

MODE D'EMPLOI DU LOGICIEL CHEMSKETCH

Chemsketch est un logiciel gratuit (pour son usage académique) pour éditer et visualiser des formules moléculaires. Chemsketch permet non seulement de construire des molécules, de la plus simple à la plus compliquée, mais met également à disposition nombre d'outils d'analyse de ces molécules :

- Visualisation facile des molécules en 3D
- Obtenir le nom d'une molécule organique
- Obtenir des informations sur les propriétés physico-chimique de la molécule

Les structures construites sont facilement exportables par « copier/coller » dans tout logiciel acceptant les images (Suite Office, Open Office, Flash...) Le logiciel est en anglais, mais reste d'une utilisation très intuitive...

Télécharger ChemSketch :

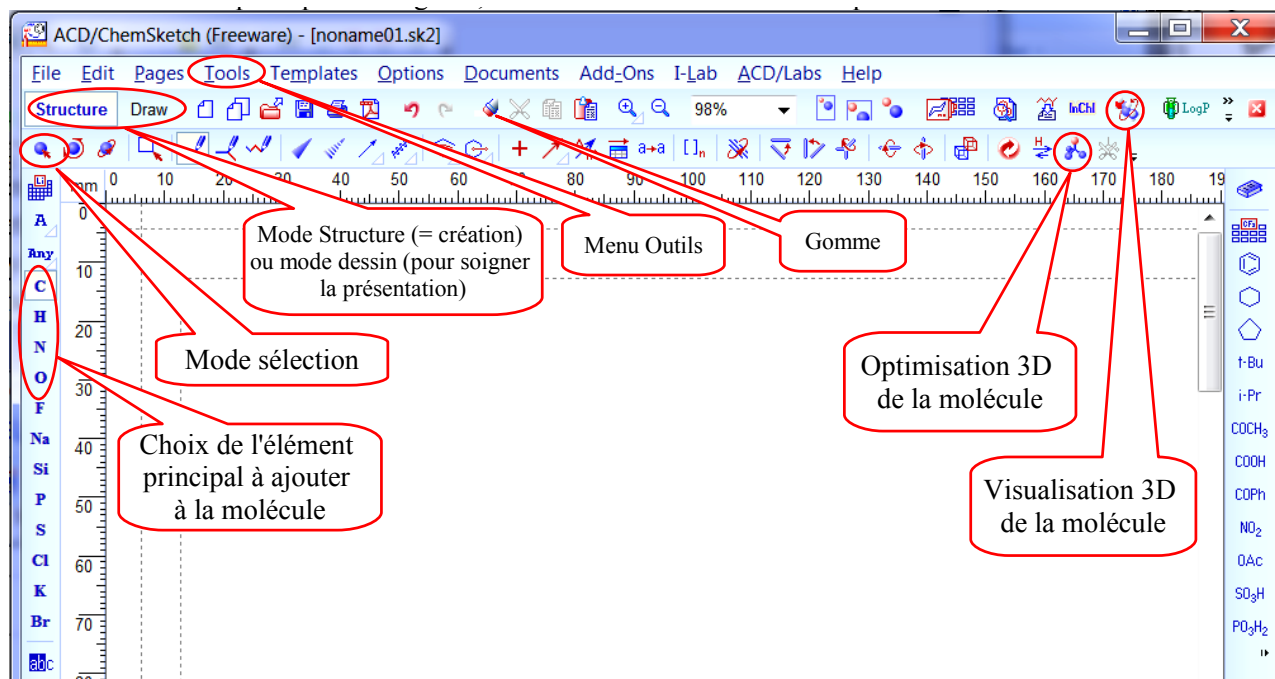
<http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html>

Guide animé accessible à cette adresse :

<http://sciences-physiques.tice.ac-orleans-tours.fr/moodle/file.php/61/ressources/sante/pages-html/tutoriel-chemsketch/index.html>

Interface

Lancer le logiciel ChemSketch (menu démarrer ACDLABS ChemSketch ou icône ? du bureau) attention au démarrage il faut cliquer sur OK et non sur les autres boutons qui provoque une connexion sur le site de l'éditeur afin d'acquérir la version payante du logiciel. Voici la fenêtre principale du logiciel, les boutons et commandes les plus utiles ont été entourés.



