

Logiciels de modélisation - Découverte

Plan de travail de la séance

Les logiciels.....	2
Prise en main : représentation 2D des molécules	2
Isisdraw	2
Chemsketch	2
Symyx Draw.....	3
Prise en main : représentation 3D des molécules	3
Isisdraw	3
Chemsketch	4
Prise en main : représentation d'un mécanisme	5
Prise en main : représentation d'un schéma de montage	5
Exercices : utilisation de logiciels en chimie organique	6
Représentation de molécules	6
Utilisation des « templates »	6
Nom de molécules	6

*Lors de cette séance, tous les schémas demandés devront être insérés (et légendés)
sur un document word.*

Les logiciels

Les logiciels Isisdraw (gratuit, remplacé dernièrement par le logiciel Symyx draw, gratuit également), chemsketch (gratuit) et chemdraw (payant) sont des logiciels pouvant être utilisés pour réaliser (entre autre) des modélisations moléculaires.

Le but de ces séances est de prendre en main les logiciels chemsketch et Isisdraw, de représenter des molécules (en 2D et en 3D), des mécanismes, des schémas de montage (chimie organique et chimie analytique)

Prise en main : représentation 2D des molécules

Isisdraw

Le logiciel Isisdraw (moins puissant que chemsketch) est le plus simple à utiliser pour représenter les molécules en 2D, rapidement. Par défaut, il est configuré pour représenter les formules topologiques : il est cependant possible de faire apparaître tous les atomes si on le souhaite.

	- permet d'effacer une liaison ou un atome
	- permet d'insérer un hétéroatome
	- permet de créer des liaisons (en cliquant a nouveau, cela créé des liaisons doubles, puis triples)
	- permet de représenter des molécules en représentation de Cram
	- permet de représenter des longues chaines carbonées

Représenter les molécules suivantes avec Isisdraw (présenter les résultats dans un tableau avec le nom de la molécule correspondante) : propane, 2,3,4-trimethylhexane, méthylcyclohexane, tétradécane (alcane linéaire de formule $C_{14}H_{30}$), hexa-1,3,5-triène, N,N-diméthyléthanamine, benzaldéhyde, acide benzoïque, 1-méthylcyclopenta-1,3-diène.

Chemsketch

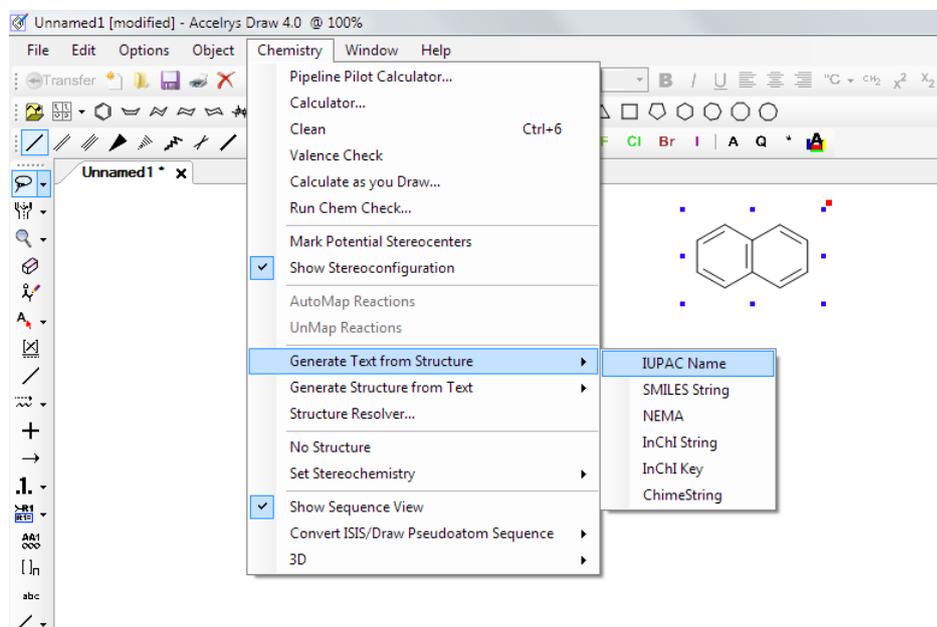
La représentation des molécules se fait en mode « Structure ». Découvrir comment créer des liaisons en cliquant sur les atomes à gauche (commencer par représenter des chaines carbonées).

Lorsque la représentation d'une molécule est terminée, la sélectionner et cliquer sur « Clean structure » (dans « tools » ou en raccourci, ou F9). Essayer de faire apparaître les atomes de carbone (masqués par défaut) dans « Tools », « Structure properties » : si la taille des atomes est trop grande, il est possible de diminuer la taille de police des atomes (ainsi que des chiffres mis en indice).

Représenter les molécules suivantes : méthanal, butane, 2-4, diméthyloctane, éthoxypropane, éthylène et benzène. Pour chacune de ces molécules, faire apparaître (grâce au logiciel) : le nom de la molécule, la formule brute, la masse molaire, la composition centésimale, l'indice de réfraction et la densité. Les résultats seront présentés dans un tableau.

