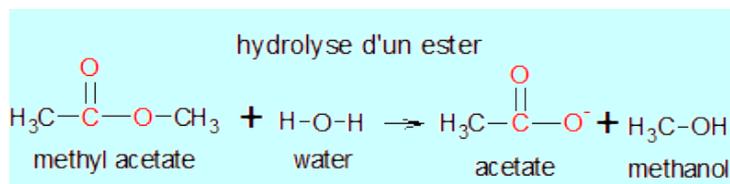


1- équations d'une réaction chimique :

L'utilisation de Chemsketch n'est généralement pas utile si les formules sont brutes. L'éditeur de texte suffit .

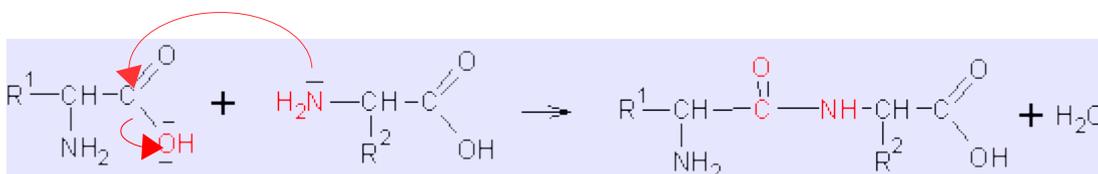
Si les formules sont semi-développées (cas de la chimie organique) Chemsketch est très pratique .Utiliser le mode « **structure** » du logiciel.



Pour inscrire les noms des réactifs:>**Tools>Generate>Name for structure**

Après écriture des formules dans Chemsketch, enregistrer dans le dossier « Images » de l'ordinateur:>**File>Export>**sélectionner le format **PNG**.

L'image peut ensuite être complétée (couleur de fond/ caractères...) dans le traitement de texte.



2- Représentation à 3 dimensions :

Exemple : soit à représenter les 2 énantiomères du Butan-2-ol :

utiliser le mode « structure » (le mode draw ne sera pas utilisé pour cet ex)

a-Commencer par représenter la formule semi développée du butan-2-ol(fig inf à gauche):

>**C>CH4>**liaison «> Draw normal »>**CH3-CH2-CH2-CH3>O >Draw normal**(sur le 3ème C) .

Pour optimiser la formule avant le passage en 3D :

b-Préparer le modèle pour passage en 3D :

Sélectionner la formule (cadre rectangulaire)>**Tools 3D Structure Optimisation**.

La molécule a l'aspect de l'un des 2 modèles à droite

C-Passage en 3 D :

Barre de Menus : >**ACD/Labs>3D viewer**. (accès **logiciel 3D** : le fond noir apparaît)

Barre des tâches : **1-Chemsketch 2-copy to 3D** (la molécule apparaît en 3D)

D-Optimisation de l'image :

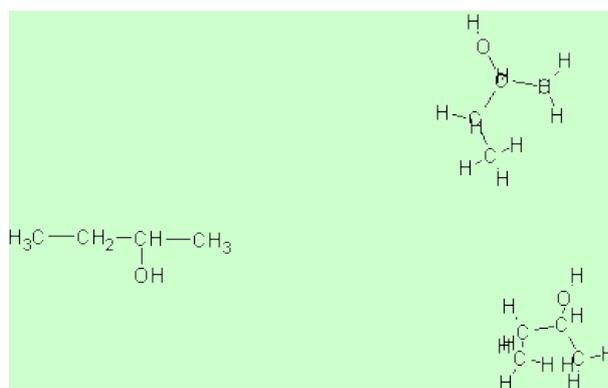
>**View>ball and stick>Label all>Resize** (loupe)

>**3D rotate>Mirror** (image à travers un miroir)

E-Enregistrement de l'image dans chemsketch :

Copy to chemsketch>OK>NO

>> **dans chemsketch ”** pour obtenir la molécule et son image (dessin de droite)



