

## Seconde TP Chimie

**T.P. – Construction et visualisation de molécules.**

Objectif :

- Utilisation de logiciels de construction et visualisation de molécules,
- Appliquer les règles de l'octet et du duet afin d'expliquer les structures de quelques molécules,
- Construire les modèles de Lewis des molécules simples.

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

C'est un logiciel gratuit (Freeware) en anglais qui permet de dessiner des molécules et de les visualiser en 3d. On peut le télécharger à l'adresse <http://www.acdlabs.com> (8,5Mo), pour ceux qui n'ont pas d'accès à l'Internet un CDROM avec différent outils utiles est disponible.

- Ouvrir la page web contenant le mode d'emploi simplifié, (Intranet Physique chimie Mode d'emploi ChemSketch).
- Copier le fichier structures\_molecules.sk2 situé sur le serveur softs P:\secondes dans votre dossier personnel.

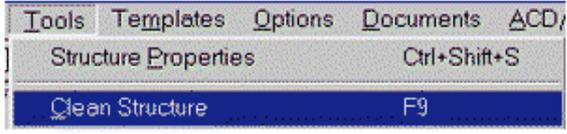


- Lancer le logiciel (icône du bureau), attention au démarrage il faut cliquer sur **OK** et non sur les autres boutons qui provoque une connexion sur le site de l'éditeur afin d'acquérir la version payante du logiciel. Ouvrir le fichier précédent, la molécule d'eau est déjà construite, elle servira de modèle.



- Construire les premières molécules, au départ le logiciel est en mode Structure c'est le mode qui permet de construire les molécules en respectant les règles de l'octet et du duet, attention par défaut c'est l'élément C carbone qui est activé chaque clic va construire une molécule de méthane ! Pour construire une molécule avec plusieurs atomes de carbone il suffit de maintenir le bouton gauche enfoncé et de relâcher pour placer un nouvel atome.

- Boutons et menus utiles :

Mode Structure	Mode Draw
 Les 3 icônes du bas permettent de choisir la <u>S</u> élection et <u>t</u> ype de <u>s</u> élection	 Cliquer sur  pour modifier le texte.
 Gomme (atome par atome)	 Gomme les objets avec pointage à la souris
 (3D <u>O</u> ptimization) optimisation 3d  ( <u>G</u> enerate <u>N</u> ame from <u>S</u> tructure) génère le nom.	 Ces boutons permettent d'aligner, de grouper, de mettre en avant ou en arrière les objets l'info bulle donne des précisions.
 Clean Structure permet de créer la formule développée à partir de l'optimisation 3d	 Cette palette flottante très utile pour dessiner les traits est obtenue par le menu <u>T</u> ools <u>P</u> en <u>S</u> tyle Panel. Elle permet de régler la couleur, l'épaisseur des traits il faut cliquer sur <u>A</u> pply pour appliquer les réglages à l'objet sélectionné.

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 :

- En utilisant l'exemple de la molécule d'eau construire les molécules de méthane, d'ammoniac et de chlorure d'hydrogène.

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 5 fois chaque molécule ensuite les 3 dernières serviront à créer le modèle de Lewis et 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 le modèle de Lewis :

Sélectionner la molécule, cliquer sur l'icône  (3D Optimization), dans le menu Tools choisir Clean Structure, la formule développée plane apparaît, il faut passer en mode Draw pour dessiner les doublets non liants en rouge de manière à bien les distinguer des doublets liants (dessinés automatiquement par le logiciel puisque ce sont les liaisons).

- Pour obtenir une représentation en 3d :

Sélectionner la molécule à représenter, cliquer sur l'icône  (3D Optimization) et copier dans le visualiseur avec le bouton Copy to 3D situé en bas. La première fois il faut Lancer le 3D viewer (Menu ACD/labs 3D viewer).

Le visualiseur permet différents types de représentations (il faut utiliser les boutons), avec la souris faire tourner la molécule de manière à voir tous les atomes. Il faut refaire une optimisation avec le bouton  du visualiseur. Avant de copier l'image il faut choisir un fond blanc (Menu Options Colors) et les couleurs standard pour les atomes : (C noir, H blanc qui sera visible tout de même, O rouge N bleu Cl vert). Coller l'image dans le document à côté des formules, il faut réduire la taille de cette image à l'aide des poignées habituelles.

- Construire de la même manière les formules et les modèles de la molécule de propane C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>.

- 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. Construire les modèles éclatés ou compacts.

- Soigner la présentation et imprimer la page après avoir précisé vos noms et prénoms.
-