

Les molécules et leurs représentations

1. Reconnaître des molécules à partir de leur modèle éclaté :

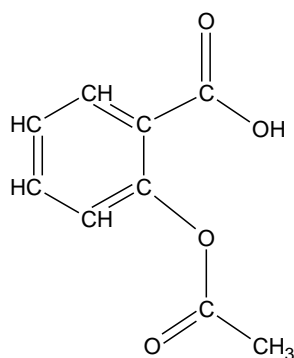
Pour chacune des molécules du fichier « molecules » accessible dans le répertoire « classe » :

- Etablir la formule brute de la molécule
- Etablir sa formule semi-développée
- Classifier la molécule dans la famille correspondante et entourer les éventuels groupes d'atomes qui la caractérisent.

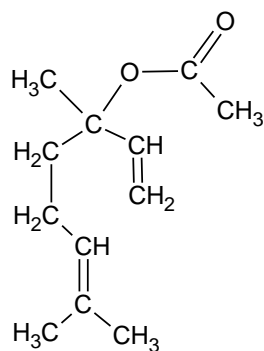
Les résultats sont attendus sous forme de tableau : (utiliser la page en mode « paysage » :

Nom	Formule brute	Formule semi-développée	Famille

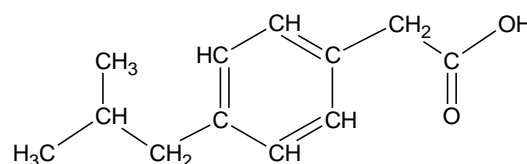
2. Utiliser un logiciel pour représenter des molécules en 3 dimensions à partir de leur formule développée :



Aspirine



Acétate de linalyle



ibuprofène

Construire le modèle éclaté des molécules ci-dessus en utilisant le logiciel ChemsSketch (suivre le protocole ci-dessous)

<ul style="list-style-type: none"> - Dans le menu <i>Tools</i> , sélectionner la commande <i>Structure Properties</i>. Pour voir les atomes C dans les formules, cochez la case All de la zone Show Carbons de l'onglet Common. - Cliquer sur le bouton Set Default pour appliquer ce réglage à toutes les formules qui seront dorénavant dessinées.
<ul style="list-style-type: none"> - Sélectionner l'élément chimique souhaité à gauche de l'écran.
<ul style="list-style-type: none"> - Dessiner le squelette de la molécule en cliquant sur la page blanche aux positions souhaitées.
<ul style="list-style-type: none"> - Dans le menu « Tools », choisir « Clean Structure » - Dans le menu « Tools », choisir « 3D Structure Optimization »
<ul style="list-style-type: none"> - Visualiser la molécule en 3D en cliquant sur l'icône
<ul style="list-style-type: none"> - modifier la manière de visualiser la molécule : choisir parmi <i>Balls and Sticks</i> et <i>Spacefill</i>
<ul style="list-style-type: none"> - Cliquer sur l'icône pour faire tourner manuellement la molécule avec la souris
<ul style="list-style-type: none"> - mesurer les angles en utilisant l'icône
<p>Pour créer une nouvelle représentation :</p>
<ul style="list-style-type: none"> - Revenir à la représentation 2D ChemSk
<ul style="list-style-type: none"> - Ouvrir une nouvelle page en cliquant sur l'icône <i>New Page</i> pour pouvoir travailler sur une nouvelle molécule, tout en conservant la précédente.