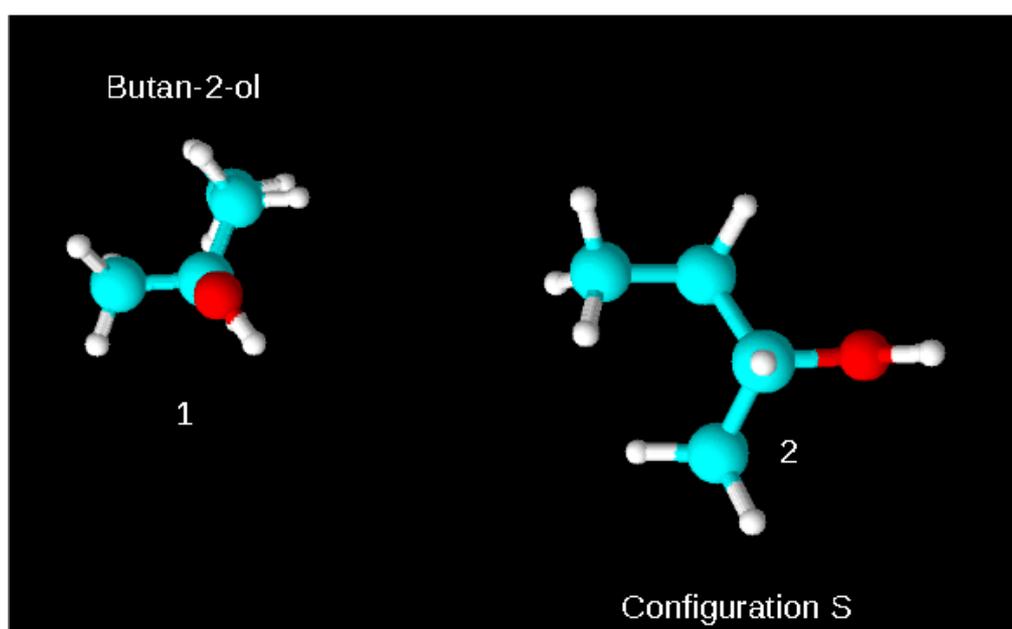
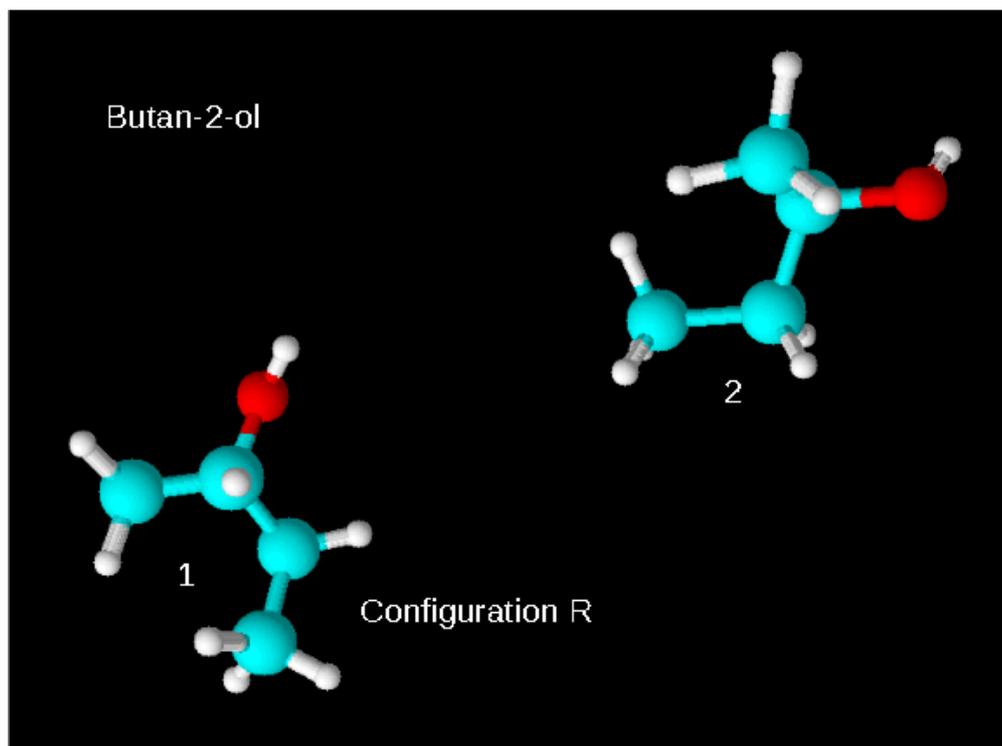
F- Transfert des 2 modèles dans le logiciel 3D :

Copy To 3D ,On obtient l'image ci dessous.

G-Reconnaissance des 2 configurations :

Repérer le carbone asymétrique, placer la liaison -C-H perpendiculaire au plan de la fig , regarder l'ordre des groupements en tournant autour de CH.

