

---

## TD de Modélisation Moléculaire : Analyse conformationnelle de molécules organiques

---

**But :** Construire la molécule **X** et chercher par les méthodes de la Mécanique Moléculaire et de Monte-Carlo tous ses conformères stables.

1. Construire la molécule **X**.
2. Utiliser les méthodes de minimisation de l'énergie et/ou calculs de l'énergie en fonction d'un ou deux angles de torsion pour effectuer l'analyse conformationnelle de la molécule **X**.
3. Utiliser la méthode de Monte Carlo pour générer les conformères les plus stables.
3. Sauvegarder les structures de conformères stables sous le format PDB.
4. Utiliser le logiciel WebLabViever pour visualiser les structures.

Le rapport doit contenir :

le but de travail et les méthodes utilisées ;  
des structures 2D préparées avec ISISDraw ;  
des structures 3D préparées avec WebLabViever  
la description des résultat obtenus par les calculs moléculaires ;

Molécules **X** :



