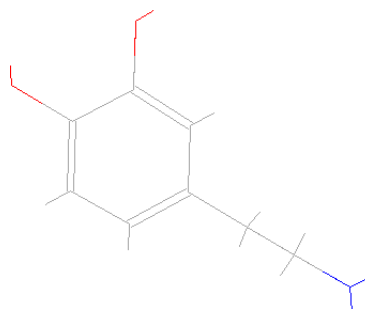
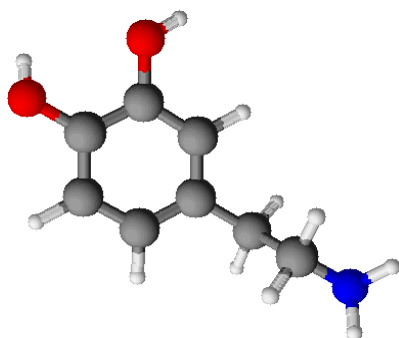


L'exemple utilisé dans cette fiche est la molécule de dopamine.

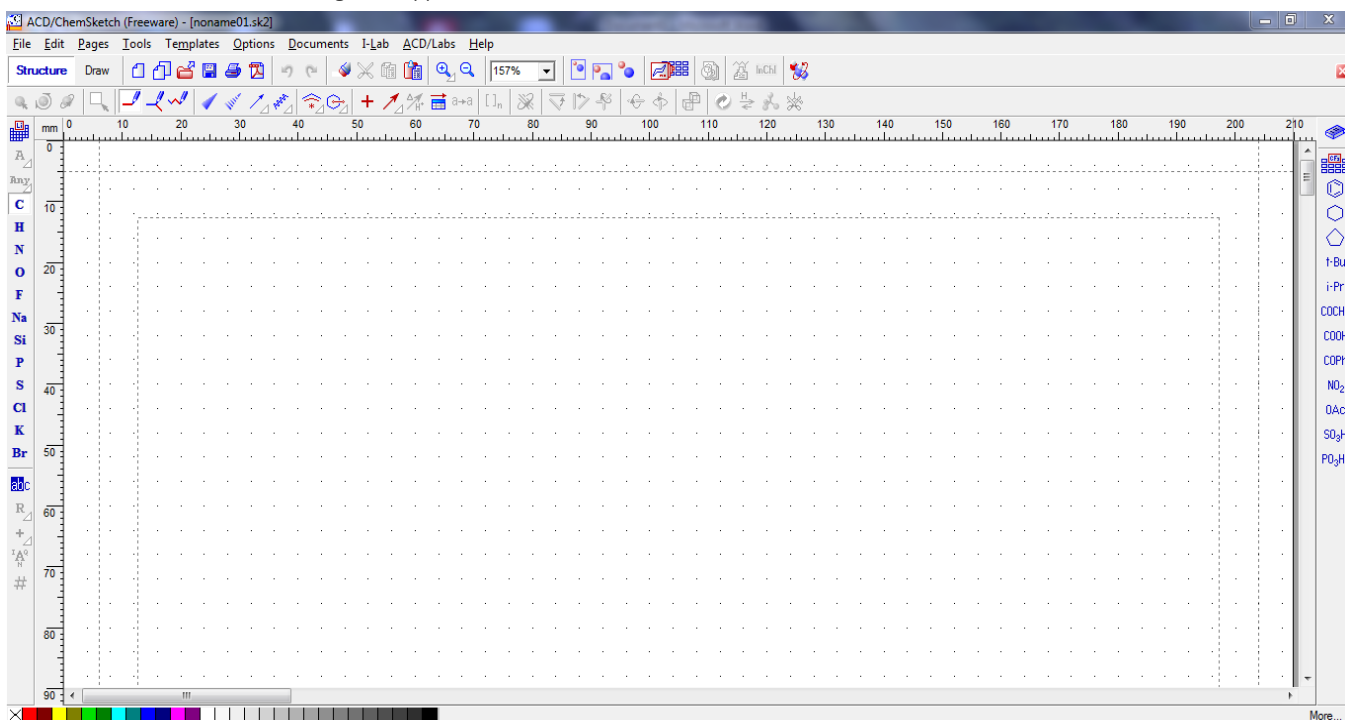
Partie. I : Création de la molécule

Molécule de dopamine :

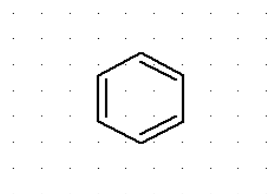
Formule brute : $C_8H_{11}NO_2$



1. Ouvrir le logiciel ChemSketch présent sur le bureau.
2. L'interface ci-dessous du logiciel apparaît

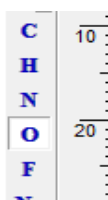


3. Commencer à créer la molécule en introduisant du cycle de carbone situé en haut à droite de la fenêtre

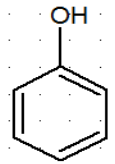


4. Introduire comme suit les deux liaisons — OH

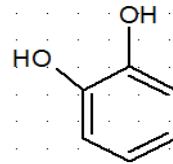
➤ Cliquer sur l'élément oxygène O



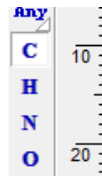
➤ Se positionner avec la souris sur le carbone qui porte la liaison OH, tirer plus loin et lâcher



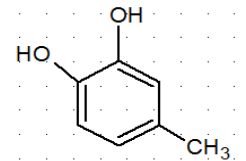
➤ Faites de même pour la deuxième liaison OH.