Résultat : voir fig ci-dessous



Modèles réalisés avec SCHEMSKETCH

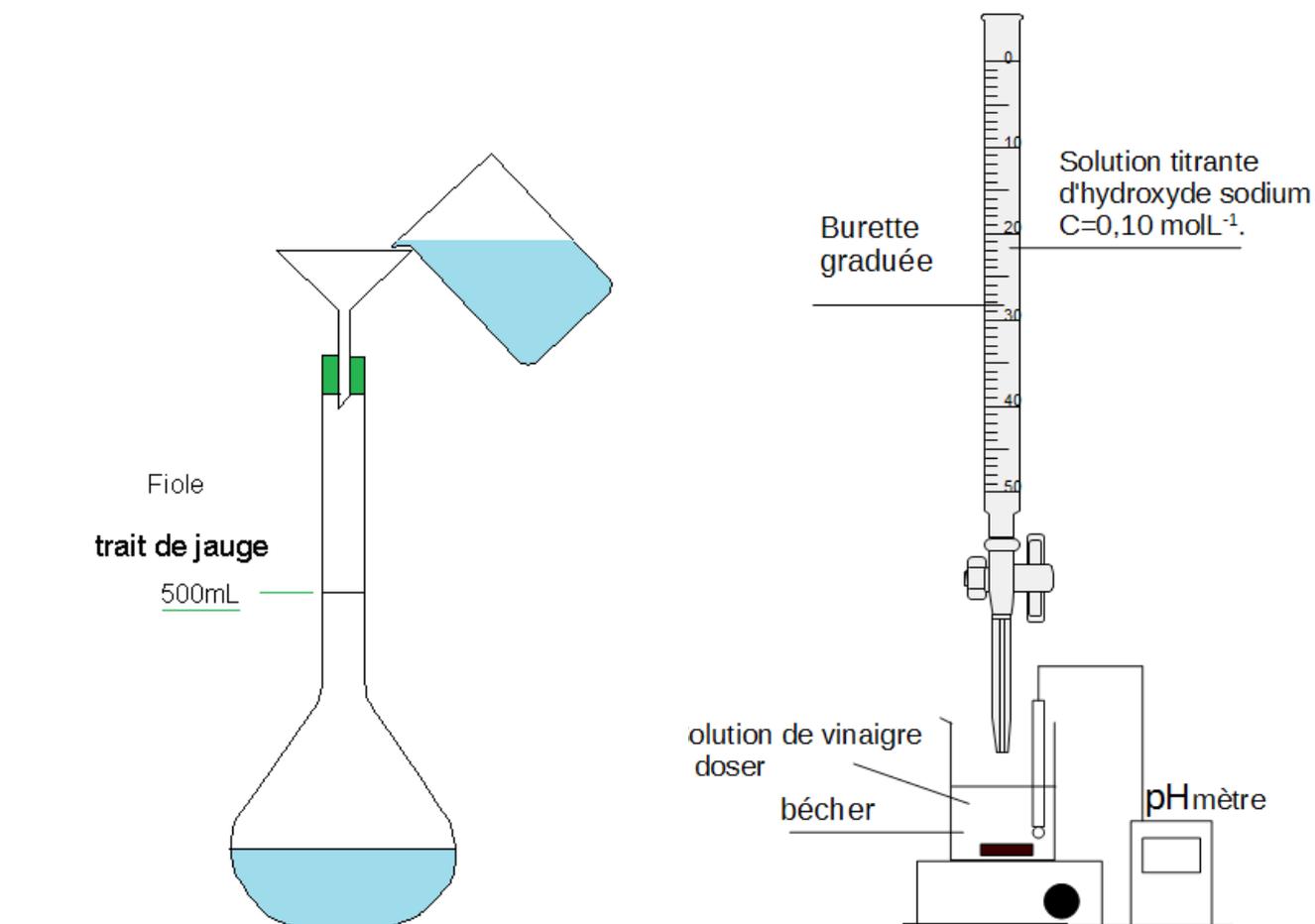
3- Dessin d'outils de labo

Commencer par réduire la taille de la page à 50 %

Utiliser le mode « **Draw** » de Chemsketch.

