

# 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 :



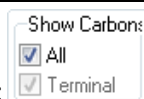
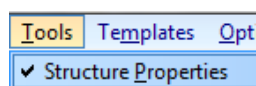
✓ Un clic sur la feuille fait apparaître le groupe :  $\text{CH}_4$  (les hydrogènes sont placés d'office). Un "clic" sur l'atome de carbone, puis un "glisser sans relâcher", permet de constituer une molécule comportant 2 atomes de carbone et des hydrogènes. À partir de 3 atomes de carbone, ceux du milieu 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



, cocher "All" :

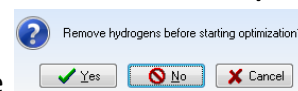
✓ Pour faire apparaître les liaisons avec les atomes d'hydrogène, utiliser

**Add Explicit Hydrogens**

dans le menu

**Tools**

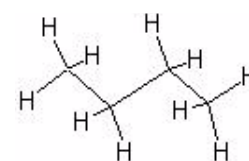
✓ Pour obtenir une vue en 3 perspective, sélectionner la molécule choisie, ensuite utiliser : **Tools / 3D**



**structure optimization**, ou cliquer sur le bouton :



choisir : **No**



✓ 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**

**1-ChemSketch** **2-Copy to ChemSk** **3-3D View**

et inversement de **ChemSketch** vers **ACD 3D Viewer**

**1-ChemSketch** **2-Copy to 3D** **3-3D View**

une fois que les deux logiciels sont ouverts.

✓ Sous le menu Edit, passer en mode Draw :

**Structure** Draw

. ChemSketch se comporte alors comme un logiciel de dessin vectoriel très performant.

## Dans le logiciel **ACD 3D Viewer**



Barre d'outils :



1

2

3

4

5

6

7

8

9

10

11

12

13

14

15

16

17

✓ 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.