

Modéliser des molécules à l'aide du logiciel ChemSketch

Le logiciel ACD/Chemsketch est **gratuit** (Freeware) et disponible sur <http://www.acdlabs.com/download/>. Pour le télécharger, il faut indiquer ses coordonnées et son adresse mail. Par contre il est en anglais.

I- PRISE EN MAIN DU LOGICIEL



- Lancer ChemSketch et faire **OK** à toutes les fenêtres qui s'ouvrent. Voici la page d'accueil du logiciel (fig.1)
- Cliquer sur **Structure** (menu de création des molécules) puis paramétrer **Tools>Structure properties >Show carbons / Size Calculation>Set default** pour visualiser les atomes et liaisons correctement (fig.2)

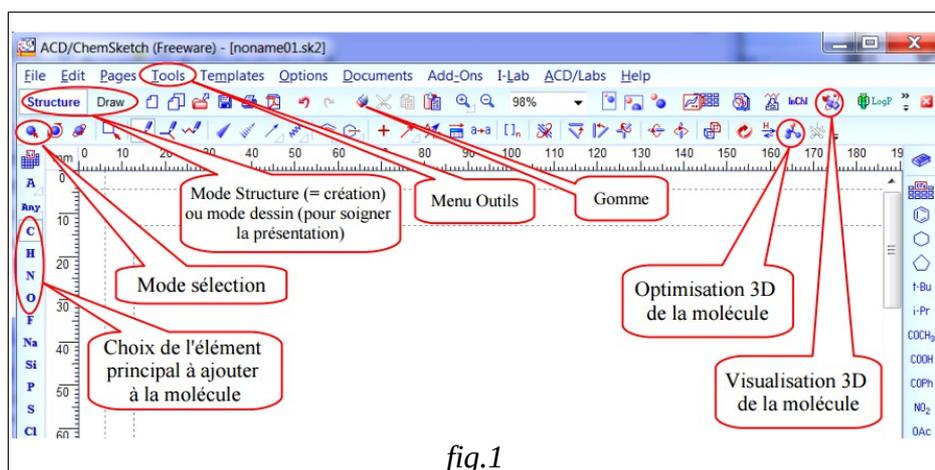


fig.1

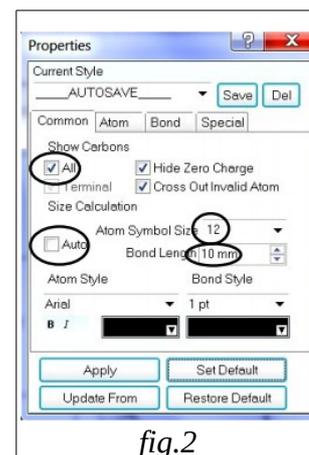


fig.2

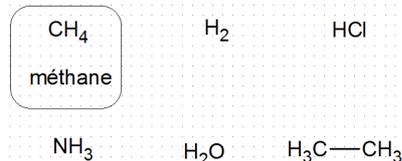
II- CONSTRUCTION DE MOLECULES EN FORMULE SEMI DEVELOPEE

Quand on choisit un élément (C, H, N, O ...) à gauche, le logiciel lui associe automatiquement des hydrogènes.

- Sélectionner le carbone **C** dans la partie de gauche, puis cliquez sur la page. Le logiciel donne la formule brute de la molécule constituée d'un atome de carbone relié uniquement à des atomes d'hydrogène.
- Faire de même avec l'hydrogène **H**, l'azote **N**, l'oxygène **O**, et le chlore **Cl**.



- Faire à nouveau un CH₄ puis y ajouter une **liaison C-C en cliquer-glisser** pour obtenir la formule H₃C - CH₃

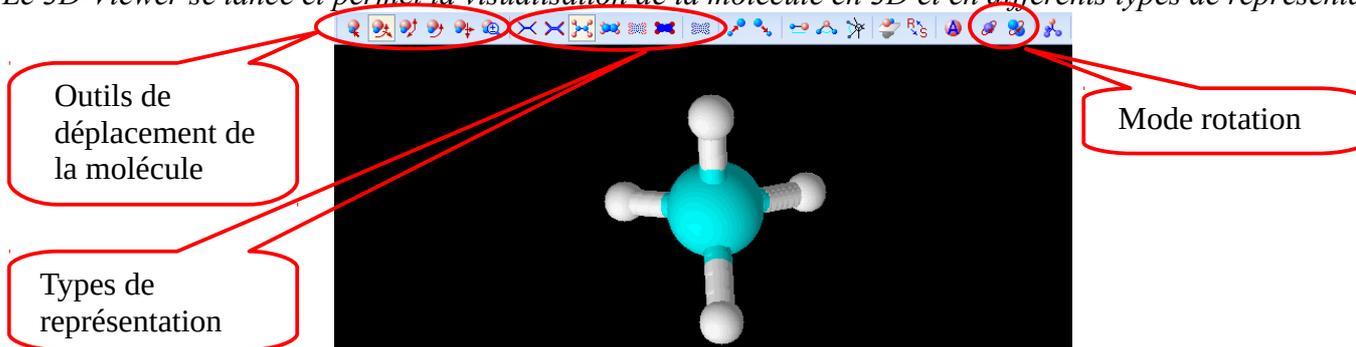


- Déplacer les formules en mode sélection pour obtenir :
- Cliquer sur **Draw** (menu d'édition). Éditer le nom de chaque molécule

