

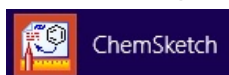
Utiliser ChemsSketch

A. Télécharger ChemsSketch®

1. Taper dans un moteur de recherches « télécharger ChemsSketch » puis, si vous utilisez un système d'exploitation Windows, télécharger le fichier auto-exécutable du type chemsk12.exe.
2. Lancer l'installation (accepter les propositions, si vous n'êtes pas spécialiste) : elle dure moins d'une minute. Lorsque le logiciel ChemsSketch® est installé, le programme peut être lancé depuis son raccourci dans la liste des programmes.

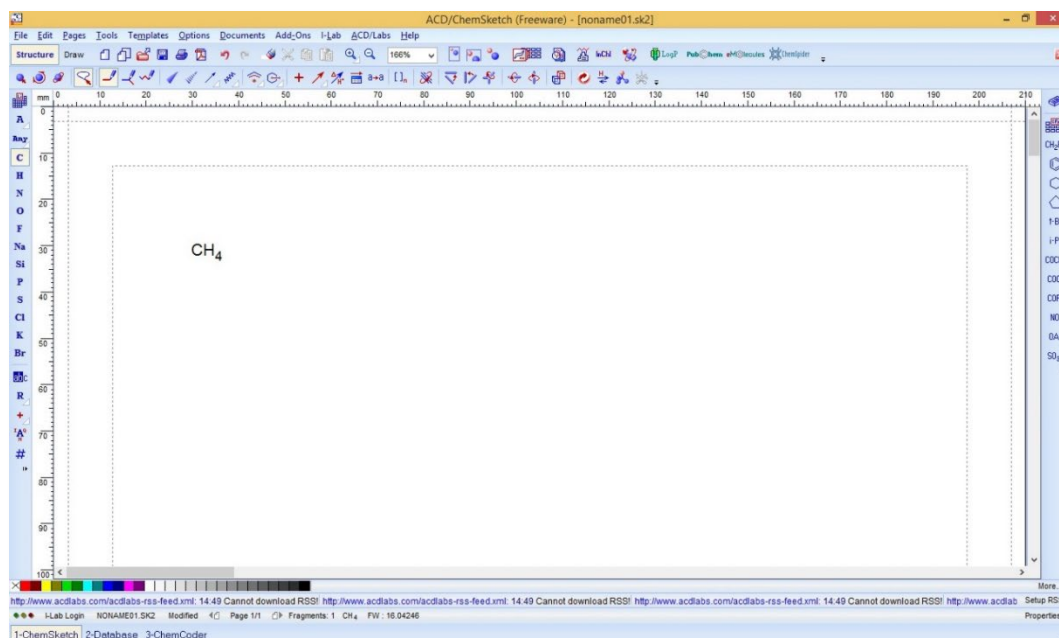
B. Prise en mains de ChemsSketch®

1. Lancer le logiciel :



Il est rédigé en anglais.

Une fenêtre plein écran s'ouvre et une petite fenêtre supplémentaire vous invite à vous enregistrer. Vous pouvez le faire, mais c'est facultatif, il est possible de fermer cette fenêtre sans s'enregistrer.



Utiliser ChemsSketch

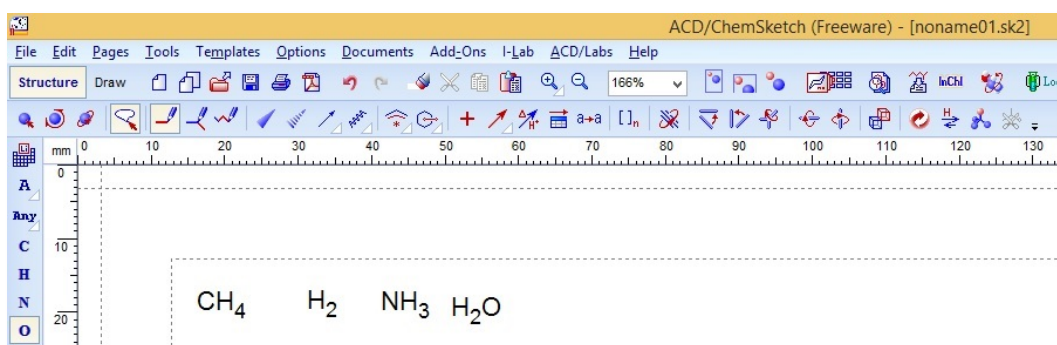
C. Construction et manipulation de molécules hydrogénées à un atome central

