

NOTICE SIMPLIFIEE

CHEMSKETCH version12

Le logiciel ChemsSketch est un logiciel pour présenter et manipuler des modèles moléculaires.

Ouvrir le logiciel par un double clic gauche sur l'icône **ChemSketch**

A gauche de la page, existe une boîte de dialogue avec les atomes. L'atome de carbone est choisi par défaut. Le premier bouton donne accès à tous les atomes réunis dans un tableau appelé classification périodique.

Au centre, existe une page blanche où on dessine la molécule.

Comment dessiner la molécule de butan-2-ol et la visionner en 3D?

1. Choisir l'atome de carbone à gauche de l'écran en cliquant gauche dessus.
2. Effectuer un clic gauche sur la page blanche. Il apparaît la molécule CH₄.
3. Faire un autre clic gauche sur la molécule CH₄. On ajoute alors un autre atome de carbone sur l'atome de carbone cliqué. Il apparaît donc la molécule CH₃-CH₃. Comme le butan-2-ol contient une chaîne carbonée linéaire de 4 carbones, il faut donc répéter cette opération pour aligner 4 carbones. La formule apparaît alors selon une écriture topologique. Chaque angle de la ligne brisée signifie la présence d'un atome de carbone. En cas d'erreur, on peut annuler la dernière opération effectuée en ouvrant le menu **Edi**t par un clic gauche puis en sélectionnant **Undo draw**. (Remarquer qu'en cliquant sur une liaison on peut la doubler)
4. Le butan-2-ol contient un groupement OH sur le deuxième carbone. Pour ajouter ce groupement, sélectionner par un clic gauche l'atome d'oxygène O à gauche de la page, puis maintenir un clic gauche sur le deuxième carbone et faire glisser vers l'extérieur. Quand on lâche le clic, il apparaît le groupement OH.
5. Pour visualiser tous les atomes, ouvrir le menu **Tools** par un clic gauche puis sélectionner **3D structure optimization**
6. En maintenant un clic gauche sur la molécule et en faisant glisser, on peut visualiser la molécule en 3 dimensions
7. Pour obtenir le nom de la molécule, ouvrir le menu **Tools** puis sélectionner **Generate Name for Structure**
8. Pour visionner la molécule en 3D, cliquer gauche sur l'icône 3D Viewer (3eme icône en haut à droite en partant de la droite).
La molécule est transférée dans un nouveau logiciel 3D Viewer. 
9. Pour visionner le modèle moléculaire éclaté, ouvrir le menu **View** puis sélectionner **Balls & sticks**. Le modèle moléculaire apparaît.
10. En maintenant un clic gauche sur la molécule et en faisant glisser, on peut faire tourner la molécule.
11. Pour obtenir le modèle compact, ouvrir le menu **View** et sélectionner **Spacefill**
12. Pour changer la couleur bleu de l'atome de carbone en noir, ouvrir le menu **Options** et sélectionner **Colors...** Une boîte de dialogue apparaît. Choisir la couleur **cyan** pour **background** et la couleur **black** pour l'élément **carbon**. Valider les modifications en cliquant gauche sur **OK**.
13. Une mise en rotation automatique de la molécule est possible en ouvrant le menu **Tools** et en sélectionnant **Auto Rotate**.
14. Cliquer gauche sur ChemsSketch en bas de l'écran pour revenir au logiciel ChemsSketch.
15. Ouvrir **File** et sélectionner **New** pour commencer un nouveau fichier ou **Close** pour fermer le logiciel.

Remarques : Les fonctions du logiciel peuvent aussi être lancées par les icônes dans la barre des tâches ou les touches de raccourci (lettre soulignée dans les fonctions).