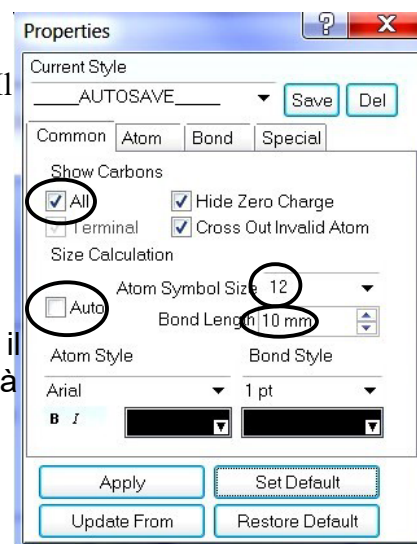
modèle compact



Le cadre arrondi est facultatif, il est réalisé en **mode Draw** et rendu transparent à l'aide du menu **Tools > Fill style Panel > x**

- Avant de construire votre première molécule vous devez régler l'aspect des liaisons et des atomes, l'aide de la boîte de dialogue du **Menu Tools > Structure Properties** voir ci-contre. Il faut cliquer sur Set Default pour appliquer les réglages à toutes les molécules construites après.


- Construire les molécules de **méthane ( $CH_4$ )**, **d'eau ( $H_2O$ )**, **d'ammoniac ( $NH_3$ )**, **de dihydrogène ( $H_2$ )** et de **chlorure d'hydrogène ( $HCl$ )**. Il suffit de choisir l'élément principal (C, N, Cl...) et 1 clic en mode structure dessine directement la formule brute et semi-développée, il faut créer **4 fois** chaque molécule ensuite les 2 dernières serviront à créer la formule développée et le modèle moléculaire 3d.

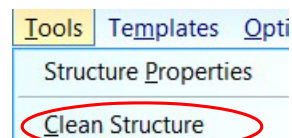


- Pour obtenir la formule semi-développée :**

Il n'y a rien à faire si le logiciel est bien configuré il dessine directement les formules semi-développées. Sinon si les atomes n'apparaissent pas tous, vérifier à l'aide de Tools, Structure Properties, Onglet Common que All et Terminal **sont cochés** dans Show carbon.

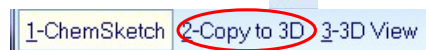
- Pour obtenir la formule développée plane:**



Sélectionner la molécule, cliquer sur l'icône  (3D Optimization), dans le menu Tools choisir **Clean Structure**, la formule développée plane apparaît.

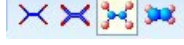



- Pour obtenir une représentation en 3d :**

Sélectionner la molécule à représenter, cliquer sur l'icône  (3D Optimization)




et copier dans le visualisateur avec le bouton  ou avec  situé en bas. La première fois il faut Lancer le 3D viewer (Menu ACD/labs 3D viewer).

Le visualisateur permet différents types de représentations , avec la souris faire tourner la molécule de manière à **voir tous** les atomes. Il faut refaire une optimisation avec le bouton  du visualisateur. Copier l'image dans le presse-papier (Edit Copy Ctrl C) et Coller (Ctrl V) l'image dans le document à côté des formules, **il faut réduire** la taille de cette image à l'aide des poignées habituelles.

Il faut enregistrer régulièrement votre travail Menu > File > Save

### **III) Notion d'isomères**

- Chercher les différentes molécules ayant pour formule brute **C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>O**. Utiliser le bouton  pour générer le nom et vérifier que la molécule est correcte. Donner les **formules brutes**, **semi-développées** et construire les **modèles éclatés**.
- Soigner la présentation et **imprimer ou déposer** le fichier de la page après avoir précisé vos **noms et prénoms**. (Pour pouvoir imprimer son travail sans installer ChemSketch il faut exporter en pdf)