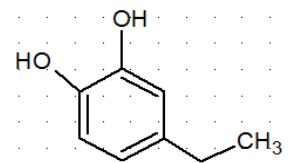
5. Choisit l'élément carbone C



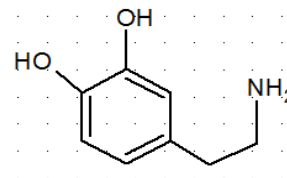
6. Se positionner sur le carbone qui porte la chaîne des deux carbones, tirer plus loin, lâcher. Faites de même pour le deuxième carbone.



7. Choisir l'élément azote N

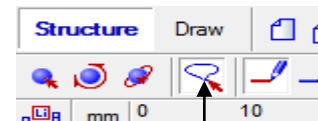


8. Se positionner sur le dernier carbone, tirer plus loin puis lâcher.

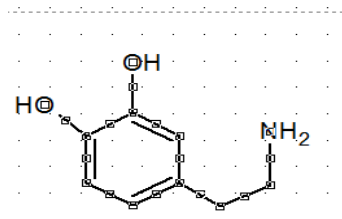


9. Pour faire apparaître les atomes de carbone :

➤ Cliquer sur l'outil « Lasso » et sélectionner toute la molécule.

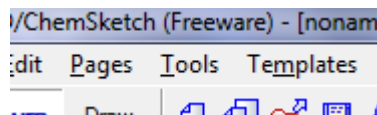


Lasso

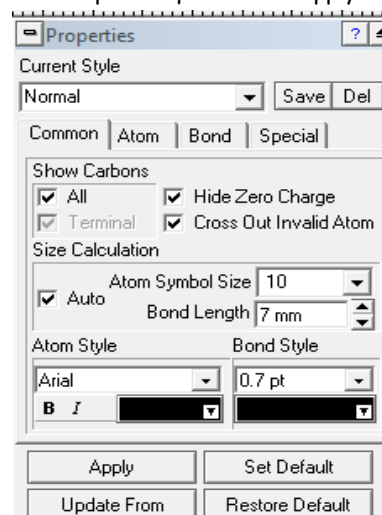
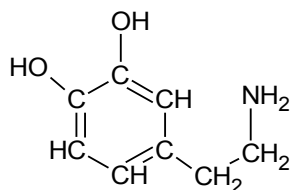


10. Utiliser l'outil « Tools » ensuite « Structure Properties ».

Sur la fenêtre qui s'ouvre, à « Show carbons » cocher la case « All » puis cliquer sur « Apply »



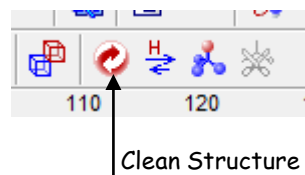
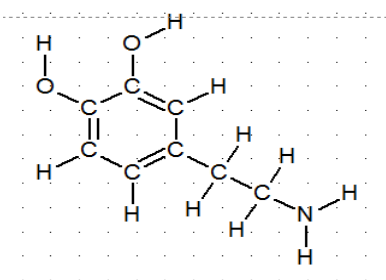
La structure semi-développée suivante apparaît :



11. Pour faire apparaître les liaisons avec les atomes d'hydrogène (Structure développée), choisir l'outil « Tools » suivi de « Add Explicit Hydrogens », ou « Remove Explicit Hydrogens » ne pas les représenter (Structure semi-développée)

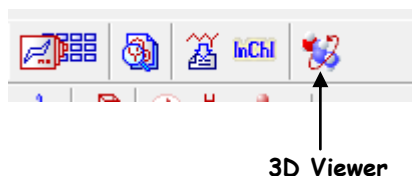
Améliorer éventuellement l'affichage avec l'outil « Clean Structure »

La structure développée apparaît :

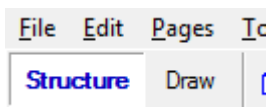


Partie. II : Visualisation de la molécule en 3D

Pour visualiser la molécule en 3D, on utilise l'outil « 3D Viewer ». Il est conseillé de partir de la structure développée.