Symyx Draw¹

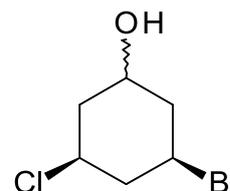
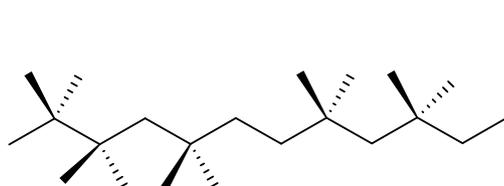
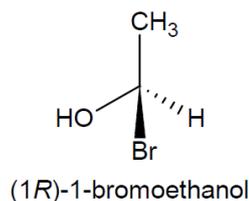
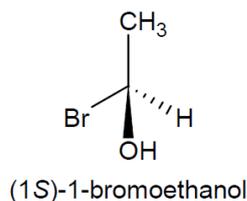
La version plus récente d'Isidraw se prend en main comme Isisdraw, mais ajoute également la possibilité de générer le nom d'une molécule et de dessiner une molécule en donnant son nom. Tout ceci se fait dans le menu « Chemistry », « Generate text from structure » (choisir IUPAC), ou l'inverse, « generate structure from text ».



Prise en main : représentation 3D des molécules

Isidraw

Le logiciel Isisdraw permet de réaliser des représentations de Cram. Représenter les molécules suivantes :



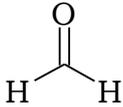
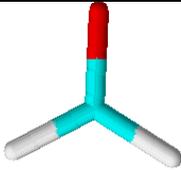
¹ Le logiciel, une fois installé, s'appelle « Symyx Draw » sur le raccourci, mais devient « Accelrys Draw » une fois le logiciel lancé.

Chemsketch

Le mode de représentation 3D est beaucoup plus complet sur chemsketch. Cliquer sur « ACD Lab », « 3D Viewer » pour charger le logiciel. Retourner sur chemsketch. Dessiner une molécule, puis la sélectionner, cliquer sur « clean structure », puis « 3D optimisation ». En bas de l'écran, cliquer sur « Copy to 3D » : chemsketch bascule sur le viewer 3D.

De nombreuses options de représentation peuvent être utilisées (*Wireframe* (fil de fer), *Sticks* (bâtons), *Ball and Sticks* (sphères et bâtons), *Spacefill* (sphères de Van der Waals), *Dots* (sphères de Van der Waals en pointillés). Représenter, dans un tableau, les molécules suivantes (une colonne avec le nom, une colonne avec la représentation 2D, une colonne avec la représentation 3D) :

Ethanol / Ethoxypropane / Dichlorométhane / C₃H₉N (amine secondaire) / Buta-1,3-diène / Acide 2-hydroxypropanoïque / Cyclohexane / 2-méthylcyclohexanol / Glucose / Benzophénone / Acétonitrile / C₂H₂Cl₂ / Cholestérol.

n°		Représentation 2D	Représentation 3D
1	CH ₂ O Formaldéhyde		

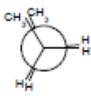
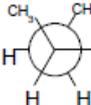
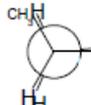
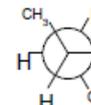
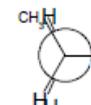
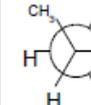
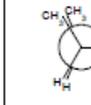
On prendra soin de choisir une représentation qui permette de bien voir la géométrie de la molécule.

L'outil de visualisation 3D permet également de mesurer des distances interatomiques, ainsi que des angles de liaisons.

Donner la valeur des longueurs de liaisons et celle des angles dans les molécules suivantes : éthanol, éthanal, éthylène, acétylène, PCI₃FBr. Justifier les valeurs obtenues.

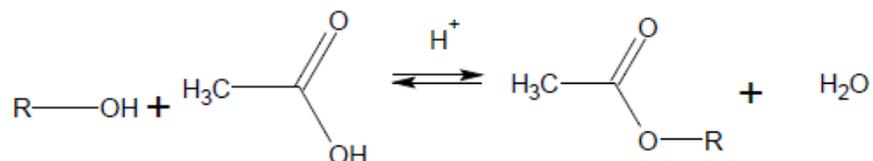
Autre représentation 3D : la représentation de Newman

Reproduire le tableau ci-dessous à l'aide de chemsketch (aller voir dans les « templates »)

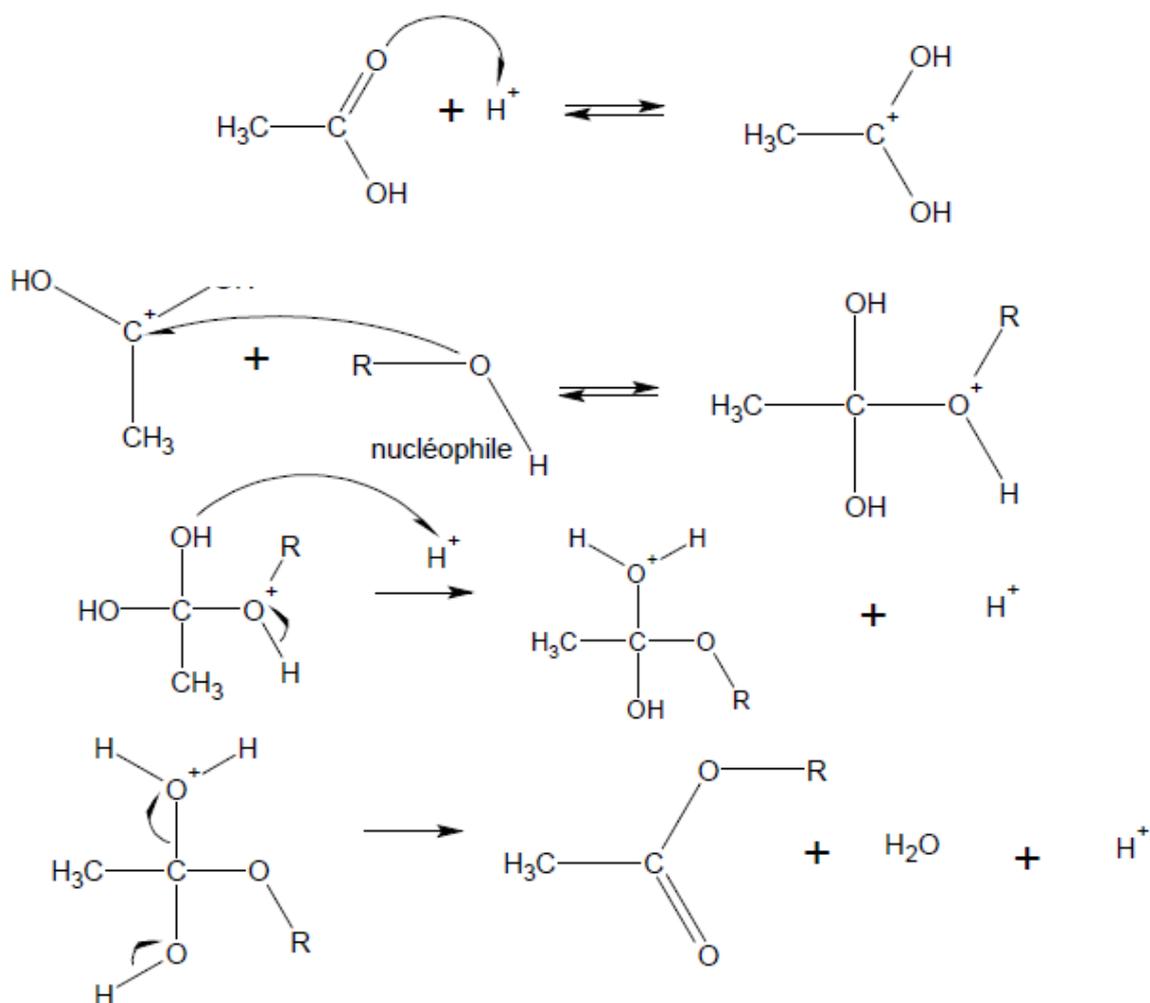
Représentation de Newman							
Désignation	A Éclipsée / synpériplanaire	B Décalée Gauche / synclinale	C Éclipsée / anticlinale	D Décalée anti / antipériplanaire	C Éclipsée / anticlinale	B Décalée Gauche / synclinale	A Éclipsée / synpériplanaire

Prise en main : représentation d'un mécanisme

Représenter, sur Isisdraw ou chemsketch, l'équation bilan suivante :



Représenter, sur Isisdraw ou chemsketch, le mécanisme suivant (en ajoutant les doublets non liants) :



Prise en main : représentation d'un schéma de montage

Il est également possible d'utiliser chemsketch pour représenter des schémas de montage. Ceux-ci sont réalisés en mode « draw ». Une bibliothèque de matériel de laboratoire se trouve dans le menu « templates », « template windows ».

Représenter les schémas légendés des montages suivants :

- Dosage
- Montage à reflux avec contrôle de l'ajout des réactifs et de la température.
- Extraction en ampoule à décanter
- Montage à reflux avec contrôle de la température
- Montage à reflux avec contrôle de l'ajout des réactifs.
- Distillation fractionnée
- Filtration sous pression réduite.

Exercices : utilisation de logiciels en chimie organique

Représentation de molécules

Représenter les molécules suivantes (respecter les configurations et/ou conformations demandées) :

- (S) 2-(4-chlorophényl)propan-1-ol en utilisant les conventions de Cram
- (1S,3S) 1-éthyl-3-méthylcyclopentane en utilisant les conventions de Cram
- (3R)-3-éthyl-4-hydroxy-3,4-diméthylpentanal
- (2R,3S) 2-chloropentane-3-ol en projection de Newman suivant l'axe C₂-C₃, conformation décalée

Utilisation des « templates »

Représenter les molécules suivantes :

- Gonane et cardanolide (stéroïdes) et dénombrer le nombre de stéréoisomères
- Adénine et Thymine
- α-D-glucopyranose en forme Haworth, chaise, représentation de Cram et de Fischer

Nom des molécules

Donner le nom des molécules suivantes :