1. Sélectionner un atome en cliquant sur la lettre qui le désigne dans la colonne de gauche. (Par défaut, c'est l'atome de carbone qui est sélectionné.)

2. Cliquer en un point quelconque de la fenêtre d'affichage. La formule brute de la molécule formée de l'atome, entouré d'atomes d'hydrogène (en respectant la règle des deux ou huit électrons) s'affiche. Ainsi :

- sélectionner C et cliquer en un point quelconque de la fenêtre ;
- faire de même avec H ; • faire de même avec N ; • faire de même avec O.

On obtient :



3. On peut travailler sur une de ces molécules en la sélectionnant. On a accès à la flèche de la souris

en cliquant sur l'icône  située au-dessus de la colonne des atomes (en posant la souris dessus, sans cliquer, « Select/move » s'affiche). Après avoir cliqué, on dessine un cadre autour de la molécule choisie, elle apparaît entourée d'un rectangle à 9 points. On sélectionne par exemple la molécule de méthane (ci-contre).



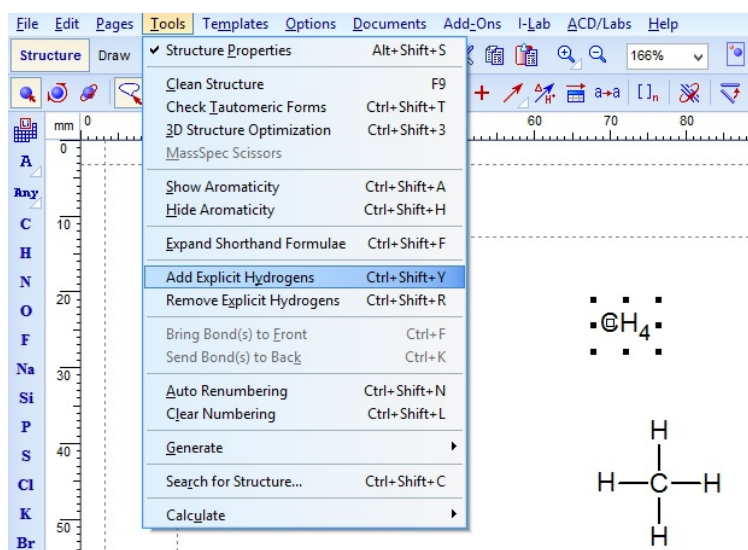
4. La molécule étant sélectionnée, on peut placer le cadre dans un tampon en cliquant sur Ctrl C, puis exporter ce cadre vers un fichier d'un autre type, un fichier texte en particulier en cliquant sur Ctrl V :



5. La molécule étant sélectionnée, on peut la déplacer grâce aux flèches du clavier, la copier, la supprimer.

6. La molécule étant sélectionnée, on peut faire apparaître sa formule développée en cliquant sur :

Tools > Add Explicit Hydrogens

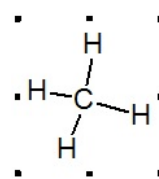


Utiliser Chems sketch

7. Pour avoir accès aux représentations en trois dimensions (3D), il vaut mieux repartir de la formule brute ou semi-développée d'une molécule. Sélectionner cette molécule et



cliquer sur l'icône à droite au-dessus de la fenêtre d'affichage (en posant la souris dessus, sans cliquer, « 3D Optimization » s'affiche). La molécule apparaît alors sous forme développée, en perspective, mais toujours en noir sur fond blanc, dans un cadre rectangulaire à 9 points.

