

Lycée Claude de FRANCE-ROMORANTIN  
Première S

## TP Construction de molécules organiques alcanes et alcènes

### Objectif :

- Utilisation de logiciels de construction et visualisation de molécules,
- Découvrir la correspondance entre formule semi-développée et écriture topologique,
- Distinguer les hydrocarbures linéaires, ramifiés, cycliques,
- Savoir donner le nom des alcanes, prévoir les isomères de constitution.


### 1. Prise en main du logiciel ChemsSketch :

C'est un logiciel libre et gratuit (Freeware) en anglais qui permet de dessiner des molécules et de les visualiser en 3d. On peut le télécharger à l'adresse <http://www.acdlabs.com> (8,5Mo), pour ceux qui n'ont pas d'accès à l'Internet un CDROM avec différents outils utiles est disponible.

- Ouvrir la page web contenant le mode d'emploi simplifié, (Intranet Physique chimie Mode d'emploi ChemSketch).



- Lancer le logiciel (icône du bureau), attention au démarrage il faut cliquer sur OK et non sur les autres boutons qui provoquent une connexion sur le site de l'éditeur afin d'acquiescer la version payante du logiciel.

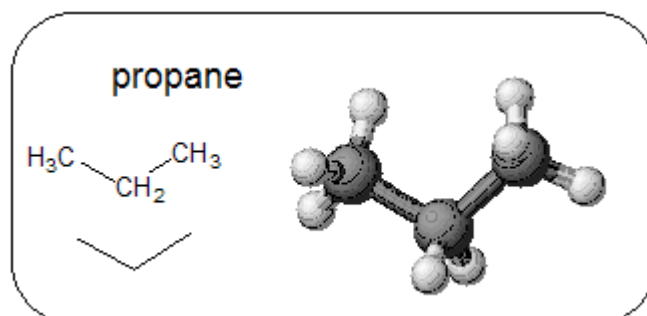
- Construire les premières molécules, au départ le logiciel est en mode Structure c'est le mode qui permet de construire les molécules en respectant les règles de l'octet et du duet, attention par défaut c'est l'élément C carbone qui est activé chaque clic va construire une molécule de méthane ! Pour construire une molécule avec plusieurs atomes de carbone il suffit de maintenir le bouton gauche enfoncé et de relâcher pour placer un nouvel atome. On peut aussi utiliser le bouton  (Draw Chains) qui permet de construire directement une chaîne carbonée.

- Les boutons suivants sont très utiles :

Sélection en mode Structure , Gomme  (atome par atome)

### 2. Alcanes à chaînes linéaires non ramifiées :

- Pour les 3 premiers alcanes construire une fiche analogue à l'exemple du propane donné ci-contre, il faut le nom, la formule semi-développée, l'écriture topologique (sauf pour le méthane) et l'image 3d du modèle éclaté. Suivre les indications ci-dessous pour réaliser ces fiches qui seront imprimées et utilisées en cours, il faudra réduire les images afin de faire tenir les 4 fiches et le III) dans une page.
- Enregistrer le document ChemSketch dans votre répertoire personnel (Menu File Save)
- Pour obtenir une formule topologique :




Dessiner la formule semi-développée, si les atomes n'apparaissent pas tous, vérifier à l'aide de Tools, Structure Properties, Onglet Common que All et Terminal sont cochés dans Show carbon.

Copier cette formule, (Control C puis Control V),

Sélectionner cette copie et dans la palette Structure Properties, Onglet Common décocher All et Terminal dans Show carbon. Cliquer sur Apply, la formule topologique doit apparaître.

- Pour générer le nom :

Sélectionner la molécule et cliquer sur l'icône  (Generate Name from Structure), le nom apparaît dans une zone de texte, il est possible de le modifier en mode Draw (il faut sélectionner et cliquer sur



- Pour obtenir une représentation en 3d :

Lancer le 3D viewer (Menu ACD/labs 3D viewer), les molécules déjà construites apparaissent, revenir à ChemSketch (bouton ChemSk en bas à gauche).

