

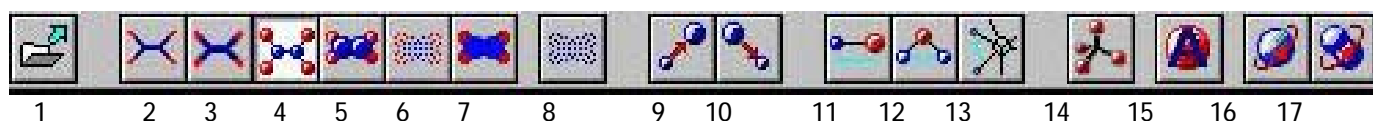
Modèles moléculaires assistés par ordinateur

I Révisions

6a Rappeler le code des couleurs et la structure électronique des atomes suivants :

Atomes Z	hydrogène 1	oxygène 8	carbone 6	azote 7	chlore 17	soufre 16
Couleurs						
Structures						

o Charger le logiciel ACD/3D Viewer (SHOW3D.EXE). Il permet de visualiser des molécules en trois dimensions.



- L'icône 1 permet de charger des molécules au format *.MOL. On utilisera ici le format *.S3D accessible par le menu *FILE, OPEN*.
 - Les icônes 2 à 8 sélectionnent le type de modèle choisi. Le modèle de l'icône 4 est recommandé. On peut augmenter ou réduire la taille des atomes sans changer la taille de la molécule avec les icônes 9 et 10.
 - L'icône 11 permet de mesurer la distance entre deux atomes (cliquer successivement sur les deux atomes et lire la réponse dans la barre inférieure. Attention, dans le logiciel les longueurs sont données dans une vieille unité illégale : l'angstroem. Veiller à les convertir dans l'unité du système international appropriée. ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$).
 - L'icône 12 permet de mesurer l'angle formé par trois atomes : cliquer successivement sur les trois atomes.
 - L'icône 16 produit une rotation automatique. Sans cette option, on peut toujours faire tourner la molécule avec la souris.
- o Charger les molécules dont les noms de fichiers sont les numéros de la 1^{ère} colonne du tableau suivant.
- 6b Le compléter.

N°	formules brutes	noms	formules de Lewis
001			
005			
006			
009			
007			
002			

010			
-----	--	--	--

2 Les simples, doubles et triples liaisons carbone-carbone

- o Charger les molécules 002, 003 et 004.
- 6c Donner leurs formules semi-développées.
- 6d Mesurer les distances CC pour chaque molécule et les classer par ordre croissant.

3 Le cyclohexane

6e Les molécules 039 et 040 sont-elles identiques ? Si non, montrer leur différence par une représentation en perspective des deux molécules.

6f Mesurer les angles CCC et comparer les distances CC. Les molécules peuvent-elles être planes ? Le justifier en essayant de construire un modèle plan en utilisant un rapporteur pour tracer les angles précédemment mesurés.

4. Le benzène

- 6g Quelle est la particularité spatiale de la molécule 036 ?
- 6h Mesurer les distances CC. Comparer avec celles de la molécule précédente.
- 6i Que peut-on en conclure ?
- 6j Mesurer les angles CCC. Comparer avec les résultats du cyclohexane et justifier la réponse à la question g.

5. Alcènes

- 6k Donner les formules semi-développées des molécules 019, 020 et 021.
- 6l Quelle est leur particularité ?

6. L'éthanol

- 6m Donner la formule brute, la formule semi-développée et la représentation de CRAM de la molécule 016.

7. C-O et C=O

- 6n Mesurer les distances CO des molécules 015, 018, 026 et 027.
- 6o Justifier les différences et les similitudes.

8. Alcanes

- 6p Donner les formules semi-développées des molécules 013 et 014.
- 6q Quelle propriété ces molécules possèdent-elles ?

9. L'éthanamide

- 6r Représenter tous les atomes coplanaires de la molécule 044.

10 Eau et sulfure d'hydrogène

- 6s Comparer les angles HOH et HSH des molécules 005 et 022.
- 6t Quelle hypothèse peut-on avancer pour les éléments oxygène et soufre ?

11 Dichloroéthanes

- 6u Donner les formules semi-développées des molécules 029 et 030.
- 6v Quelle propriété ces molécules possèdent-elles ?