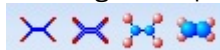


En posant la souris sur ce cadre, sans cliquer, deux flèches courbes entrelacées s'affichent. Si on clique en maintenant le doigt appuyé et qu'on fait bouger la souris, on fait tourner la molécule pour mieux la voir dans l'espace.



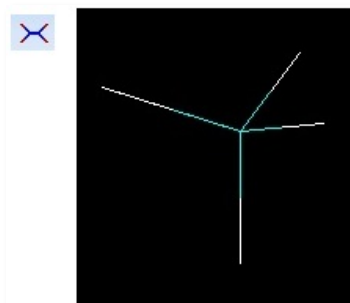
8. Pour exporter la molécule dans l'environnement 3D de Chems sketch®, cliquer sur l'icône située juste au-dessus de l'icône précédente d'affichage (en posant la souris dessus, sans cliquer, « 3D Viewer » s'affiche). Une nouvelle fenêtre s'ouvre, la zone d'affichage est sur fond noir, et la molécule apparaît en modèle 3D, les atomes apparaissant avec des couleurs prédéfinies, bleu ciel pour C, blanc pour H, bleu foncé pour N, rouge pour O.

Quatre modes d'affichage sont possibles, on passe de l'un à l'autre en cliquant sur l'une des icônes

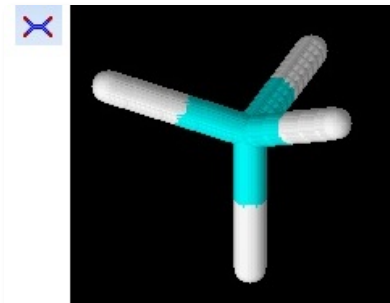


suivantes :

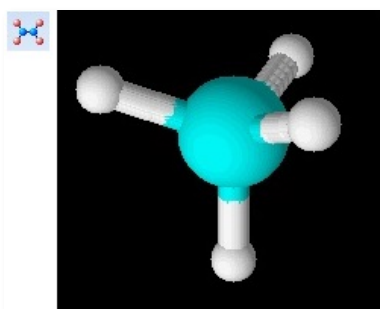
● Wireframe :



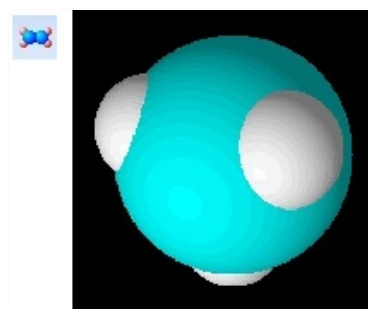
● Sticks :



● Balls and Sticks :



● Spacefill :



Si on clique sur la molécule en maintenant le doigt appuyé et qu'on fait bouger la souris, on fait tourner la molécule pour mieux la voir dans l'espace.

9. On revient à l'environnement précédent en fermant la fenêtre 3D (croix en haut à droite) ou en cliquant sur 1-ChemSketch en bas à gauche.

10. La gestion de sauvegarde et d'ouverture des fichiers générés par Chems sketch® est conforme aux règles habituelles. On peut ainsi sauver le fichier en cours en cliquant sur :

File > Save As > nom du fichier.sk2

Utiliser Chems sketch

D. Construction et manipulation de molécules plus complexes

Un réglage préliminaire de l'affichage est conseillé, pour éviter les atomes « fantômes » :

- Cliquer sur **tools > Structure properties**.

Une fenêtre s'affiche.

- Cocher, si ce n'est pas fait par défaut, dans l'onglet **Common**,

Show Carbons

☐ All

- Et cliquer sur **Set Default**.

1. Sélectionner un atome en cliquant sur la lettre qui le désigne dans la colonne de gauche (par défaut, c'est l'atome de carbone qui est sélectionné). Cliquer en un point quelconque de la fenêtre d'affichage. La molécule hydrogénée apparaît, comme dans la **partie B**.