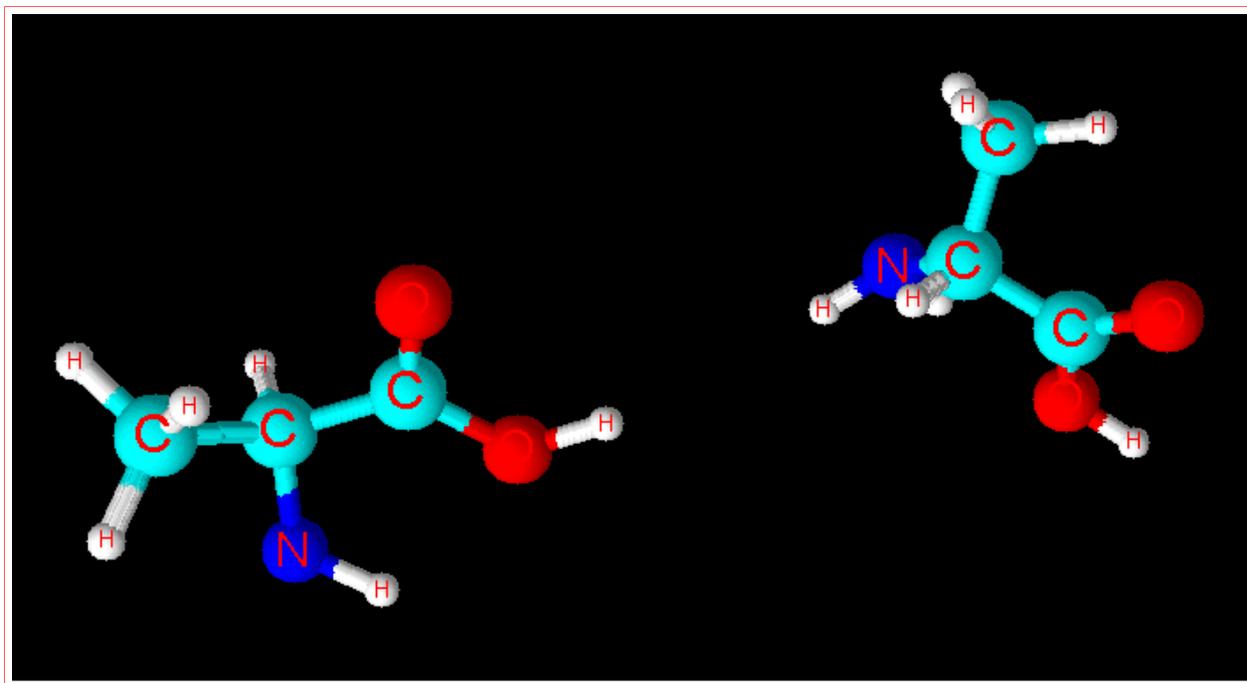
>Templates Window>Labkit>6(7)Analytical

Pour enregistrer dans « Images » de l'ordinateur, >File>Export et indiquer le format de l'image : PNG en bac de la liste



très utile dans les documents

4- Acides aminés énantiomères (Glycine)



5- Formules topologiques :

Commencer par régler les paramètres de la fenêtre : « propriétés des structures »

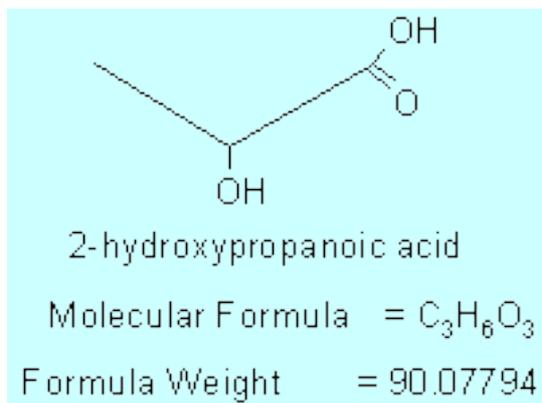
Tools>structure properties>décochez

« All »>current style : choisir ACS puis valider :

>Apply>Set Default.

Passer au dessin :

Commencer par **>C** sur la colonne de gauche puis dessiner une liaison (**draw normal**):un CH₃ apparaît temporairement puis s'efface. Poursuivre l'enchaînement (**draw**) etc . En sélectionnant **>O**, construire -OH et COOH.



En se déplaçant avec la souris sur les noeuds on fait apparaître tous les atomes présents à chaque nœud. Ce logiciel permet de mieux maîtriser les règles de représentation des formules topologiques.

Génial !

Pour indiquer le nom : **>Tools>Generate>Name of structure.**

Pour indiquer la formule et le poids moléculaire: **>Tools>calculate>molecular Weight.**