

---

## AIMF 04-05 – Exercices sur ordinateur

---

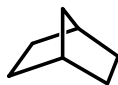
### Session 1, version mac – Dessiner des molécules (JChemPaint) et visualisation de molécules en 3D (vmd)

---

JChemPaint est un logiciel gratuit qui sert à dessiner des molécules. Cela peut s'avérer utile, plus tard, pour vos rapports. Dans cet exercice, vous allez dessiner quelques unes des molécules du cours de Sandrine Gerber.

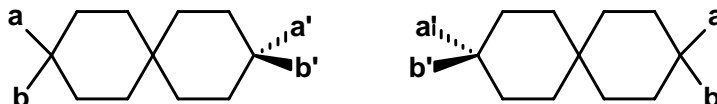
**Pour le rapport: Créer des images de vos dessins. Vous insérerez ces dernières dans vos rapports. Répondre aux questions des exercices. Dans le rapport, inclure une légende avec le nom de la molécule du dessin. Expliquer l'utilité des 2 logiciels que vous avez découverts aujourd'hui. Décrire des applications pour lesquels ils pourraient être utiles dans votre carrière.**

1. Apprendre à utiliser JChemPaint: JChemPaint est très facile et intuitif. Vous pourrez déjà faire beaucoup sans lire le mode d'emploi. Pour avoir une idée des commandes, ou pour savoir comment utiliser une fonction spécifique, lire le texte (très court) sous la section d'aide (menu « help »).
2. Dessiner le bicyclo[2.2.1]heptane.



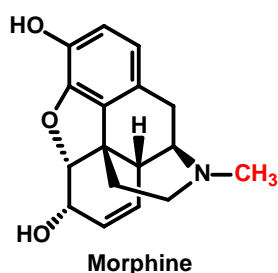
bicyclo[2.2.1]heptane

3. Enantiomères : Spiranes. Vous étudierez les énantiomères plus tard dans le cours, mais le concept est simple à comprendre en faisant le dessin suivant avec JChemPaint : Une molécule est l'image miroir de l'autre (comme votre main gauche et votre main droite). Dessiner les 2 énantiomères ci-dessous, les orienter verticalement (a' et b' devraient être sur le haut de la molécule). Remplacer a' par COO<sup>-</sup> et b' par PH<sub>2</sub>.



4. Dessiner la molécule de morphine avec JChemPaint. Pendant que vous dessinez, essayer d'imaginer la forme 3D de la molécule. Astuce pour dessiner: Insérer d'abord un cycle chimique de la librairie. Sélectionner ensuite une liaison de ce cycle et additionner un autre cycle de la librairie à la liaison sélectionnée. Répéter le procédé jusqu'à obtenir une base convenable. Vous pouvez ensuite adapter les liaisons pour obtenir des liaisons simples ou doubles aux emplacements voulus, et ajouter n'importe quel groupe supplémentaire.

Le seul anneau à être planaire est le benzène. Pouvez vous voir dans quelle direction de l'espace les autres anneaux pointent ? En dessus ou au dessous de l'écran ? Ne répondez pas maintenant, mais pensez y en dessinant la molécule.. Nous reviendrons à ces questions.



5. Visualisation 3D de la morphine

- Démarrer le programme vmd.
- Choisir file  $\Rightarrow$  new molecule  $\Rightarrow$  determine file type  $\Rightarrow$  pdb et choisir le fichier morphine.pdb avec le navigateur « browse ». Cliquer sur « load » et la molécule de morphine apparaît à l'écran.
- Rotation de la molécule: Cliquer sur la molécule et taper 'r'. En maintenant la touche droite de la souris enfoncée, vous pouvez tourner la molécule.
- Translation: Procéder de la même façon que pour la rotation, mais taper 't'.
- Zoom: Idem mais taper 's'.
- Changer la représentation graphique de la molécule : Dans la petite fenêtre 'vmd main', choisir 'graphics'  $\Rightarrow$  'representation'. Une nouvelle fenêtre 'graphical representations' devrait s'ouvrir. Changer "drawing method" à 'CPK', par exemple. Essayer d'autres représentations, comme VDW (van der Waals radii, que vous étudierez bientôt).
- Créer une image: Choisir file  $\Rightarrow$  render, entrer un nom de fichier  $\Rightarrow$  'start rendering'. Une image au format tga, avec la vue actuelle de la molécule, est générée. Vous pouvez insérer cette image dans d'autres documents (par exemple dans votre rapport Word).

Sur la représentation bidimensionnelle de l'exercice 1 (reproduite ci dessous), le carbone mis en évidence par une flèche rouge est il au dessus (vers vous) ou en dessous de

l'écran ? Insérez dans votre rapport l'image vmd qui vous permet d'arriver à cette conclusion. Que pouvez vous dire des représentations bidimensionnelles, comparées à la réalité tridimensionnelle ?