2. Pour lier l'atome choisi à un deuxième atome, sélectionner cet atome en cliquant sur la lettre qui le désigne dans la colonne de gauche (par défaut, c'est l'atome de carbone qui est sélectionné). Cliquer sur le premier atome, maintenir le doigt appuyé et déplacer la souris pour former la liaison, lâcher le doigt, la molécule apparaît, le logiciel calculant et affichant systématiquement le nombre d'atomes d'hydrogène nécessaires pour compléter la molécule selon la règle des huit électrons.

3. Pour créer une double liaison entre deux atomes, placer la souris au-dessus de la liaison, cliquer une fois, la double liaison est créée, le nombre d'atomes d'hydrogène est automatiquement calculé et affiché.

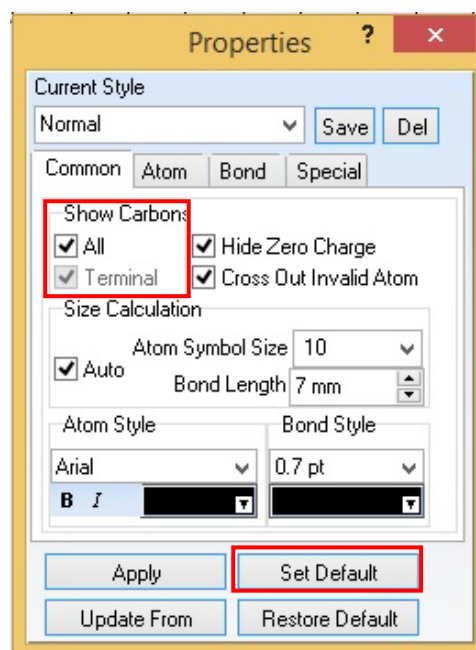
4. Pour obtenir la formule topologique à partir d'une molécule :

- sélectionner la molécule ;

- faire disparaître les atomes d'hydrogène en cliquant sur **Remove Explicit Hydrogens** dans l'onglet **Tools**;

- cliquer sur **tools > Structure properties**. Une fenêtre s'affiche.

- décocher (cliquer jusqu'à ce que le carré soit vide) **Show Carbon All** et **Terminal** puis cliquer sur **Apply** : on obtient ainsi la formule topologique de la molécule.

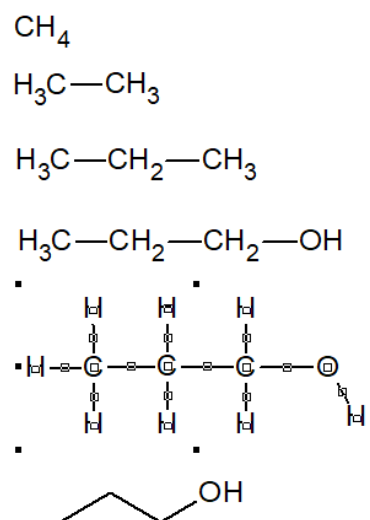


Utiliser Chems sketch

Exemple : construction et manipulation d'un alcool

Construisons par exemple la molécule de propan-1-ol.

- Cliquer sur C.
- Cliquer en un point quelconque de la fenêtre d'affichage : CH₄ s'affiche.
- Il est inutile de cliquer à nouveau sur C, déjà sélectionné. Cliquer sur le C qui est affiché, maintenir le doigt appuyé, déplacer la souris vers la droite, lâcher le doigt, H₃C-CH₃ s'affiche.
- Il est inutile de cliquer à nouveau sur C, déjà sélectionné. Cliquer sur le deuxième C affiché, maintenir le doigt appuyé, déplacer la souris vers la droite, lâcher le doigt, H₃C-CH₂-CH₃ s'affiche.
- Cliquer sur O dans la colonne de gauche.
- Cliquer sur le troisième C affiché, maintenir le doigt appuyé, déplacer la souris vers la droite, lâcher le doigt, H₃C-CH₂-CH₂-OH s'affiche : on a construit la molécule de propan-1-ol, sa formule semi-développée est affichée dans la fenêtre.



