

I- Rappels

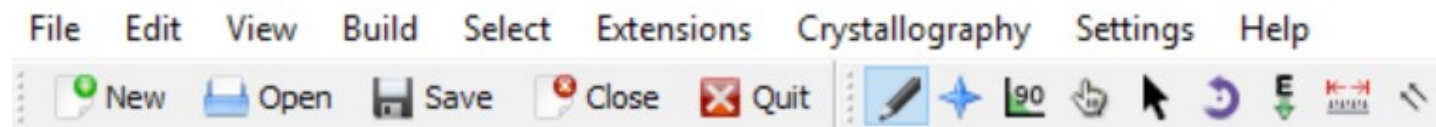
Retrouver sur Internet le code couleur des atomes suivants, ainsi que leur structure électronique

Atomes Z	Hydrogène 1	Oxygène 8	Carbone 6	Azote 7	Chlore 17	Soufre 16
Couleurs						
Structures						

II- Avogadro

Avogadro est un logiciel gratuit et Open Source d'édition et de visualisation de molécules en 3D simple d'utilisation

Il est possible de le télécharger depuis le site Sourceforge : <http://sourceforge.net/projects/avogadro/files/latest/download>



1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
---	---	---	---	---	---	---	---	---	----	----	----	----	----

- L'icône 2 permet d'ouvrir une molécule. Le logiciel supporte divers formats, notamment le *.cml (par défaut).
- L'icône 6 est le mode édition : à chaque clic gauche sur la fenêtre, un nouvel atome sera créé, en fonction de ce qui est choisi dans le panneau de gauche.
- L'icône 7 est le mode visualisation en rotation libre, pour faire tourner la molécule.
- L'icône 8 permet de visualiser les angles autour d'un atome en particulier
- L'icône 9 déplace l'atome
- L'icône 12 est un mode d'optimisation qui redessine la molécule de façon à ce qu'elle se rapproche de sa forme réelle
- L'icône 13 permet de mesurer la distance entre chaque atome, il suffit de cliquer sur les 2 atomes qui vous intéressent, ou 3 atomes pour mesurer un angle. Attention, dans le logiciel les longueurs sont données unité n'appartenant pas au Système International : l'ångström. Veiller à les convertir dans l'unité du système international appropriée. ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$).

III- Particularités des molécules

1) Reconnaître des molécules

Charger les molécules dont les noms de fichier sont les numéros de la première colonne. Le compléter et si besoin, s'aider d'internet pour trouver le nom de la molécule.

N°	Formule brute	Nom	Formule développée
001			
... Faire de même avec les molécules 002, 005, 006, 007 et 009			
010			

2) Les liaisons simple, double, triple carbone-carbone

- Charger tour à tour les molécules 002, 003 et 004.
- Indiquer leurs formules semi-développées
- Mesurer la distance entre les 2 carbones et donner le rapport qui existe entre la nature de la liaison (simple, double, triple) et la distance qui sépare les deux atomes de carbone.

- Mesurer les distances C-C et C=C. Comparer avec la molécule précédente.
- Que peut-on en conclure ?

3) Le cyclohexane

Ouvrir la molécule 039.

Mesurer les angles formés par les liaisons C-C-C et les distances C-C. Par un raisonnement géométrique, montrer que la molécule ne peut pas être plane (somme des angles dans un hexagone = 720°)

5) Alcènes

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

6) C-O et C=O

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

4) Le benzène

- Quelle est la propriété spatiale de la molécule 036 par rapport à la molécule 039 ?

7) Alcanes

- Donner les formules brutes et semi développée des molécules 013 et 014
- Quel est leur point commun ?

IV- Construire une molécules

Essayer en vous aidant du tutoriel de dessiner les molécules de butane C_4H_{10} , celle de cyclohexane C_6H_{12} (la molécule 039) et la molécule d'ammoniac NH_3 . (insérer des copies d'écran de vos molécules, pensez à optimiser leur forme!)