

TPN°3

Analyse conformationnelle de molécules organiques

But : Construire la molécule X et chercher par les méthodes semi-empiriques AM1 et PM3 tous ses conformères stables.

Construire la molécule **X**.

- Utiliser les méthodes de semi-empiriques pour générer les conformères les plus stables.
- Sauvegarder les structures de conformères stables sous le format MDL.
- Utiliser le logiciel Chem Draw Ultra pour visualiser les structures.

Le rapport doit contenir :

- ✓ Le but de travail et les méthodes utilisées.
- ✓ Des structures 2D préparées avec Chem Draw.
- ✓ Des structures 3D préparées avec Chem 3D.
- ✓ La description des résultats obtenus par les calculs moléculaires.

Molécule X:

