



Ouvrir le logiciel CHEMSKETCH qui permettra de construire des molécules en 3D
Ouvrir le fichier Excel p:\physique\seconde\molecule.xls qui permettra de construire un catalogue de molécule et de l'imprimer

Travail

Dans chemsketch :

Réglage : Tools/structure properties Show carbon all case doit être cochée :



1 Construction de la molécule de chlorure d'Hydrogène HCl :

Le logiciel doit être en mode Structure

Structure Draw

- Choisir l'élément Cl à gauche. (le logiciel complète automatiquement avec des hydrogène)
- Pour voir la molécule en 3D : Tools / 3D Structure optimisation.





Passer en mode Draw

- Utiliser l'outil trait  pour dessiner les Doublets libres du Chlore (voir cours)
- Cliquer sur  puis sélectionner l'ensemble du schéma de la molécule.
- Edit/Copy pour copier le schéma de la molécule

Dans Excel : édition/collage spécial/image

- Placer l'image dans la bonne case (formule développée)

Retour dans Chems sketch :


- ACD/LABS 3D Viewer pour voir et manipuler la molécule en 3D
- On peut la visualiser sous différente forme :  Choisir le 4^{ème} (modèle compact).
- Optimisation 3D de la structure : 
- Mesures :
 - Distance entre les atomes :  puis cliquer sur les deux atomes. Le résultat de la mesure apparaît en bas à gauche mais en Å (angström) Ecrire ce résultat dans Excel mais en nm (1 Å = 0.1 nm)
- Réglage du fond :  background color White
- Edit Copy . Puis édition/collage spécial dans EXCEL dans la case modèle. Compléter aussi la case formule brute et géométrie.

2 Les autres molécules

Fermer la fenêtre dans chemsketch puis file / close sans enregistrer

Même travail pour les molécules suivantes : eau, ammoniac, méthane, dioxyde de carbone, éthane, éthylène et acétylène.(voir cours pour les formules)

Remarques :

1. pour construire une double liaison il faut cliquer sur la simple liaison quand on est en mode structure
2. Pour mesurer un angle de liaison : dans le viewer 3D :  puis cliquer sur les trois atomes concerné. Ecrire ce résultat dans Excel.

3- Impression

Quand c'est terminé imprimer la page Excel

4- Conclusion

- Comment peut-on justifier la forme tétraédrique du méthane, pyramidale de l'ammoniac et coudée de l'eau
- Dans le cas de l'éthane, l'éthylène et l'acétylène, comparer la distance entre les atomes de carbone