Construction d'une molécule simple

- Placer successivement les différents atomes (autres que H) en cliquant sur le symbole correspondant dans la barre de gauche. Par défaut, quand on sélectionne un atome dans la partie gauche de l'écran, le logiciel forme des liaisons entre cet atome et des atomes d'hydrogène.
- Relier les groupements en maintenant la touche correspondante enfoncée entre deux groupements.
- On peut aussi double-cliquer sur CH_4 par exemple, et tirer plusieurs fois, pour obtenir enfin la molécule désirée.
- Pour pouvoir déplacer une formule brute, il faut cliquer sur l'icône « select/move »
- Pour effacer une molécule, soit vous la sélectionnez comme précédemment puis soit vous cliquez sur la touche « supprime » du clavier soit vous utiliser l'icône de gomme.
- Vous pouvez utiliser le bouton « Generate Name For structure » pour nommer les molécules que vous dessinez.
- L'outil « Tools » « Clean structure » permet ensuite de redresser la molécule. Afin de respecter un peu mieux les répulsions entre les doublets électroniques.
- Deux icônes : « Set bond horizontally » et « Set bond vertically » permettent de faire tourner la molécule. De même l'icône « Select/resize/rotate ».
- Pour faire des doubles liaisons, il suffit de cliquer sur une simple liaison, elle deviendra double et les atomes d'hydrogène en trop seront éliminés.
- Sauvegarder le fichier Chemsketch pour une utilisation ultérieure.

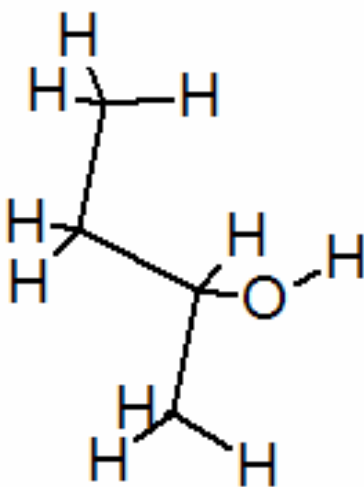


FIGURE 1 – Formule développée du butan-2-ol

Visualisation en 3D

- Pour visualiser la molécule en 3 dimensions, il faut passer dans le module Show3D, accessible normalement par le menu ACD/Labs.
- Ce module permet de visualiser la molécule sous différents aspects, de la faire pivoter, de mesurer les longueurs des liaisons et les angles.
- Ne pas oublier d'optimiser votre molécule pour le 3D (3D optimization).
- Plusieurs icônes sont ensuite disponibles : « Balls ans sticks » qui permet de faire apparaître les liaisons et les atomes. « Autorotate » qui permet de faire tourner la molécule toute seule dans l'espace.

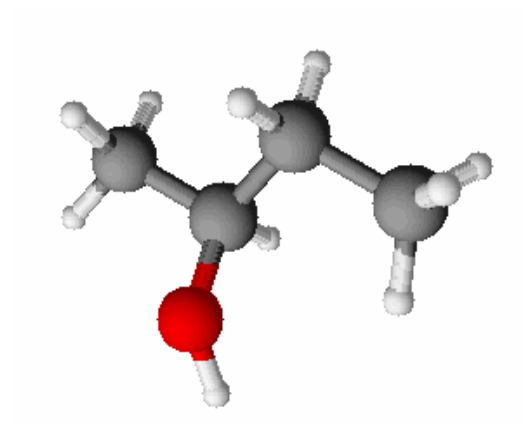


FIGURE 2 – Formule 3D du butan-2-ol