- Pour obtenir sa formule développée, cliquer sur l'icône  (Select/Move), sélectionner la molécule complète : elle apparaît dans un rectangle à 9 points. Cliquer sur **Tools > Add Explicit Hydrogens** : la formule développée apparaît.

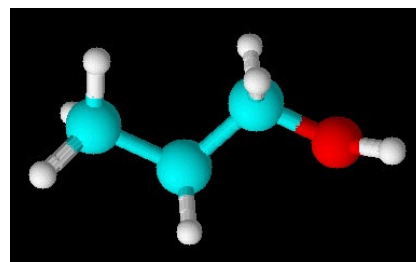
- Pour obtenir sa formule topologique, cliquer sur l'icône  (Select/Move), sélectionner la molécule complète : elle apparaît dans un rectangle à 9 points. Cliquer sur **Tools > Structure properties**. Décocher **Show Carbon All** et **Terminal** puis cliquer sur **Apply**.

Cliquer sur **Clean structure**  pour faire apparaître les sommets.

- La molécule (en formule semi-développée) étant sélectionnée, cliquer sur l'icône  (3D Optimization). La molécule apparaît alors sous forme développée, en perspective.

- Pour exporter la molécule dans l'environnement 3D de

Chems sketch®, cliquer sur l'icône  (3D Viewer). Une nouvelle fenêtre s'ouvre, la zone d'affichage est sur fond noir, et la molécule apparaît en modèle 3D, les atomes apparaissant avec les couleurs prédéfinies, bleu ciel pour C, blanc pour H, rouge pour O. En sélectionnant le mode d'affichage Balls and Sticks, on obtient le rendu ci-contre.



Utiliser Chems sketch

Exemple : construction et manipulation d'un acide carboxylique

Construisons par exemple la molécule d'acide 2-méthyl-butanoïque.

- Cliquer sur C.
- Cliquer en un point quelconque de la fenêtre d'affichage, CH₄ s'affiche.
- Cliquer sur le C qui est affiché, maintenir le doigt appuyé, déplacer la souris vers la droite, lâcher le doigt.
- Cliquer sur le deuxième C affiché, maintenir le doigt appuyé, déplacer la souris vers la droite, lâcher le doigt.
- Cliquer sur le troisième C affiché, maintenir le doigt appuyé, déplacer la souris vers la droite, lâcher le doigt.
- Cliquer à nouveau sur le troisième C affiché, maintenir le doigt appuyé, déplacer la souris vers le haut, lâcher le doigt. On a fini la construction de la chaîne carbonée ramifiée.
- Cliquer sur O dans la colonne de gauche.
- Cliquer sur le quatrième C affiché, maintenir le doigt appuyé, déplacer la souris vers la droite, lâcher le doigt (-OH s'affiche).
- Cliquer à nouveau sur le quatrième C affiché, maintenir le doigt appuyé, déplacer la souris vers le bas, lâcher le doigt (=O s'affiche). Cliquer sur la liaison entre C et O, elle devient double (C=O s'affiche, le groupe carboxyle est créé). On a construit la molécule, sa formule semi-développée est affichée dans la fenêtre.

- Pour obtenir sa formule topologique, cliquer sur l'icône  (Select/Move), sélectionner la molécule complète : elle apparaît dans un rectangle à 9 points.

Cliquer sur **Tools > Structure properties**.

Décocher **Show Carbon All** et **Terminal** puis cliquer sur **Apply**.

Cliquer sur **Clean structure**  pour faire apparaître les sommets.

- En cliquant sur l'icône  (3D Optimization) puis sur

l'icône  (3D Viewer) et en sélectionnant le mode d'affichage Balls and Sticks, on obtient le rendu ci-contre.

