

Notice simplifiée des logiciels de création et visualisation de molécules ChemSketch et ACD 3D Viewer

À l'ouverture de **ChemSketch**

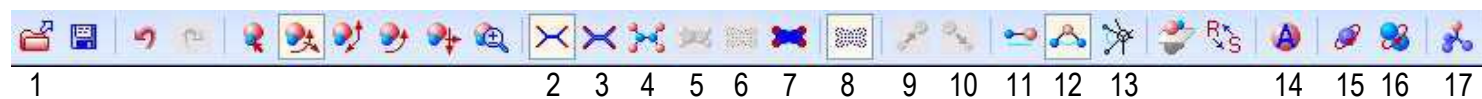


- ✓ Par défaut, le carbone est sélectionné dans la barre des éléments chimiques à gauche :
- ✓ Un clic sur la feuille fait apparaître le groupe : CH_4 (les hydrogènes sont placés d'office). Un "clic" sur l'atome de carbone, puis un "glisser sans relâcher", permet de constituer une molécule comportant 2 atomes de carbone et des hydrogènes. À partir de 3 atomes de carbone, ceux du milieu de la molécule n'apparaissent plus.
- ✓ Pour sélectionner (à supprimer, une molécule à enregistrer...), cliquer avant sur le bouton :
- ✓ Pour faire apparaître tous les atomes de carbone d'une molécule (après sélection) dans le menu **Tools**, utiliser **Structure Properties**, cocher "All" :
- ✓ Pour faire apparaître les liaisons avec les atomes d'hydrogène, utiliser **Add Explicit Hydrogens** dans le menu **Tools**
- ✓ Pour obtenir une vue en 3 perspective, sélectionner la molécule choisie, ensuite utiliser : **Tools / 3D structure optimization**, ou cliquer sur le bouton : , une fenêtre s'ouvre choisir :
- ✓ À présent, en cliquant sur un atome de carbone de cette molécule, on peut la faire tourner, en faisant glisser la souris car le bouton est sélectionné.
- ✓ On peut obtenir le nom de la molécule par le menu : **Tools / Generate** ► **Name for Structure**
- ✓ On peut obtenir la formule brute de la molécule par le menu : **Tools / Calculate** ► **Molecular Formula**
- ✓ Pour obtenir la **vue en trois dimensions**, on clique sur : , ce qui ouvre le logiciel **ACD 3D Viewer**.
- ✓ Pour revenir sur **Chemsketch**, cliquer sur : en bas de la fenêtre.
Les boutons en bas de la fenêtre permettent de passer de ACD 3D Viewer vers ChemSketch et inversement de ChemSketch vers ACD 3D Viewer une fois que les deux logiciels sont ouverts.
- ✓ Sous le menu Edit, passer en mode Draw : **Draw** . ChemSketch se comporte alors comme un logiciel de dessin vectoriel très performant.

Dans le logiciel **ACD 3D Viewer**



Barre d'outils :



- ✓ Le bouton n°1 permet de charger des molécules déjà enregistrées.
- ✓ Les boutons n°2 à 8 sélectionnent le type de modèle choisi. Le modèle de l'icône n°4 est recommandé mais seul le modèle de l'icône n°2 permet de faire apparaître les liaisons multiples.
On peut augmenter ou réduire la taille des atomes sans changer la taille de la molécule avec les boutons n°9 et 10.
- ✓ Le bouton n°11 permet de mesurer la distance entre deux atomes : cliquer successivement sur les deux atomes et lire la réponse dans la barre inférieure. Attention, les longueurs sont données dans une unité sous multiple du mètre l'angström : $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$.
- ✓ Le bouton n°12 permet de mesurer l'angle formé par trois atomes : cliquer successivement sur les trois atomes.
- ✓ Le bouton n°14 permet de modifier les couleurs du fond d'écran et des atomes représentés.
- ✓ Les boutons n°15 et 16 produisent une rotation automatique.
Sans cette option, on peut toujours faire tourner la molécule avec la souris.
- ✓ Le bouton n°17 permet une optimisation 3D avec les atomes d'hydrogène apparents si une formule semi-développée avait été importée de Chemsketch.