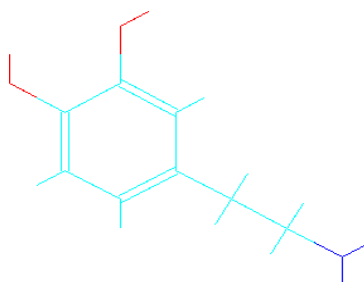


1. Cliquer sur l'outil « Draw ».



2. Cliquer sur « 3D Viewer ».

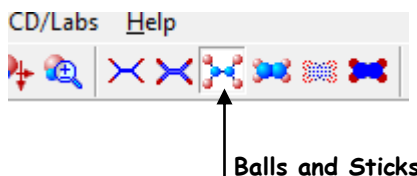
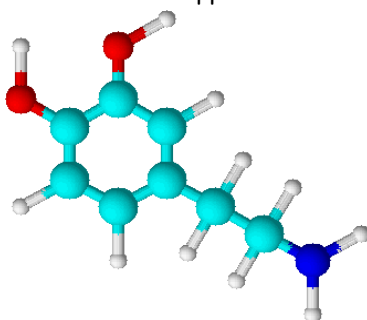
La structure suivante apparaît :



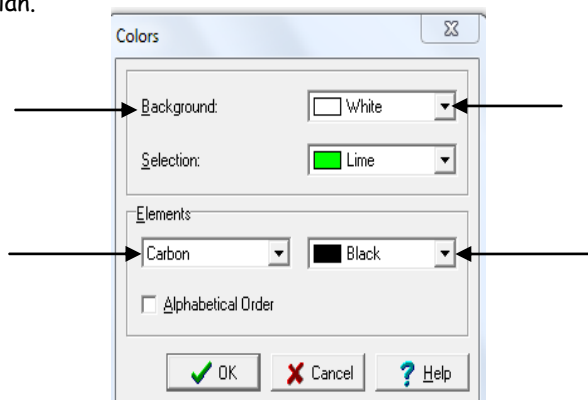
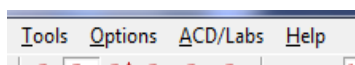
3. Quelques réglages s'imposent :

- Basculer en mode « Balls and Sticks »

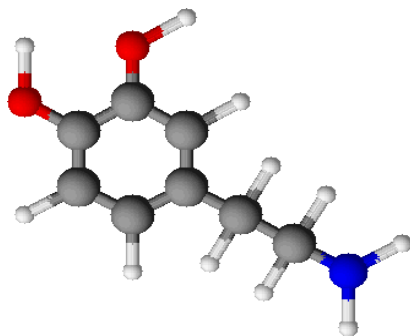
La structure suivante apparaît :



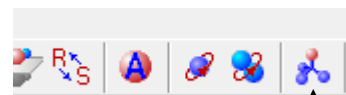
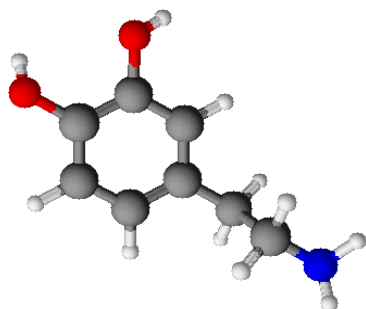
- Faire apparaître les atomes de carbone en noir à l'aide de l'outil « Options » suivi de « Colors », et éventuellement choisir la couleur de l'arrière plan.



La structure suivante apparaît :



- Utiliser l'outil « 3D Optimization » pour améliorer la visualisation
La structure optimisée suivante apparaît :



3D Optimization

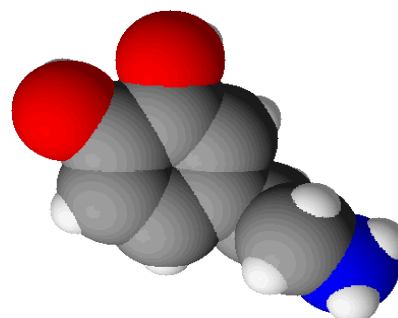
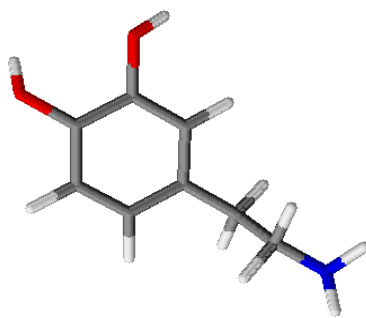
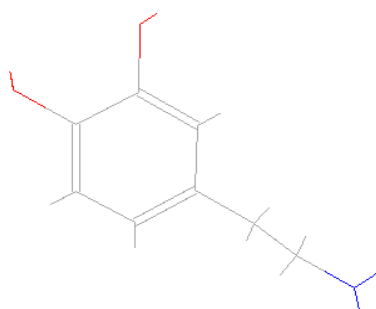
- Plusieurs autres options de visualisation sont offertes par le logiciel :



Types de liaisons

Liaisons

Modèle compact



- L'outil « Auto Rotate » permet de faire tourner automatiquement la molécule.



Auto Rotate