Copier et coller la formule semi-développée à représenter, cliquer sur l'icône (3D Optimization) et copier dans le visualisateur avec le bouton Copy to 3D situé en bas.

Le visualisateur permet différents types de représentations (il faut utiliser les boutons), avec la souris faire tourner la molécule de manière à voir tous les atomes.

Avant de copier l'image il faut choisir un fond blanc (Menu Options Colors) et les couleurs standard pour les atomes : (C noir, H blanc qui sera visible tout de même, O rouge N bleu Cl vert).

Coller l'image dans le document à côté des formules, il faut réduire la taille de cette image à l'aide des poignées habituelles.

Pour entourer l'ensemble de la fiche il suffit de se placer en mode Draw et de tracer un rectangle non rempli autour des éléments, on peut ensuite grouper les éléments. En mode Draw ChemSketch se comporte comme un logiciel de dessin vectoriel très performant avec la chimie en plus.

### 3. Isomérisation du butane

Représenter et nommer les 2 isomères du butane C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>

### 4. Alcanes à 6 carbones

- Construire tous les alcanes possédant 6 carbones :

La chaîne peut être linéaire, ramifiée ou cyclique. Pour chaque molécule trouvée, il faut générer le nom et vérifier qu'il est bien différent des noms déjà trouvés. Inutile de faire la représentation 3d.

Il y a 6 molécules au moins à trouver.

- Règles de nomenclature :

Déduire des noms précédents les règles appliquées par le logiciel pour trouver les noms des alcanes, donner les règles françaises équivalentes.

- Isomères :

Parmi les molécules précédentes quelles sont celles qui ont la même formule brute ?

Combien l'hexane possède-t-il d'isomères ? De quelle type d'isomérisation s'agit-il ?

- Imprimer la page après vérification par le professeur

### 5. Les alcènes

Comparaison de l'éthane et de l'éthène (éthylène) :

Sur une nouvelle page, reprendre la fiche de l'éthane (copier coller) puis créer une fiche analogue pour l'éthylène c'est le plus simple des alcènes. Comparer les 2 molécules en utilisant le visualisateur 3d attention celui-ci ne montre pas les doubles liaisons mais il en tient compte pour la géométrie de la molécule.

Mesurer la distance C-C et C-H dans les 2 molécules (il faut utiliser le visualisateur 3d).

Comparer la liaison C-C et la disposition spatiale des atomes dans les 2 molécules.

- Création de fichiers de caractéristiques spatiales de molécules :

ChemSketch possède une autre fonction très intéressante, il peut générer à partir d'une molécule construite à l'écran et optimisée 3d, un fichier .MOL qui permet de visualiser la molécule avec un simple navigateur internet muni du Plug-In Chime. Ce "Plug-In" est aussi gratuit mais provient d'un autre éditeur, on peut le télécharger à l'adresse : <http://www.mdli.com/support/chime/default.html>. Il faut

s'enregistrer avant de télécharger. ATTENTION il faut le fichier MDLCHIME2.6SP4.EXE avec IE6.

Pour créer un fichier .mol il faut sélectionner la molécule optimisée 3d et choisir File Export il suffit de préciser le nom du fichier et la localisation.

On peut visualiser directement la molécule dans le navigateur en faisant un double clic sur le fichier .mol créé, mais il faut utiliser le clic droit pour modifier les paramètres par défaut, ou utiliser l'interface simplifiée de chime, pour cela il faut copier les fichiers de P:\1ereS\voir\_mol dans votre dossier au même endroit que les fichiers .mol créés et lancer voir\_mol.htm.

Comparer avec Chime les structures de l'éthane et de l'éthylène.

- Isomérisation Z/E des alcènes :

Construire les 2 molécules de but-2-ène, vérifier qu'il s'agit de 2 isomères et qu'il est impossible de passer de l'un à l'autre par rotation autour des liaisons C-C.

Ces dernières observations peuvent être faites sur l'intranet directement avec Chime (il suffit de choisir molécules 3d alcanes-alcènes).

---