III- REPRESENTATION EN FORMULES DEVELOPEES ET EN 3D

- En mode **Structure**, sélectionner la molécule de méthane puis la visualiser en 3D par
- Pour obtenir une formule développée plane, sélectionner la molécule puis faire **clean structure**
- Pour visualiser la molécule en 3D, sélectionner la molécule puis faire

Le 3D-Viewer se lance et permet la visualisation de la molécule en 3D et en différents types de représentation.

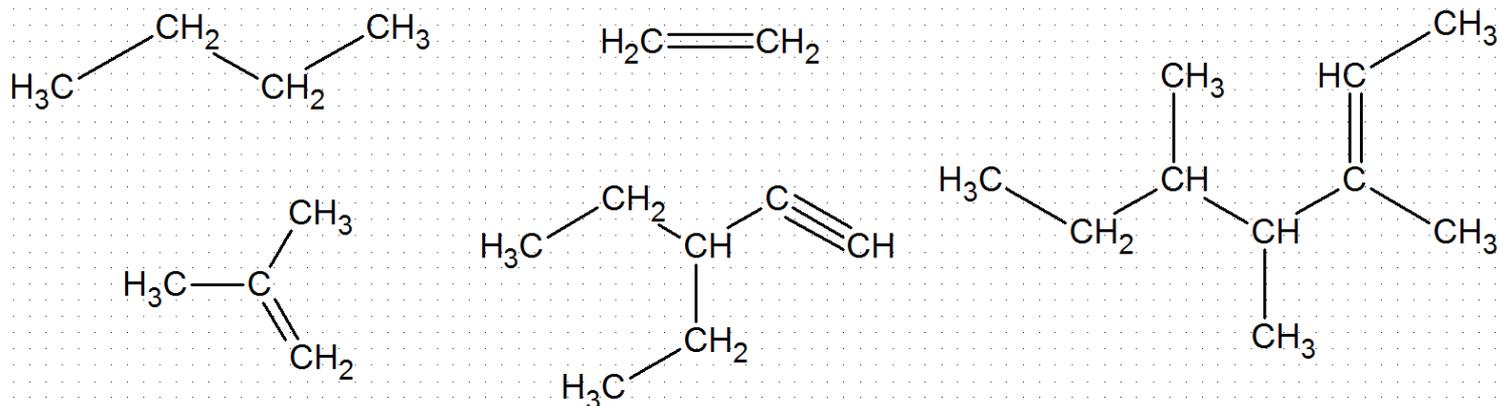


IV- APPLICATIONS ET SIMULATIONS

EXERCICE 1

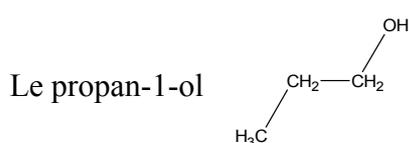
Représenter les molécules suivantes et les nommer. Visualiser leurs structures en 3D (sans passer en 3D viewer).

Astuce : Pour faire des doubles liaisons, il suffit de créer un liaison simple puis de cliquer dessus, elle deviendra double et les atomes d'hydrogène en trop seront éliminés

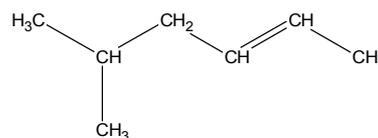


EXERCICE 2

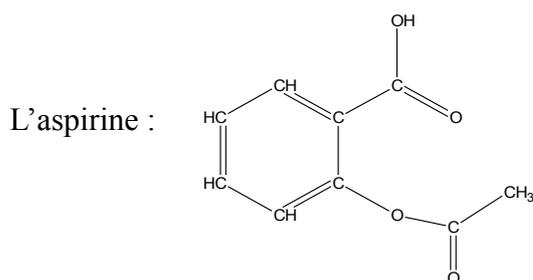
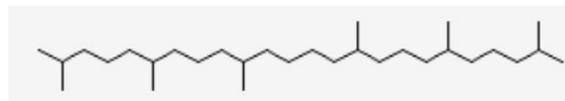
Représenter à tour de rôle chacune des molécules suivantes en **3D viewer** en modèle éclaté et en rotation :



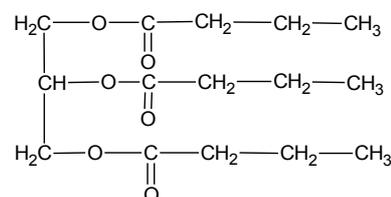
5-méthylhex-2-ène



Perhydrosqualène : $C_{30}H_{62}$ (2,6,10,15,19,23-hexamétyltétracosane)



Butyriane



L'oléine (huile d'olive):

